

# Apuntes de las clases de Física Teórica II.

”Esto no es un libro de texto” (J.G. Roederer)

Juan Pablo Paz<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física, FCEyN, UBA & IFIBA (UBA, Conicet)  
Pabellón 1, Ciudad Universitaria, 1428 Buenos Aires, Argentina)

(Dated: March 18, 2015)

Apuntes informales de las clases del curso Física Teórica II. FCEyN UBA (primer cuatrimestre 2014 y 2015). Borrador. Coniene errores (de tipeo y de los otros!).

## Contents

A. Introducción	3	E. Medidas de entrelazamiento	31
B. El estado de un sistema	3	F. Ejemplo: Dos spines. Base de Bell.	32
C. El estado de un spin 1/2, la mas cuántica de las propiedades.	4	G. Correlaciones clásicas	33
D. Secuencias de experimentos de SG	5	H. Otro ejemplo: una partícula en tres dimensiones	34
E. Analogía con la polarización de la luz	8	I. Contextualidad: un ejemplo con dos spines	34
F. Equivalencia entre PBS y SG: experimentos de SG con fotones individuales	9	<b>VI. Clase 7: Teoría de Transformaciones Físicas en el Espacio de Hilbert.</b>	36
G. Cómo describir el estado de un spin 1/2?	10	A. El caso clásico: Transformaciones canónicas	36
H. Propiedades del modelo	10	B. Traslaciones espaciales infinitesimales	37
I. Observables y operadores	12	C. Traslaciones en momento.	37
J. Los experimentos que no se realizan no tienen resultados	12	D. Rotaciones	38
<b>II. Clase 3: Formalismo. Espacios vectoriales, funcionales, operadores (dimensión finita)</b>	14	E. Evolución temporal	38
A. Espacios vectoriales	14	F. Transformaciones físicas en el espacio de Hilbert	38
B. Producto interno hermitiano	14	G. Representante de las traslaciones espaciales.	39
C. Norma	14	H. Traslaciones en momento y en el espacio de fases	39
D. Desigualdad de Schwartz.	14	I. Evolución temporal. Postulado 6 de la Mecánica Cuántica.	40
E. Bases ortonormales	14	J. Rotaciones	40
F. Funcionales lineales. Notación de Dirac	15	K. Ejemplos y comentarios	41
G. Operadores lineales	15	<b>VII. Clase 8: Evolución Temporal.</b>	44
H. Operadores a partir de kets y bras. Proyectores. Algunas virtudes de la notación de Dirac	15	A. Consecuencias de la Unitariedad: No es posible clonar un estado cuántico	44
I. Función de un operador	16	B. Representación de Schrodinger	45
J. Operador Adjunto. Operadores hermíticos y unitarios	16	C. Representación de Heisenberg	46
K. Traza de un operador	16	D. Ecuaciones de Heisenberg para el oscilador armónico	47
L. Operadores diagonalizables	16	1. Teorema de Eherenfest	47
M. Descomposición espectral de un operador.	17	E. Spin 1/2 en un campo magnético	47
N. Operadores compatibles. Teorema: compatibles si y solo si conmutan.	17	F. Representación de Interacción	48
<b>III. Clase 4: Espacios de Hilbert. Distribuciones. Operadores posición y momento</b>	19	G. Oscilaciones de Rabi (se da en la teórica)	48
A. El espacio de las funciones $\mathcal{L}_2$	19	H. Oscilaciones de Raman	50
B. Distribuciones: funcionales que no provienen de funciones	19	<b>VIII. Clase 9: El oscilador armónico.</b>	52
C. Otros ejemplos de distribuciones (transformada de Fourier)	20	A. Operadores de creación y destrucción	52
D. El espacio de estados extendido. Bases continuas	20	B. Autovalores y autovectores del Hamiltoniano	52
<b>IV. Clase 5: Postulados de la mecánica cuántica</b>	22	C. Valores medio de posición y momento	54
A. Los Postulados Cinemáticos: 1-5	22	D. Evolución temporal	54
B. Comentarios y generalizaciones	23	E. Estados coherentes	54
<b>V. Clase 6: Sistemas compuestos.</b>	29	F. Propiedades: Incerteza mínima y completitud	55
A. El espacio de estados. Producto tensorial.	29	G. Relación de completitud y producto interno de estados coherentes	55
B. Estados entrelazados. Descomposición de Schmidt	29	H. Cómo preparar un estado coherente? El oscilador forzado	56
C. Operadores sobre un espacio producto	30	<b>IX. Clase 10: Cuantización del campo electromagnético. Fotones.</b>	59
D. El estado del todo y el estado de cada una de las partes	30	A. Electromagnetismo clásico. Coordenadas generalizadas.	59
		B. Campo en una cavidad. Modos discretos.	59
		C. Cuantización del campo. Fotones.	60
		D. El estado de vacío	60

<b>X. Clases 11, 12 y 13: Interacción fotones y átomos sencillos: Electrodinámica cuántica en cavidades.</b>	62		
A. Interacción de un fotón con un átomo de dos niveles	62		
B. Átomos de Rydberg	62		
C. Átomos de Rydberg en zonas de Ramsey	63		
D. Fotones en cavidades	64		
E. Estados del campo en la cavidad	64		
F. El esquema de un experimento típico	64		
G. Interacción entre un átomo y el campo electromagnético	65		
H. La aproximación y el modelo de Jaynes Cummings.	65		
I. Solución del modelo de Jaynes Cummings	66		
J. Interacción resonante entre el átomo y la cavidad	67		
K. Interacción no resonante entre el átomo y la cavidad	67		
L. El corrimiento de Lamb y el desfasaje inducido por cada fotón	68		
M. Evidencia directa de la cuantización del campo electromagnético	69		
N. Cómo entrelazar dos átomos distantes?	70		
O. Cómo entrelazar el campo electromagnético entre dos cavidades distantes	70		
P. Cómo transferir el estado de un átomo a la cavidad (y viceversa)	71		
Q. Cómo detectar un fotón sin absorberlo?	71		
R. Cómo criar un gato de Schrodinger dentro de una cavidad?	72		
<b>XI. Clase 14: Teleportación: ciencia ficción o física?</b>	74		
A. La evolución temporal representada como un circuito. Operaciones elementales.	74		
B. Preparación y medición de estados de Bell	75		
C. La teleportación	76		
D. Una propuesta concreta: teleportación de un átomo entre dos cavidades	77		
<b>XII. Clase 15: Alternativas a la mecánica cuántica. El origen del azar.</b>	79		
A. Un poco de historia...	79		
B. Einstein contra la mecánica cuántica. EPR	80		
C. Teorías realistas locales. Variables ocultas.	81		
D. Cómo sabemos si no existen teorías de variables ocultas cuyas predicciones coincidan con las de la mecánica cuántica?	82		
E. Desigualdades de Bell: Mecánica cuántica contra teorías realistas-locales	83		
F. Descripción de un experimento sencillo realizado en dos laboratorios.	83		
G. El experimento según las teorías realistas locales.	84		
H. La desigualdad de Bell más sencilla.	84		
I. El experimento según la mecánica cuántica.	85		
J. Otras desigualdades de Bell: CHSH	86		
K. La violación de las desigualdades de Bell	87		
L. El entrelazamiento como un recurso físico	88		
M. Comentarios y metáforas finales	88		
<b>XIV. Clases 19: Momento angular</b>	91		
A. Rotaciones y momento angular	91		
B. Diagonalización simultánea de $\vec{J}^2$ y $J_z$	91		
C. Matrices de $J_x$ y $J_y$ . Ejemplos: spin 1/2 y 1	92		
D. Momento angular orbital	93		
E. Los armónicos esféricos y las rotaciones	94		
F. Representaciones irreducibles del grupo de las rotaciones en $\mathcal{H}_\tau$	94		
G. Momento angular orbital y energía cinética	94		
<b>XV. Clases 20: Suma de Momentos Angulares</b>	96		
A. Dos espines 1/2	96		
B. Suma de momentos angulares	97		
C. Construcción de todos los estados $ j_+, m\rangle$ (la familia $B_{j_+}$ )	97		
D. Construcción de todos los estados de la forma $ j_+ - 1, m\rangle$ (la familia $B_{j_+ - 1}$ )	98		
E. Siguiendo en la escalera descendente de $j$ (generando todas las familias $B_j$ )	99		
F. Método gráfico	99		
G. Acoplamiento espín órbita.	99		
<b>XVII. Clase 23: Teoría de perturbaciones. Caso degenerado y no degenerado.</b>	102		
A. Desarrollo perturbativo	102		
B. Resumen de resultados	103		
C. El caso no degenerado	104		
D. Normalización	104		
E. Ejemplo: El efecto Stark de primero y segundo orden.	104		
<b>XVIII. Clase 24: Estructura fina</b>	106		
A. Corrección relativista en la energía cinética.	106		
B. Tamaño finito del electrón: término de Darwin.	106		
C. Acoplamiento espín órbita	107		
D. Estructura fina del nivel $n = 2$ del átomo de Hidrógeno	107		
1. Introducción: luz cuántica y materia clásica	110		
<b>A. Evolución temporal de operadores de creación y destrucción de varios modos: óptica lineal</b>	110		
<b>B. El caso de dos modos</b>	111		
1. Forma general de una matriz unitaria de $2 \times 2$	111		
<b>C. Divisores de haz no polarizante (BS) y láminas retardadoras</b>	111		
<b>D. Fotones en interferómetros</b>	112		
<b>E. Interferencia de dos fotones (Hong, Ou, Mandel).</b>	112		

## I. CLASES 1 Y 2: INTRODUCCIÓN NO HISTÓRICA. ESTADOS, OPERADORES, PROBABILIDADES

### A. Introducción

La mecánica cuántica nació hace más de un siglo. Lo hizo de manera turbulenta cuando un grupo cada vez más grande de físicos tomó conciencia de que la emisión y absorción de la luz por la materia no podía ser comprendida dentro del marco de las leyes de la física formuladas hasta ese momento. Por esa época reinaban sobre la física el electromagnetismo de Maxwell, la mecánica de Newton y la termodinámica de Boltzmann. La formulación de la nueva mecánica fue una tarea titánica que recayó en personalidades como Planck, Einstein, Bohr, Heisenberg, Schrödinger, Dirac, Fermi, de Broglie, von Neumann, Born, Pauli y muchos otros. El desarrollo de esta teoría comenzó en 1900 y recién cerca de 1930 adquirió finalmente coherencia y solidez internas. Sin embargo los debates sobre los fundamentos y la interpretación de la mecánica cuántica no se han acallado y muchos todavía consideran que existen problemas abiertos, como el famoso “problema de la medición”.

Teniendo en cuenta que la mecánica cuántica ya cuenta con su mayoría de edad evitaremos utilizar aquí un enfoque histórico para presentarla. Tal enfoque puede ser encontrado en la mayoría de los libros de texto y de divulgación científica escritos hasta el presente. Por el contrario, apelaremos a una introducción “brutal” describiendo las bases conceptuales y los aspectos más anti-intuitivos de la física cuántica. El objetivo de estas primeras clases es motivar, a partir de la discusión de experimentos concretos, el escenario de la mecánica cuántica. Es decir, motivar la descripción de los estados de un sistema físico y de sus propiedades observables así como también el poder predictivo de la mecánica cuántica.

La física clásica describe a los estados de un sistema físico de una manera relativamente sencilla. Por ejemplo, el sistema (idealizado) típico es la partícula puntual y su estado se describe mediante un punto en el espacio de las fases. Dicho espacio tiene 6 dimensiones: tres coordenadas que definen la posición del objeto y otras tres que definen su momento. Es decir, el estado de la partícula queda completamente definido si conocemos la posición y el momento. Cabe notar que estas dos magnitudes (posición y momento) son propiedades observables de la partícula: pueden medirse con precisión arbitrariamente alta (e con instrumentos que introduzcan una perturbación arbitrariamente pequeña).

En cambio, la mecánica cuántica describe al estado de un sistema de una manera drásticamente distinta, mucho más abstracta. La principal diferencia es que el estado ya no está unívocamente asociado a las propiedades observables sino que ambos personajes, que son centrales en la física (estado y propiedades), se describen de manera muy distinta. El origen de la diferencia es que la mecánica cuántica acepta un hecho experimental, que

hasta su surgimiento no había sido notado: no es posible determinar los valores de todas las propiedades de un sistema simultáneamente. El proceso de medición, que en la física clásica puede ser considerado como un acto inócuo (si bien cualquier aparato real causa un efecto sobre el objeto medido, siempre imaginamos que en principio nada nos impide construir otro que lo perturbe menos). Como veremos, en la mecánica cuántica el proceso de medición se describe como una interacción y todas aquellas cosas que denominamos “propiedades observables” de un sistema solo definen “canales” mediante los cuales el sistema puede interactuar con el resto del universo. Usando una terminología más precisa, todo aquello que en la física clásica denominamos propiedad observable no es otra cosa más que una magnitud que puede aparecer en el Hamiltoniano de interacción entre el sistema y el resto del mundo (la posición, el momento, el spin, etc). En estas dos clases motivaremos la descripción cuántica de los estados físicos, que son identificados con vectores en un espacio vectorial que tiene una estructura matemática bien definida (un espacio de Hilbert). Las propiedades observables, en cambio, se describen en la mecánica cuántica como operadores lineales que actúan en ese espacio de estados.

Más adelante discutiremos alguna de las consecuencias más radicales de la mecánica cuántica que surgen inevitablemente a partir de esta descripción. Por ejemplo, discutiremos la bien conocida propiedad que establece que no todos los observables pueden ser medidos simultáneamente. Pero también, discutiremos la incompatibilidad de la mecánica cuántica con toda teoría que acepta la idea de que estas propiedades observables tienen valores definidos (es decir, son realmente una “propiedad del sistema”) aunque no los midamos. La mecánica cuántica sólo es compatible con modelos sobre la naturaleza en la que se acepta el principio que condensó Asher Peres en una frase: “Los experimentos que no se realizan, no tienen resultados”. Si bien este no es el objetivo del curso, tomaré un tiempo para discutir las implicancias filosóficas de estas ideas, que parecieran conducir inevitablemente al idealismo (o inclusive al solipsismo). Esto no es así ya que la mecánica cuántica, pese a ser tan rara, es perfectamente compatible con la idea que acepta la existencia de una realidad objetiva externa a nosotros (lo que el solipsismo niega) pero establece claramente cuáles son los límites que existen en las formas en las que podemos interactuar con esos objetos.

### B. El estado de un sistema

Antes de motivar la descripción cuántica del estado de un sistema, es necesario definir con precisión que es lo que entendemos por ese concepto. Diremos que el “estado puro de un sistema físico” es la máxima información necesaria para predecir los resultados de todos los experimentos posibles sobre dicho sistema”.

Cabe acotar que aquí estamos utilizando una de-

scripción del estado en términos de "información" y por lo tanto esta es una descripción subjetiva del estado ya que la información está disponible para un dado observador (el que preparó al sistema en ese estado). Otra definición equivalente es la que presenta Asher Peres en su celebrado texto: un estado es una clase de equivalencia de procesos de preparación. Es decir, un estado está asociado a un procedimiento experimental que lo prepara. Este proceso es una sucesión de acciones físicas que se ejecutan sobre el sistema en cuestión y que, como resultado, lo preparan en un cierto estado.

Decimos que el estado es información necesaria para "predecir" resultados de todos los experimentos. Esto en mecánica clásica tiene una interpretación muy clara: si conocemos la posición y la velocidad de una partícula podremos predecir todas sus magnitudes observables (y si conocemos las fuerzas que actúan sobre la partícula podremos predecir sus valores en cualquier instante). En cambio, en la mecánica cuántica solamente podremos predecir probabilidades, no certezas. Este acto de renunciamento intelectual (aceptar que no podremos predecir certezas sino probabilidades) es un renunciamento al que los físicos se han resistido denodadamente. No es sencillo aceptarlo. Pero la mecánica cuántica está construida sobre esa idea: "sólo podremos predecir probabilidades y no certezas". En algunos casos (los llamados "estados puros" o estados de máxima información) podremos predecir con certeza el resultado de algunos experimentos pero habrá una cantidad infinita de experimentos para los cuales deberemos contentarnos con probabilidades.

Naturalmente surge la pregunta: "Cual es el motivo por el cual podemos predecir solamente probabilidades y no certezas?". La mecánica cuántica no responde esta pregunta. Acepta ese hecho como una propiedad de la naturaleza. Y, como dije mas arriba, acepta ese hecho obligada por una abrumadora evidencia experimental a su favor. Mas aún, por si lo anterior fuera poco: veremos a lo largo del curso que es posible demostrar que las predicciones de la mecánica cuántica son incompatibles con aquellas en las cuales las probabilidades se originan en nuestra ignorancia sobre los pequeños detalles del sistema o en nuestra incapacidad de controlar todas las variables en un experimento (ruido). Efectivamente, podremos demostrar que las probabilidades cuánticas NO se originan en nuestra ignorancia. Pero entonces: donde se originan? Debemos reconocer que ignoramos la respuesta a esta pregunta. La mecánica cuántica parece compatible solamente con teorías que aceptan la existencia de una fuente de azar intrínseco en la naturaleza.

### C. El estado de un espín 1/2, la mas cuántica de las propiedades.

El espín es una propiedad de algunas partículas que fue descubierta en 1922 en experimentos realizados por Otto Stern y Wolfgang Gerlach. Una partícula con espín lleva consigo un pequeño imán que, como todo imán tiene dos

polos y puede describirse utilizando una flecha imaginaria (un vector) que se dirige desde el polo sur hacia el norte. La longitud de la flecha (el módulo del vector) es proporcional a la intensidad del imán. Como veremos, imaginar al espín como una flecha es una sobre-simplificación ya que este personaje tiene muchas características sorprendentes. La mas sorprendente de todas ellas es la siguiente: cuando medimos la proyección del espín a lo largo de una dirección cualquiera obtenemos sólo dos valores posibles.

El experimento que permitió descubrir el spin fue realizado, como dijimos, por Stern y Gerlach con un aparato descrito esquemáticamente en la Figura 1: En el experimento original, se calentaban átomos de Ag en un horno y se extraía un haz por un orificio. El haz colimado se movía aproximadamente en una dirección (digamos que es la dirección del versor  $\vec{e}_x$ ). Una vez colimado, el haz ingresa en la región contenida entre los polos de un imán cuidadosamente diseñado de modo tal que genera un campo magnético que apunta en una dirección perpendicular a la del movimiento del haz (tomemos esta dirección como la del versor  $\vec{e}_z$ ). El campo es inhomogeneo, es decir, su intensidad depende de la posición  $z$ :  $\vec{B} = B(z)\vec{e}_z$ . El objetivo del experimento era estudiar el origen del magnetismo en los átomos (o las propiedades magnéticas de ciertos átomos). Sin embargo, también existía una motivación fuerte por encontrar huellas de la mecánica cuántica en el momento dipolar magnético ya que la teoría de Sommerfeld predecía que todo vector que jugara el rol del momento angular (y  $\vec{\mu}$  se suponía que se generaba por el giro de alguna carga alrededor del nucleo) debía estar cuantizado y adoptar valores discretos.

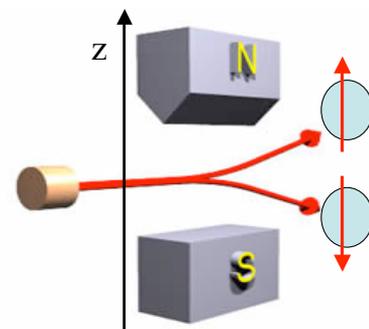


FIG. 1 Cuando un haz de partículas con espín 1/2 atraviesa un campo magnético que aumenta en la dirección  $\hat{z}$  se divide en dos componentes (una para cada valor de la componente  $\hat{z}$  del espín).

La idea del experimento es sencilla: si un átomo tuviera una dada magnetización, llevaría consigo un momento dipolar magnético  $\vec{\mu}$ . Al ingresar al imán este momento magnético interactúa con el campo magnético del imán mediante un término de interacción en el Hamiltoniano que es de la forma  $H_{int} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$  (es decir, el

momento magnético tendería a alinearse en forma antiparalela con el campo). Como el campo es inhomogeneo, el término de interacción depende de la posición del átomo:  $H_{int} = -\mu_z B(z)$ . Por lo tanto, aparecerá una fuerza sobre el átomo que será obtenida a partir del gradiente de  $H_{int}$ , es decir:  $F_z = \mu_z \partial_z B(z)$ . Si a primer orden consideramos que  $B(z)$  depende linealmente de  $z$  ( $B(z) = zB'$ , donde  $B'$  es el graadiente del campo magnético que en el experimento tenía un valor de aproximadamente  $10^6$   $G/m$ ) entonces la fuerza es  $F_z = \mu_z B'$ . Por lo tanto, los átomos desviarán su trayectoria en la dirección  $\vec{e}_z$  en una cantidad proporcional al valor de  $\mu_z$ . Conociendo la velocidad de los átomos (que define el tiempo durante el cual permanecen dentro del imán y son afectados por la mencionada fuerza) podemos calcular la desviación de la trayectoria en función de  $\mu_z$ . En resumen: el aparato construido por Stern y Gerlach puede interpretarse simplemente como un "instrumento de medición de la propiedad  $\mu_z$ ".

Cuando se realizó el experimento, el resultado obtenido fue sorprendente. Nuestra intuición clásica nos diría lo siguiente: Si dentro del horno en el que se preparan los átomos no hay ninguna dirección privilegiada (isotropía) entonces se espera que los átomos salgan del horno tomando todos los valores posibles de  $\mu_z$  distribuidos entre un valor máximo  $\mu_0$  y uno mínimo  $-\mu_0$  ( $\mu_0$  sería entonces la magnitud del momento dipolar atómico  $\vec{\mu}$ ). En esta situación el resultado esperado del experimento de SG es que los átomos tendrían que sufrir todas las desviaciones posibles que corresponden a todos los valores entre  $\pm\mu_0$ . Claramente, en un experimento como este, podríamos extraer el valor de  $\mu_0$ . Sin embargo, este no fue el resultado sino que lo que se observó fue que los átomos sufrían sólo dos desviaciones, compatibles con dos valores precisos de  $\mu_z = \pm\mu_0$ . Estos dos valores pudieron ser medidos y resultaron ser  $\mu_0 = g\hbar/2mc$  donde  $m$  y  $e$  son la masa y la carga del electrón,  $g$  es el factor giromagnético del electrón (y que es  $g = 2$ ) y  $\hbar$  resultó ser la constante de Planck  $\hbar = h/2\pi = 1.05457 \times 10^{-34}$   $Joules \times seg$ . Es decir, los ángulos de desviación en el experimento son tales que  $\tan(\theta) = e\hbar B' L / 2m^2 c v_0^2$  donde  $L$  es la longitud del imán y  $v_0$  es la velocidad de los átomos (para que la separación entre los haces sea significativa es necesario usar imanes que tengan valores de  $B'$  suficientemente altos y átomos suficientemente lentos). En el imán original el gradiente del campo magnético era de alrededor de  $10^6$   $Gauss/m$  y la velocidad era de alrededor de  $v_0 = 100m/seg$ . Esto da lugar a desviaciones de alrededor de  $\tan(\theta) = 3 \times 10^{-3}$  ( $L/metro$ ). O sea que para un aparato de  $L = 1m$  se obtenía  $\tan(\theta) \approx 3 \times 10^{-3}$ . Sugiero al lector hacer esta estimación para lo cual es necesario usar datos tales como que  $m = 9 \times 10^{-31}kg$  además del mencionado valor del cociente  $e/m \approx 1.7 \times 10^{11}C/kg$ .

El experimento fue repetido numerosas veces y los resultados fueron confirmados con precisión asombrosa. El mismo resultado se obtiene si el eje del imán se alinea en cualquier otra dirección. Es decir, cada vez que medi-

mos alguna componente de  $\vec{\mu}$  ( $\mu_x$ ,  $\mu_y$  o  $\mu_z$ , por ejemplo) obtenemos solamente dos resultados. En lo que sigue, definiremos a partir del vector  $\vec{\mu}$  otro vector al que llamaremos spin, que es tal que  $\mu = g\vec{S}/mc$ . Los resultados anteriores implican que la medición de cualquier componente del spin  $\vec{S}$  da como resultado los valores  $\pm\hbar/2$ . En estos términos, diremos que el experimento de SG mide alguna componente del spin.

Si bien este resultado es sorprendente, son mucho mas sorprendentes los resultados que se obtienen a partir del estudio de secuencias de experimentos de SG. Analizaremos estas secuencias en lo que sigue.

#### D. Secuencias de experimentos de SG

Por simplicidad, usaremos un esquema sencillo para denotar lo que sucede en un experimento como el de Stern y Gerlach. Evitaremos todos los detalles y dicho experimento será descrito por un diagrama como el de la Figura 2. En ese esquema, el versor  $\vec{e}_n$  denota la dirección del campo magnético del imán. El dispositivo separa un haz entrante en dos componentes. Es importante destacar que en el diagrama NO incluimos la pantalla donde colectamos los átomos sino solamente el proceso de separación que permite obtener dos haces a partir de uno solo. Por ese motivo podemos hacer una primera secuencia de experimentos en los que demostramos que el proceso de separación en dos haces puede ser revertido. Esto está descrito por la Figura 3. El aparato que invierte la acción del primero tiene que tener campos magnéticos apropiadamente elegidos para deshacer la acción de los primeros.

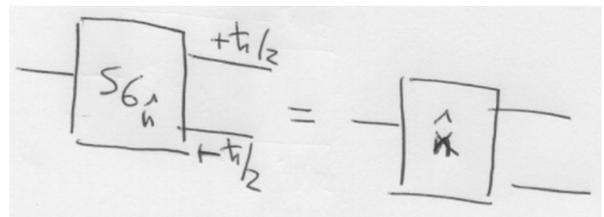


FIG. 2 Esquema que describe un aparato de Stern Gerlach con el campo magnético orientado en la dirección  $\vec{e}_n$ . El aparato divide el haz incidente en dos haces salientes.

1. La primera secuencia es la secuencia trivial, que no da lugar a ningún resultado sorprendente, pero que pone en evidencia la reversibilidad del proceso de separación de un haz en sus dos componentes de spin.
2. La segunda secuencia de experimentos de SG tampoco dará lugar a resultados sorprendentes. En efecto, consideremos una sucesión de dos aparatos de SG con el imán orientado en la misma dirección  $\vec{e}_z$ . Después del primer aparato bloqueamos el haz

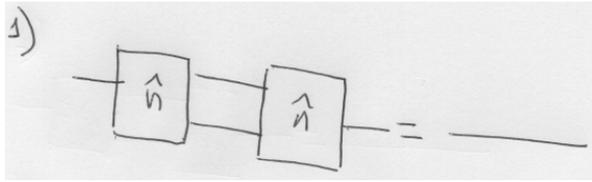


FIG. 3 Primera secuencia de aparatos de Stern Gerlach. El efecto del campo que separa el haz incidente puede revertirse.

asociado a la componente de  $S_z = -\hbar/2$  y hacemos que la otra componente ingrese al segundo aparato. Nos preguntamos: Cuál es la probabilidad de que una partícula sea detectada a la salida del segundo aparato salió por el haz superior del primer aparato? El resultado experimental es que dicha probabilidad es igual a 1. O sea,  $\text{Prob}(S_z^{(2)} = +\hbar/2 | S_z^{(1)} = +\hbar/2) = 1$  (la probabilidad de que la segunda medición de  $S_z$  sea  $\hbar/2$  dado que la primera también fue  $\hbar/2$  es igual a la unidad. Experimentalmente, podemos confirmar esto haciendo dos experimentos: primer hacemos un experimento en el que sólo usamos el primer aparato y detectamos el número de partículas (por unidad de tiempo) que llegan a la pantalla por el haz correspondiente a  $S_z = \hbar/2$ . Luego colocamos el segundo aparato y verificamos que el número que llega por el haz superior es idéntico al anterior. Obviamente este mismo resultado se obtiene con una secuencia de dos aparatos de SG con el imán orientado en la misma dirección (cualquiera sea ella).

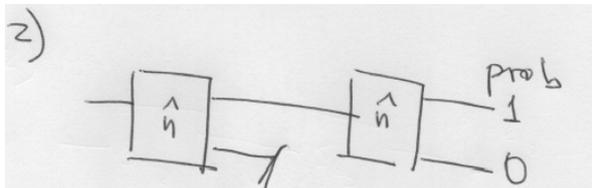


FIG. 4 Segunda secuencia de aparatos de Stern Gerlach: campos magnéticos orientados en direcciones perpendiculares. Ambas salidas finales son equiprobables.

3. La tercera secuencia ya es menos trivial que las anteriores. Analizamos una secuencia donde primero tenemos un aparato de SG con el imán alineado en la dirección  $\vec{e}_z$  y luego otro con el imán alineado en la dirección  $\vec{e}_x$ . Nos hacemos la misma pregunta que antes: Cuál es la probabilidad de que un átomo salga por el haz superior del segundo aparato dado que salió por el haz superior del primero? (la estrategia para medir estas probabilidades es la misma que en el caso anterior: se necesitan dos experimentos). La respuesta experimental es que esta probabilidad es igual a  $1/2$ . Es decir:  $\text{Prob}(S_x^{(2)} = +\hbar/2 | S_z^{(1)} = +\hbar/2) = 1/2$ . En general, si analizamos una secuencia de dos aparatos de SG con imanes orientados en direcciones arbitrarias

$\vec{e}_1$  y  $\vec{e}_2$ , el resultado de la mencionada probabilidad es  $\text{Prob}(\vec{e}_2 \cdot \vec{S}^{(2)} = +\hbar/2 | \vec{e}_1 \cdot \vec{S}^{(1)} = +\hbar/2) = (1 + \vec{e}_1 \cdot \vec{e}_2)/2$ . El caso anterior corresponde a direcciones ortogonales en las que  $\vec{e}_1 \cdot \vec{e}_2 = 0$ , mientras el primer caso corresponde a  $\vec{e}_1 = \vec{e}_2$ .

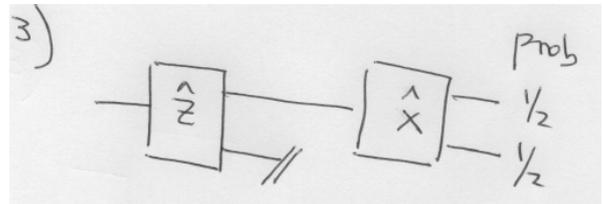


FIG. 5 Tercera secuencia de SG: El primer aparato sólo deja pasar las partículas con la componente  $S_z = +\hbar/2$ , el segundo analiza el valor de  $S_x$ . Se obtiene que ambos resultados  $\pm\hbar/2$  son equiprobables.

Este resultado es interesante pero no es imposible de reconciliar con nuestro sentido común. Podemos razonar de la siguiente forma para comprenderlo. El primer aparato de SG filtra las partículas de acuerdo a su componente  $S_z$  y el segundo lo hace de acuerdo a su componente  $S_x$ . El resultado se explica simplemente aceptando la idea de que de todas las partículas que tienen  $S_z = \hbar/2$  la mitad tiene  $S_x = \hbar/2$  y la otra mitad tiene  $S_x = -\hbar/2$ . No sabemos cual es el motivo por el que esto podría suceder pero al menos podemos concebir esta imagen sencilla del comportamiento del spin. Notablemente, esta imagen colapsa cuando consideramos la secuencia de tres aparatos de SG.

4. La cuarta secuencia es crucial. Encadenamos dos aparatos de SG con el imán orientado en la dirección  $\vec{e}_z$  y entre ellos colocamos un tercero con el imán orientado en la dirección  $\vec{e}_x$ . Tomamos las partículas con  $S_z = \hbar/2$  que salen del primero y luego las que salen del segundo con  $S_x = \hbar/2$ . Si fuera cierto el razonamiento esbozado en el párrafo anterior todas estas partículas deberían tener  $S_z = \hbar/2$  en el último aparato. Es decir que la probabilidad de que las partículas salgan por la rama superior del último aparato, dado que salieron por la rama superior de los dos primeros debería ser igual a 1. Sin embargo, el resultado del experimento no es este. Esa probabilidad resulta ser igual a  $1/2$ . Asimismo, es  $1/2$  la probabilidad de que las partículas salgan por la rama inferior del último aparato. Es decir:

$$\text{Prob}(S_z^{(3)} = \hbar/2 | S_x^{(2)} = \hbar/2 \wedge S_z^{(1)} = \hbar/2) = 1/2$$

$$\text{Prob}(S_z^{(3)} = -\hbar/2 | S_x^{(2)} = \hbar/2 \wedge S_z^{(1)} = \hbar/2) = 1/2$$

El resultado es sorprendente. Intercalando un aparato que mide  $S_x$  entre dos aparatos que miden  $S_z$  hacemos aparecer partículas con  $S_z = -\hbar/2$  (la mitad) siendo que si no intercalamos el aparato que

mide  $S_x$  no obtenemos ninguna partícula en el haz inferior. Este experimento es difícil de comprender y sólo la mecánica cuántica es capaz de formular un modelo predictivo que describa correctamente el resultado de esta secuencia de experimentos.

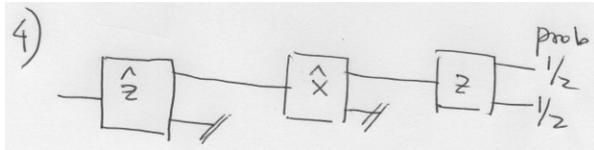


FIG. 6 Cuarta secuencia de SG: El primer aparato solo deja pasar las partículas con la componente  $S_z = +\hbar/2$ , el segundo deja pasar aquellas con  $S_x = +\hbar/2$  y el tercero analiza nuevamente el valor de  $S_z$ . Sorprendentemente en el tercer aparato la probabilidad de cada resultado es  $1/2$ .

5. 5 Analogía con el experimento de dos rendijas. Esta última secuencia tiene la notable propiedad de establecer una muy clara analogía con el experimento de las dos rendijas de Young. En efecto, en las secuencias de experimentos de SG el ingrediente fundamental es la interferencia de ondas de probabilidad. Analizaremos tres secuencias. El primer caso, que llamaremos *A* es una variante de los anteriores. Se encadenan dos aparatos de SG con el imán en  $\vec{e}_z$  y entre ellos se coloca dos SG con el imán en  $\vec{e}_x$  siendo uno el inverso del otro.

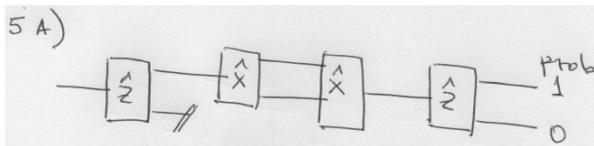


FIG. 7 Secuencia 5A de SG: El primer aparato solo deja pasar las partículas con la componente  $S_z = +\hbar/2$ . Luego hay una secuencia de tipo 1 (trivial) construida con aparatos que separan el haz según su componente  $S_x$  y lo vuelven a juntar. El tercer aparato analiza el valor de  $S_z$ . Naturalmente el único resultado obtenido es  $S_z = +\hbar/2$  (con probabilidad 1).

Teniendo en cuenta las consideraciones anteriores los dos aparatos de SG con el imán en  $\vec{e}_x$  cancelan mutuamente su efecto. Por lo tanto, la probabilidad de obtener  $S_z = \hbar/2$  en el último SG es 1 y la probabilidad de obtener  $S_z = -\hbar/2$  en ese mismo SG es 0. Todas las partículas salen por el haz superior (o sea que la pantalla está iluminada en este haz) y ninguna sale por el haz inferior (la pantalla queda ensombrecida). Observamos "luz" en la salida superior y "sombra" en la inferior (esta es una metáfora ya que este experimento no se realiza con ondas luminosas).

Los otros dos experimentos tienen la misma secuencia que el anterior, tal como se indica en la figura. La diferencia es que en el experimento *B* se bloquea el haz superior que sale del primer aparato

de SG con el imán orientado en  $\vec{e}_x$  y en el experimento *C* se bloquea el haz inferior. Al bloquear alguno de los dos haces, las partículas que ingresan al último SG tienen  $S_x = -\hbar/2$  en el experimento *B* y  $S_x = \hbar/2$  en el experimento *C*. Por lo tanto al pasar por el último aparato de SG, que analiza el valor de  $S_z$ , la partícula tiene la misma probabilidad ( $1/2$ ) de salir por cualquiera de los dos haces. Usando la metáfora del párrafo anterior: en ambos haces tenemos "luz" (ya que detectamos la mitad de las partículas en cada haz).

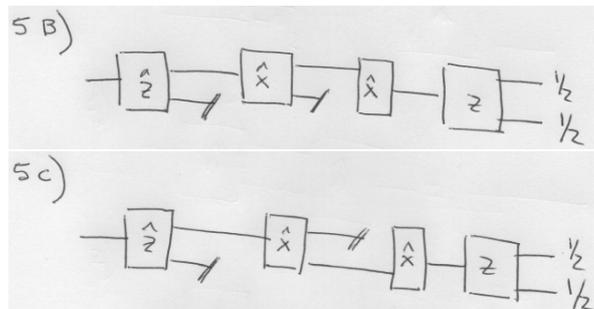


FIG. 8 Secuencia 5B y 5C de SG: En el caso *A* se bloquea el haz inferior entre los aparatos que separan y juntan el haz según su valor de  $S_x$ . En la secuencia 5C se bloquea el otro haz. En ambos casos, al analizar el valor de  $S_z$  se obtienen resultados equiprobables.

Este experimento es sorprendente. La intuición diría que si al ser separados de acuerdo al valor de  $S_x$  las partículas siguen una trayectoria u otra (la superior o inferior) entonces el resultado de las cualquier probabilidad en la etapa final del experimento debería satisfacer la igualdad  $P_A = P_B + P_C$ . Pero esto claramente no se cumple! Cuando los dos caminos están abiertos (no bloqueamos ninguno) observamos sombra en el haz inferior del SG final. En cambio, si alguno de los dos haces está bloqueado (tal como ocurre en los experimentos *B* y *C* observamos "luz" en ambos haces del SG final. Esto es lo mismo que sucede en el experimento de dos rendijas de Young en el que uno puede afirmar que "luz+luz=sombra" ya que hay zonas de la pantalla donde no llegan partículas cuando las dos rendijas están abiertas mientras que si alguna está tapada en esas zonas se registran partículas.

La mecánica cuántica permite formular un modelo que describe adecuadamente los experimentos anteriores, que desafían nuestra intuición. En este modelo el estado del sistema es descrito por un vector en un espacio vectorial complejo de dos dimensiones. Cómo surge este modelo a partir de los resultados de los experimentos mencionados? La forma más natural de verlo es observando que existe una analogía directa entre los experimentos mencionados más arriba (secuencias de aparatos de SG) y los que se realizan con luz polarizada. Veremos esto ahora y luego adaptaremos el modelo que describe la luz polar-

izada para describir al spin.

### E. Analogía con la polarización de la luz

Es importante notar que hay otros experimentos en la física que dan resultados totalmente análogos a los que describimos mas arriba para las partículas de spin 1/2. Se trata de experimentos con luz polarizada. Como sabemos, la luz es una onda electromagnética cuyo estado está descrito por un vector campo eléctrico  $\vec{E}(\vec{r}, t)$  y otro vector campo magnético  $\vec{B}(\vec{r}, t)$ . En el caso de las ondas planas que se propagan en la dirección del vector  $\vec{k}$ ,  $\vec{E}$  y  $\vec{B}$  están en el plano perpendicular a  $\vec{k}$ . La luz se dice linealmente polarizada si la dirección del vector  $\vec{E}$  no varía en el tiempo. Obviamente, puede estar polarizada a lo largo de cualquiera de las direcciones del plano perpendicular a  $\vec{k}$ . También la luz puede tener polarización circular, lo que corresponde al caso en el cual el vector  $\vec{E}$  va cambiando de dirección rotando alrededor del eje definido por  $\vec{k}$ . La polarización será circular si las amplitudes de las distintas componentes de  $\vec{E}$  son todas iguales o elíptica cuando cuando estas son diferentes. En lo que sigue, para establecer la analogía con el spin, apelaremos a la física de los materiales birrefringentes para los cuales el índice de refracción de la luz depende de su polarización. Al entrar en este tipo de materiales, un haz de luz se descompone en dos haces (llamados por razones históricas ordinario y extraordinario). Es decir, un haz con polarización lineal a lo largo de una dirección cualquiera  $\vec{E} = E_0 \vec{e}_n$  cuando ingresa a ese material se divide en dos haces cuyas campos eléctricos son  $\vec{E}_H = E_0 \cos \theta \vec{e}_H$  y  $\vec{E}_V = E_0 \sin \theta \vec{e}_V$ , donde  $\cos \theta = \vec{e}_n \cdot \vec{e}_H$  y  $\sin \theta = \vec{e}_n \cdot \vec{e}_V$ . Un material típico que tiene este comportamiento es la Calcita, en la que la separación entre los haces es significativa. Partiendo de este principio es posible construir dispositivos simples que separan los haces  $\vec{E}_V$  y  $\vec{E}_H$  en dos direcciones perpendiculares entre si. Estos dispositivos habitualmente tienen forma cúbica y están formados por dos prismas unidos por una superficie especialmente preparada (con un material multi capa, es decir funcionan de manera mas compleja que en el caso de materiales birrefringentes). En la clase teórica se mostrará el funcionamiento de uno de estos artefactos, a los llamamos Divisores de Haz Polarizante y usamos la sigla  $PBS$  (por Polarizing Beam Splitter) para denotarlos (el uso de la sigla  $DHP$  en castellano podria dar lugar a malas interpretaciones ante permutaciones no cíclicas de las letras). En realidad usaremos la sigla  $PBS_{nn'}$  en la que los subíndices  $nn'$  indican las direcciones en las que los dos haces salen polarizados (y deben ser tales que  $\vec{e}_n \cdot \vec{e}_{n'} = 0$ ). El divisor de haz  $PBS_{HV}$  refleja la componente polarizada horizontalmente y transmite la polarizada verticalmente. Obviamente podemos construir divisores de haz tipo  $PBS$  que separen los haces en cualquier par de direcciones ortogonales entre si. El  $PBS_{DD'}$  denotará el divisor de haz que separa las direc-

ciones  $D$  y  $D'$  que forman, respectivamente, un ángulo de  $\pi/4$  y  $3\pi/4$  respecto del eje  $H$ . También es posible usar estos dispositivos (combinandolos con láminas retardadoras de cuarto de onda y media onda que agregan un desfase entre las polarizaciones en las direcciones  $H$  y  $V$ ) para construir  $PBS$  que separen un haz de luz en sus componentes de polarización circulares (derecha e izquierda). A estos los denominaremos  $PBS_{+-}$ . Estos dispositivos están ilustrados en la Figura siguiente:

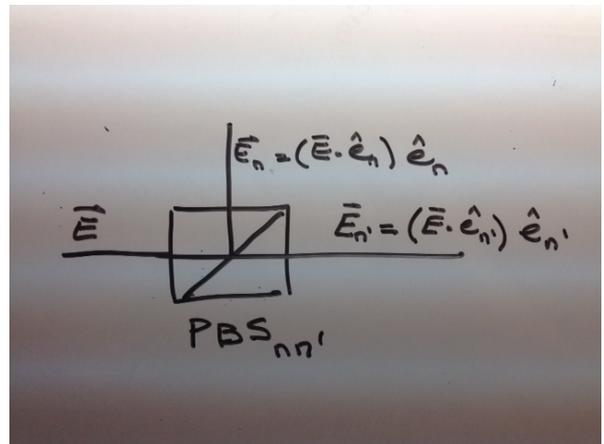


FIG. 9 Un divisor de haz polarizante  $PBS_{nn'}$  genera dos haces con polarización a lo largo del eje  $\vec{e}_n$  (el reflejado) y del eje  $\vec{e}_{n'}$ , el transmitido.

Es bastante evidente que el divisor de haz  $PBS_{HV}$  juega un rol muy similar al del aparato de SG que separa un haz de acuerdo al valor de  $S_z = \pm \hbar/2$ . La diferencia que salta a la vista es la siguiente: los experimentos que hacemos con luz polarizada (que describiremos mas abajo) típicamente se hacen con haces intensos (un laser, por ejemplo). En ese régimen la analogía con las secuencias de aparatos de Stern Gerlach parece tenue ya que en el caso de SG los átomos pasan por el aparato de a uno a la vez (o pueden hacerlo en ese régimen). En ese régimen (de un único átomo presente en el dispositivo) el resultado del último experimento descrito es totalmente anti-intuitivo ya que para explicarlo es necesario abandonar la idea de que los átomos siguen una trayectoria o la otra.

La analogía entre experimentos SG y aquellos con luz polarizada se vuelve completa cuando trabajamos con haces de luz suficientemente atenuados como para poder asegurar que hay un único fotón en el dispositivo. De hecho, los experimentos que describiremos (con luz) se pueden realizar (y se realizan) con fotones individuales. Típicamente esto puede hacerse aprovechando fuentes de fotones anunciados que son de fácil acceso en la actualidad. En esas fuentes se generan pares de fotones, cuyas direcciones de propagación están fuertemente correlacionadas. En esas circunstancias, si se detecta uno de los miembros del par, hay certeza de que otro fotón se propaga en una trayectoria que, originalmente, está bien definida. A partir de ese momento, ese fotón se usa

como insumo para cualquiera de los experimentos que describiremos a continuación.

#### F. Equivalencia entre PBS y SG: experimentos de SG con fotones individuales

En la figura de abajo se muestra el dispositivo fotónico que es totalmente análogo al aparato de Stern Gerlach con el imán orientado en alguna dirección arbitraria (elegimos esta como  $\vec{e}_z$ ). El dispositivo consiste en un  $PBS_{HV}$  seguido por un espejo en el haz reflejado para lograr que se mueva en la misma dirección que el transmitido (esto no es estrictamente necesario!). En la rama inferior se incluye una lámina retardadora (una placa de vidrio) que logra que el camino óptico en ambas ramas sea idéntico.

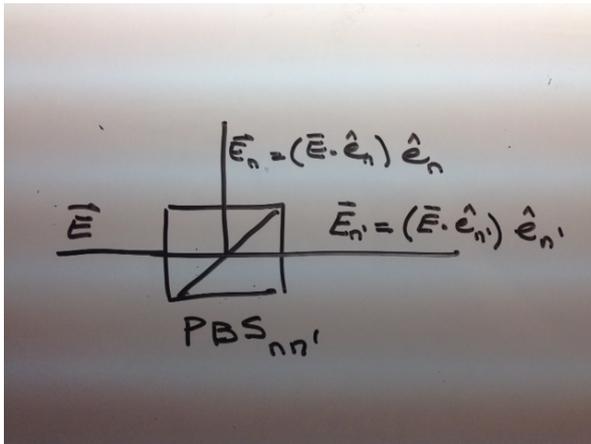


FIG. 10 A partir de un haz de luz incidente, un divisor de haz polarizante (PBS) genera dos haces, el reflejado tiene polarización en  $\vec{e}_n$  y el transmitido en  $\vec{e}_{n'}$ .

La reversibilidad del  $PBS$  es obvia y está mostrada en la figura siguiente xxx. Allí, la acción del primer  $PBS$  es cancelada por la del segundo y obviamente el resultado que el haz no sufre ninguna transformación.

La concatenación de divisores de haz  $PBS$  orientados en distintas direcciones también es sencilla de entender. Por ejemplo, la figura xxx muestra el dispositivo que toma el haz polarizado en la dirección  $V$  (el transmitido en el  $PBS_{HV}$  y lo hace pasar por un  $PBS_{DD'}$ . En este caso, las leyes de la óptica clásica (las leyes de Malus) nos dicen que la intensidad de cada haz saliente del  $PBS_{DD'}$  será la mitad de la intensidad entrante. Cuando repetimos el experimento con fotones individuales veremos que la mitad de los fotones va a parar a cada uno de los detectores ubicados a la salida del  $PBS_{DD'}$ . Esta secuencia es análoga a la analizada en tercer lugar con aparatos de SG (un SG con el imán en  $\vec{e}_z$  seguido por otro con el imán orientado en  $\vec{e}_x$ ).

La concatenación de tres divisores  $PBS$ , el primero un  $PBS_{HV}$  con la componente  $H$  bloqueada. Este  $PBS$  cumple una única función: prepara un estado con polarización  $V$  que ingresa al segundo un  $PBS_{DD'}$  con la

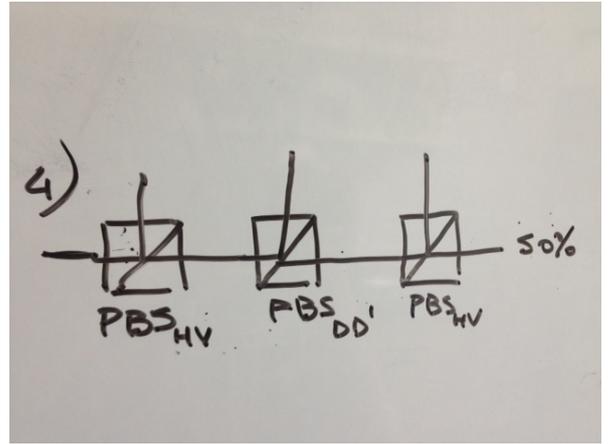


FIG. 11 Una secuencia de dos  $PBS$  que dividen un haz en dos direcciones que forman un ángulo de 45 grados. La intensidad del haz saliente del último  $PBS$  es la mitad de la entrante.

componente  $D$  bloqueada y el tercero un nuevo  $PBS_{HV}$ . Esta secuencia es totalmente análoga a la concatenación de aparatos de SG analizada en cuarto lugar: El resultado de esta secuencia de  $PBS$  puede comprenderse perfectamente a partir del modelo que acepta que el campo eléctrico es un vector en el plano perpendicular a la dirección de propagación y que cada uno de los  $PBS$  separa el haz de acuerdo a sus componentes en un par de direcciones ortogonales en dicho plano (el caso de la polarización circular es análogo). Entonces, cada uno de los detectores ubicados a la salida del segundo  $PBS_{HV}$  detectarán la mitad de los fotones. O sea, introduciendo un aparato que filtra la componente  $D$ , generamos fotones con polarización  $H$ , que están ausentes en el estado entrante al segundo divisor (ya que fueron filtrados por el primer  $PBS$ ).

El quinto ejemplo de concatenación corresponde, literalmente, a un experimento de dos rendijas con luz (en el régimen de fotones individuales). Este está ilustrado en la figura xxx. El primer  $PBS_{HV}$  prepara un estado con polarización  $V$ . Este fotón ingresa al  $PBS_{DD'}$  que separa el haz en esas dos componentes. Luego de ser reflejados en sendos espejos perfectos, los fotones entran al  $PBS_{D'D}$  que invierte la acción del anterior. Tal como vimos mas arriba el efecto de estos dos  $PBS$  se cancela y el fotón sale por la rama horizontal en el mismo estado en el que entró. Por lo tanto, al ingresar al nuevo  $PBS_{HV}$  siempre es transmitido (tiene polarización  $V$ ): la probabilidad de detectar fotones con polarización horizontal (en el detector  $D_H$  es cero. Sin embargo, si bloqueamos alguno de los dos caminos entre los detectores  $PBS_{DD'}$  y  $PBS_{D'D}$  (que están en una configuración de interferómetro de Mach Zender) la situación cambia drásticamente. El fotón ingresará al último  $PBS_{HV}$  con polarización diagonal ( $D$  o  $D'$ ) y por lo tanto tendrá probabilidad  $1/2$  de ser detectado por cada uno de los detectores. La probabilidad de detectar fotones con po-

larización  $H$  es distinta de cero cuando algún camino está cerrado pero se hace igual a cero cuando ambos están abiertos: luz+luz=sombra! Claramente, el experimento muestra que el fotón, que es detectado como partícula (siempre en un único detector, localizado en una región del espacio) no viaja siguiendo una única trayectoria. Este experimento pone en evidencia el misterio central de la mecánica cuántica.

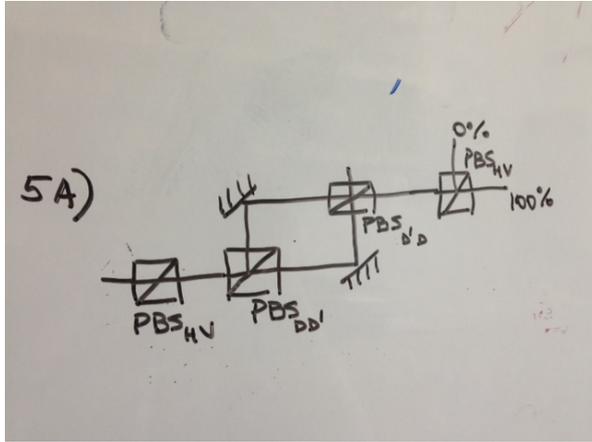


FIG. 12 Un experimento de interferencia con luz polarizada. La luz verticalmente polarizada preparada por el primer  $PBS_{HV}$  ingresa al interferómetro de Mach Zender. Los haces se recombinan y la polarización del haz saliente es idéntica a la del haz incidente.

### G. Cómo describir el estado de un spin 1/2?

Para formular un modelo que prediga correctamente los resultados de los experimentos con secuencias de aparatos de  $SG$  podemos copiar casi textualmente el modelo usado para describir los experimentos con la polarización de la luz. El modelo para la luz es el siguiente: El estado del campo eléctrico se describe con un vector que es siempre perpendicular a la dirección de propagación (el magnético es perpendicular a  $\vec{E}(\vec{r}, t)$ ). Cuando un haz de luz caracterizado por un campo  $\vec{E}$  incide en un  $PBS_{nn'}$  se generan dos haces. En cada uno de los haces salientes el campo eléctrico es la proyección del campo incidente en la dirección  $\vec{e}_{n'}$  (el reflejado) y  $\vec{e}_n$  (el transmitido). La intensidad del haz reflejado es  $|\vec{E} \cdot \vec{e}_{n'}|^2$ , o sea que el cociente entre la intensidad incidente ( $I_0 = |\vec{E}|^2$ ) y la reflejada es  $I_R/I_0 = |\vec{E} \cdot \vec{e}_{n'}|^2 / |\vec{E}|^2 = \cos^2 \theta$ , donde  $\theta$  es el ángulo formado entre el campo incidente y la dirección  $\vec{e}_n$  (esta es la ley de Malus para la luz polarizada). Es evidente que si el campo incidente está polarizado en la dirección  $\vec{e}_n$  toda la intensidad será reflejada y el haz transmitido por el  $PBS_{nn'}$  tendrá intensidad nula.

Hagamos entonces una copia de este modelo para describir el estado de un espín 1/2. Diremos entonces que para un espín, entonces, el estado estará descrito por un vector  $\vec{\phi}$  (que puede variar en el tiempo). Este vector

pertenece a un espacio vectorial de dimensión 2 que, como veremos, tiene que ser complejo. Al pasar por un aparato de  $SG$  un haz descrito por este estado se descompone en dos haces, cada uno de los cuales está asociado a las dos salidas del  $SG$ . El haz superior está descrito por un estado que llamaremos  $\vec{0}_n$  y el haz inferior estará preparado en otro estado, que  $\vec{1}_n$ . Cuando el sistema está preparado en alguno de estos dos estados y se lo hace incidir sobre un nuevo aparato de  $SG$  con el imán orientado en la misma dirección, se obtiene un único resultado ( $+\hbar/2$  para  $\vec{0}_n$  y  $-\hbar/2$  para  $\vec{1}_n$ ).

El modelo se completa, tal como en el caso de la polarización de la luz, con una forma de calcular la probabilidad de que si el haz entrante está preparado en el estado  $\vec{\phi}$ , el sistema salga por el haz superior o por el inferior (con lo que diremos que el resultado de la medición de  $S_n$  es, respectivamente  $\pm\hbar/2$ ). Diremos que esas probabilidades deben calcularse, tal como en el caso de la luz polarizada, tomando el módulo al cuadrado de la proyección del estado del haz entrante  $\vec{\phi}$  sobre los estados asociados a cada uno de los haces salientes. O sea:  $\text{Prob}(S_n = \hbar/2 | \vec{\phi}) = |\vec{0}_n \cdot \vec{\phi}|^2$  y  $\text{Prob}(S_n = -\hbar/2 | \vec{\phi}) = |\vec{1}_n \cdot \vec{\phi}|^2$ . Cabe aclarar que no estamos usando la notación usual de la mecánica cuántica en la que los vectores se denotan como "kets":  $\vec{\phi} \rightarrow |\phi\rangle$  (esa es la notación de Dirac).

Si aceptamos estas ideas sencillas, tenemos un modelo que permite describir adecuadamente los resultados de experimentos de  $SG$ . Pero estos resultados imponen restricciones y características fundamentales al modelo. Veamos, por ejemplo, que de los experimentos consistentes en secuencias de aparatos de  $SG$  surge no solamente que la dimensión del espacio debe ser igual a 2 sino también que este espacio debe ser complejo.

### H. Propiedades del modelo

1. Por qué la dimensión del espacio de estados es igual a 2?. En el modelo aceptamos dos hechos fundamentales: 1) Cada vez que analizamos nuestro sistema con un aparato de  $SG$  con el imán orientado en una dirección arbitraria obtenemos dos resultados (y sólo dos). El número de resultados distintos en esta medición es una propiedad que caracteriza al sistema y, necesariamente, tiene que ser igual a la dimensión del espacio de estados físicos.

En efecto, el modelo acepta el hecho de que hay un estado asociado a cada uno de los haces que salen de un aparato de  $SG$  que mide  $S_n$ . Estos estados los denominamos  $\vec{0}_n$  y  $\vec{1}_n$ . Los datos experimentales nos fuerzan a aceptar el hecho de que estos estados deben ser vectores ortonormales. La ortogonalidad de estos vectores surge de que  $|\vec{0}_n \cdot \vec{1}_n|^2$  es la probabilidad de medir  $S_n = +\hbar/2$  dado que en el  $SG_n$  ingresó el estado  $\vec{1}_n$ . Esta probabilidad, como discutimos mas arriba, es nula, es donde surge que estos estados deben ser ortogonales. La normal-

ización de los estados es también una consecuencia del modelo y de los datos experimentales. En efecto  $|\vec{0}_n \cdot \vec{0}_n|^2$  es la probabilidad de detectar el valor  $+\hbar/2$  en la medición de  $S_n$  dado que el estado entrante es  $\vec{0}_n$ , que, como vimos, es igual a la unidad.

En general, la dimensión del espacio de estados de un sistema es siempre igual al número de resultados distintos que se obtienen en una medición exhaustiva del sistema. La pregunta que podemos hacer es obvia: Cómo sabemos que una medición es realmente exhaustiva? La respuesta es: no lo sabemos. Hacemos un modelo que, luego de interrogar al sistema con todo el instrumental que está a nuestra disposición (y con toda la imaginación de la que disponemos para proponer experimentos). Evidentemente, el modelo es siempre provisorio ya que podemos encontrar en el futuro nuevos grados de libertad, con lo cual la dimensión del espacio de estados deberá cambiar. El modelo es considerado válido mientras no sea contradicho por los resultados experimentales.

2. El espacio debe ser complejo. Teniendo en cuenta lo anterior, cada aparato de SG divide un haz en dos, y el sistema saliente en cada uno de ellos está preparado en un estado que debe ser ortogonal al estado asociado al otro haz. En consecuencia, cada aparato de SG define una base ortonormal del espacio de estados. En efecto, para toda dirección  $\vec{e}_n$ , el conjunto de estados  $B_n = \{\vec{0}_n, \vec{1}_n\}$  es una base ortonormal.

Consideremos las tres bases  $B_x$ ,  $B_y$  y  $B_z$  asociadas a las tres direcciones cartesianas (perpendiculares entre sí)  $\vec{e}_x$ ,  $\vec{e}_y$  y  $\vec{e}_z$ . Los experimentos de SG descritos anteriormente nos dicen que estas bases deben tener una propiedad muy importante: deben ser mutuamente "no sesgadas". Esto es: si preparo algún vector de alguna de estas bases (por ejemplo  $vec0_x$ ) y mido la probabilidad de obtener  $\pm\hbar/2$  en cualquiera de las otras dos direcciones ortogonales, ese resultado debe ser siempre igual a  $1/2$ . Es decir:  $|\vec{j}_n \cdot \vec{j}_{n'}|^2 = 1/2$  para todo  $j, j' = 0, 1$  siempre que sea  $n \neq n'$  (o sea que  $|\vec{0}_x \cdot \vec{1}_y|^2 = |\vec{1}_x \cdot \vec{0}_z|^2 = 1/2$ , etc. Esta condición impone que el espacio vectorial debe ser complejo, lo que puede verse de la siguiente manera. Tomemos la base  $B_z$  y escribamos los vectores de  $B_x$  como combinación lineal de ellos:

$$\begin{aligned}\vec{0}_x &= \alpha \vec{0}_z + \beta \vec{1}_z \\ \vec{1}_x &= \gamma \vec{0}_z + \delta \vec{1}_z\end{aligned}$$

La condición de normalización implica que  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$   $|\gamma|^2 + |\delta|^2 = 1$ . Asimismo, la condición de que las bases  $B_x$  y  $B_z$  sean "no sesgadas" implica que todos los coeficientes en módulo deben ser  $1/\sqrt{2}$ . En efecto,  $|\alpha|^2 = |\vec{0}_z \cdot \vec{0}_x|^2 = 1/2$ , etc. En consecuencia, la anterior combinación

lineal puede escribirse de la forma:

$$\begin{aligned}\vec{0}_x &= \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{i\phi_1} \vec{0}_z + e^{i\phi_2} \vec{1}_z) \\ \vec{1}_x &= \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{i\phi_3} \vec{0}_z + e^{i\phi_4} \vec{1}_z).\end{aligned}$$

Sin pérdida de generalidad, en cada uno de los estados anteriores, podemos tomar uno de estas fases iguales a 0. Esto equivale a redefinir a cada uno de los estados  $\vec{0}_x$  y  $\vec{1}_x$ , los que siempre están definidos a menos de una fase (lo que surge del hecho de que todas las predicciones físicas son independientes de una fase global ya que sólo dependen del módulo del producto escalar entre estados). Por lo tanto podemos elegir  $\phi_1 = \phi_3 = 0$ . la condición de ortonormalidad entre  $\vec{0}_x$  y  $\vec{1}_x$  implica que debe cumplirse que  $0 = 1 + \exp(i(\phi_2 - \phi_4))$ , o sea que  $\phi_2 - \phi_4 = \pi$ . Podemos encontrar soluciones a esta ecuación de modo tal que todos los coeficientes sean reales. En efecto, si hacemos esto, la solución es  $\phi_2 = 0$  y  $\phi_4 = \pi$  (o viceversa). Entonces, sin pérdida de generalidad podemos escribir la relación entre los vectores de  $B_x$  y  $B_z$  como

$$\begin{aligned}\vec{0}_x &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{0}_z + \vec{1}_z) \\ \vec{1}_x &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{0}_z - \vec{1}_z).\end{aligned}$$

De lo anterior surge que esta es la única solución con coeficientes reales (ya que la otra es simplemente una permutación de los dos vectores). Si repetimos el argumento anterior con los vectores de la base  $B_y$  podemos escribirlos, sin pérdida de generalidad, como

$$\begin{aligned}\vec{0}_y &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{0}_z + e^{i\phi'_2} \vec{1}_z) \\ \vec{1}_y &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{0}_z + e^{i\phi'_4} \vec{1}_z).\end{aligned}$$

La ortogonalidad de estos estados nuevamente implica que debe valer la condición  $\phi'_2 - \phi'_4 = \pi$ . Por otra parte, si imponemos las condiciones  $|\vec{0}_x \cdot \vec{0}_y|^2 = 1/2$  obtenemos que debe cumplirse que  $|1 + \exp(i\phi'_2)|^2 = 2$  (y análogamente con  $\phi'_4$ ). De aquí es inmediato ver que las únicas soluciones posibles son  $\phi'_2 = \pm\pi/2$  (y  $\phi'_4 = \mp\pi/2$ ). En consecuencia, sin pérdida de generalidad podemos tomar  $\phi'_2 = \pi/2 = -\phi'_4$ , de donde

$$\begin{aligned}\vec{0}_y &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{0}_z + i \vec{1}_z) \\ \vec{1}_y &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{0}_z - i \vec{1}_z),\end{aligned}$$

En conclusión, el espacio de estados debe ser complejo para permitir que existan al menos tres bases

mutuamente no sesgadas, como  $B_x$ ,  $B_y$  y  $B_z$ . Es posible demostrar que en cualquier espacio vectorial complejo con dimensión  $d$  hay a lo sumo  $d + 1$  bases no sesgadas. En consecuencia, el modelo propuesto "predice" que no existen otras direcciones  $\vec{e}_n$  de modo tal que la base asociada sea no sesgada con  $B_x$ ,  $B_y$  y  $B_z$ .

## I. Observables y operadores

Hasta aquí, hemos descripto la forma de representar a los estados y también hemos descripto la manera en que podemos calcular probabilidades para cada resultado de un experimento en el caso de la polarización y del spin. Esto último, como vimos se realiza de la siguiente forma: Si medimos una componente de  $S_n$  siempre obtenemos dos resultados  $\pm\hbar/2$ . Cada uno de estos resultados tiene un estado asociado: el vector  $\vec{0}_n$  es aquel que describe al estado que cumple con que la medición de  $S_n$  da un único resultado con probabilidad 1 (y el otro con probabilidad 0).

Vemos claramente que una propiedad observable de spin (su componente  $S_n$  tiene que estar representada por un objeto matemático tal que a dos vectores ortogonales les asigne dos números reales diferentes (los resultados de la medición). El objeto matemáticamente mas simple que hace esto es, precisamente un operador lineal. En efecto, definimos el operador  $\hat{S}_n$  como aquel operador tal que  $\hat{S}_n \vec{0}_n = \frac{\hbar}{2} \vec{0}_n$  y  $\hat{S}_n \vec{1}_n = -\frac{\hbar}{2} \vec{1}_n$ . Esto define completamente al operador  $\hat{S}_n$  ya que nos dice cómo actúa en la base de vectores  $B_n = \{\vec{0}_n, \vec{1}_n\}$ . Por ejemplo, el operador  $\hat{S}_z$  en la base  $B_z$  resulta ser

$$\hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (1)$$

Podemos calcular fácilmente cómo actúa el operador  $\hat{S}_x$  en la base  $B_z$ . Para esto basta con revertir algunas de las expresiones anteriores para demostrar fácilmente que  $\hat{S}_x \vec{0}_z = \vec{1}_z$  y  $\hat{S}_x \vec{1}_z = \text{vec}0_z$ . Haciendo lo mismo con  $\hat{S}_y$  obtenemos que las matrices de estos operadores en la base  $B_z$  son

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}. \quad (2)$$

En lo que sigue usaremos la definición de las matrices de Pauli  $\sigma_j$  ( $j = x, y, z$ ) como aquellas que cumplen que  $\hat{S}_j = \frac{\hbar}{2} \sigma_j$ . Estas matrices son

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (3)$$

Estas matrices tienen propiedades muy importantes, que usaremos a lo largo del curso. En particular, satisfacen las siguientes relaciones:

$$\{\sigma_j, \sigma_k\} = 2\delta_{jk}, \quad [\sigma_j, \sigma_k] = 2i\epsilon_{jkl}\sigma_l. \quad (4)$$

En muchas ocasiones usaremos la notación  $\vec{\sigma}$  para denotar a un vector de tres operadores:  $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ . De estas propiedades se deduce simplemente que para cualquier vector  $\vec{a} = (a_x, a_y, a_z)$  vale

$$(\vec{a}_1 \cdot \vec{\sigma})(\vec{a}_2 \cdot \vec{\sigma}) = \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \mathbb{1} + i (\vec{a}_1 \wedge \vec{a}_2) \cdot \vec{\sigma} \quad (5)$$

Dejamos para mas adelante la demostración de que de todo lo antedicho surge naturalmente el resultado general obtenido en una secuencia de aparatos de  $SG$  en la cual el primero está orientado en la dirección  $\vec{e}_n$  y el segundo en  $\vec{e}_{n'}$  (que, como adelantamos tiene resultados  $\pm\hbar/2$  con probabilidades  $(1 \pm \vec{e}_n \cdot \vec{e}_{n'})/2$ ).

Por último, en el modelo esbozado hasta aquí el proceso de medición es siempre visto como un proceso de filtrado en el cual el sistema interactúa con algún aparato que tiene otros grados de libertad (en el caso del  $SG$  el spin interactúa con la posición del átomo por vía del Hamiltoniano de interacción  $H_{int} = -\vec{\mu}\vec{B}(z)$ ). Hasta aquí simplemente hemos descripto esta interacción de manera muy simplificada dando por entendido que los distintos valores del observable a medir dan lugar a distintos haces en los cuales el sistema queda preparado en los estados correspondientes (cada uno de los cuales corresponde a un resultado diferente de la propiedad medida).

## J. Los experimentos que no se realizan no tienen resultados

La mecánica cuántica nos dice que el extraño modelo que esbozamos mas arriba es universalmente aplicable. Todo sistema f

ísico debe ser descripto de la misma manera. Sus estados son vectores, sus propiedades observables son operadores etc. Es un modelo extraño e anti intuitivo que, como discutiremos a lo largo del curso, impone una visión radicalmente distinta sobre la naturaleza que aquella que caracterizaba a la ciencia pre-cuántica. En efecto, nunca antes de la mecánica cuántica la física se había planteado una limitación epistemológica tan fuerte como la que caracteriza a este modelo: Siempre se había pensado que los objetos que componen el Universo no solamente pueden ser caracterizados por propiedades mensurables (o sea, propiedades que toman valores susceptibles de ser medidos experimentalmente). También, la física siempre aceptó aquello cuya validez resulta obvia a partir de nuestro sentido común: todas las propiedades de un objeto deberían poder determinarse simultáneamente. Por supuesto, la determinación simultanea de los valores de todas las propiedades de un objeto podría ser una tarea técnicamente difícil. Pero las dificultades técnicas o instrumentales son siempre vistas como desafíos, como obstáculos que podemos intentar superar.

En cambio, la mecánica cuántica plantea, como veremos, que no todas las propiedades observables de un sistema pueden ser medidas simultáneamente. Suele afirmarse que en realidad lo que sucede es que la medición de un observable afecta el valor de cualquier otro que

sea incompatible con el anterior. Pero esa visión es superficial y, tal vez, está demasiado atada a la historia y no a los principios de la mecánica cuántica. Discutiremos este punto cuando hablemos sobre el principio de indeterminación pero adelantamos algo que puede servir como motivación, para invitarlos a reflexionar:

La mecánica cuántica no afirma que la medición de un observable afecta el valor de otro complementario. Dice algo mucho más radical y anti intuitivo: Afirma que ninguna propiedad observable toma valores antes de ser medida (y la medición es un proceso de interacción).

La consigna: "los experimentos que no se realizan no tienen resultados" es probablemente la más indigerible de todas las "consignas cuánticas". A lo largo del curso veremos maneras contundentes de demostrar su validez. Como simple ilustración veamos un caso hipersimplificado: Consideremos una partícula de spin  $1/2$ . Sabemos que la medición de cualquier componente del spin da como resultado los valores  $\pm\hbar/2$ . Tomemos tres direcciones  $\vec{e}_{n_1}, \vec{e}_{n_2}, \vec{e}_{n_3}$  que forman un ángulo de 120 grados entre sí, tal como indica la figura (de modo tal que  $\vec{e}_{n_1} + \vec{e}_{n_2} + \vec{e}_{n_3} = 0$ ). Supongamos que en la naturaleza las tres propiedades  $S_{n_1,2,3}$  están definidas antes de que las midamos (aceptamos que la medición de una podría eventualmente afectar el valor de la otra). Y aceptemos dos hipótesis adicionales: a) que los valores existentes son idénticos a los medidos (o sea, son  $\pm\hbar/2$ ) y b) Los valores existentes están relacionados entre sí por las mismas relaciones funcionales que los observables que los representan (hipótesis que se conoce con el nombre de "consistencia funcional"). Evidentemente, con estas hipótesis llegamos a la siguiente contradicción: Como los observables satisfacen  $\hat{S}_{n_1} + \hat{S}_{n_2} + \hat{S}_{n_3} = 0$ , la misma relación debería cumplirse para los valores existentes, que tienen que tomar valores  $\pm\hbar/2$ . Sin embargo nunca es posible sumar tres cantidades que toman valores  $\pm\hbar/2$  y obtener cero como resultado!!

Veremos unos cuantos ejemplos más sobre las paradojas (o pseudo paradojas) a las que se llega si se supone que los valores de las propiedades observables toman valores antes de ser medidos. Y lo haremos relajando las hipótesis anteriores (que pueden ser cuestionadas por varios motivos).

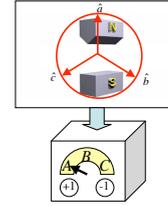


FIG. 13 Podríamos medir el espín en alguna de tres direcciones  $\vec{e}_j$ ,  $j = 1, 2, 3$  que formen un ángulo de 120 grados entre sí. Como  $\sum_j \vec{e}_j = 0$ , debería cumplirse que  $\sum S_j = 0$  si  $S_j = \vec{S} \cdot \vec{e}_j$ . Sin embargo, no es posible lograr que esta ecuación se satisfaga si tomamos  $S_j = \pm\hbar/2$ . Esto es un ejemplo más que nos muestra que la mecánica cuántica es incompatible con la idea de que las propiedades observables de un sistema toman valores bien definidos antes de la medición. Los experimentos que no se realizan no tienen resultados.

## II. CLASE 3: FORMALISMO. ESPACIOS VECTORIALES, FUNCIONALES, OPERADORES (DIMENSIÓN FINITA)

Vamos a presentar aquí los elementos matemáticos necesarios sobre las propiedades de los espacios de estados. Como dijimos, estos espacios son espacios vectoriales complejos cuya dimensión es igual al número máximo de resultados diferentes en una medición exhaustiva. En general, este número es infinito (no numerable) para todos los casos en donde intervengan grados de libertad de traslación (continuos). Entonces, los espacios vectoriales que necesitamos analizar tienen dimensión infinita (no numerable). Pero, por simplicidad, resumiremos en primer término las características de los espacios vectoriales de dimensión finita.

### A. Espacios vectoriales

Un conjunto es un espacio vectorial, y sus elementos se denominan "vectores", si es cerrado frente a una operación que llamamos "suma" y frente al producto con elementos de otro conjunto (que debe ser un "cuerpo") a los que llamamos "escalares". Entonces, un espacio vectorial consta de cuatro ingredientes  $\{\mathcal{V}, +, \mathcal{K}, \times\}$ , donde  $\mathcal{V}$  es un conjunto de vectores,  $\mathcal{K}$  es un cuerpo (que típicamente puede ser el de los números reales o los números complejos), y las operaciones  $+$  y  $\times$  son la suma de vectores y el producto por un escalar. Si  $|v_1\rangle$  y  $|v_2\rangle$  son elementos de  $\mathcal{V}$  y  $\lambda_1$  y  $\lambda_2$  son elementos de  $\mathcal{K}$  entonces  $|w\rangle = \lambda_1 \times |v_1\rangle + \lambda_2 \times |v_2\rangle$  es también un elemento de  $\mathcal{V}$ . En general omitiremos el símbolo  $\times$  para indicar el producto de un vector por un escalar. La dimensión del espacio vectorial  $\dim(\mathcal{V})$  es el número máximo de vectores linealmente independientes que es posible encontrar en  $\mathcal{V}$ .

### B. Producto interno hermitiano

Trabajaremos con espacios vectoriales sobre los que es posible definir un producto interno. Dados dos vectores  $|v\rangle$  y  $|w\rangle$  el producto interno entre ambos se denominará  $(|v\rangle, |w\rangle)$  y es tal que

- $(|v\rangle, |w\rangle) \in \mathcal{C}$ , donde  $\mathcal{C}$  es el conjunto de los números complejos.
- $(|v\rangle, |w\rangle) = (|w\rangle, |v\rangle)^*$  donde el sísuperíndice  $*$  se usará para denotar el complejo conjugado.
- El producto interno es lineal en la segunda entrada. O sea:  $(|w\rangle, \lambda_1 |v_1\rangle + \lambda_2 |v_2\rangle) = \lambda_1 (|w\rangle, |v_1\rangle) + \lambda_2 (|w\rangle, |v_2\rangle)$ .
- $(\vec{v}, \vec{v})$  es un número real no negativo y  $(|v\rangle, |v\rangle) = 0$  si y sólo si  $|v\rangle = 0$  (donde 0 denota aquí el vector que es el elemento neutro de la operación suma de vectores).

### C. Norma

Con un producto escalar hermitiano podemos definir la norma de un vector así como también una noción de distancia entre vectores.

- La norma de un vector se define como  $\| |v\rangle \| = \sqrt{(|v\rangle, |v\rangle)}$ .
- La distancia entre dos vectores se define como la norma del vector diferencia entre ambos:  $\text{dist}(|u\rangle, |v\rangle) = \| |u\rangle - |v\rangle \|$ .
- El producto escalar nos permite definir también una noción de ortogonalidad entre vectores. Diremos que  $|u\rangle$  es ortogonal a  $|v\rangle$  si y solo si  $(|u\rangle, |v\rangle) = 0$ .

### D. Desigualdad de Schwartz.

Todo producto interno con las propiedades mencionadas mas arriba satisface la "desigualdad de Schwartz" que establece que:  $|( \vec{v}, \vec{u} )|^2 \leq ( \vec{v}, \vec{v} ) \times ( |u\rangle, |u\rangle )$ . Esta propiedad es fácil de probar: Consideremos dos vectores  $|u\rangle$  y  $|v\rangle$ . Definamos un tercer vector  $|z\rangle$  como la parte de  $|u\rangle$  que es ortogonal a  $|v\rangle$ . O sea:  $|z\rangle = |u\rangle - \frac{(|v\rangle, |u\rangle)}{(|v\rangle, |v\rangle)} |v\rangle$  (es trivial probar que  $(|v\rangle, |z\rangle) = 0$ ). De aquí vemos que el vector  $|u\rangle$  puede escribirse como suma de dos vectores ortogonales simplemente invirtiendo la expresión anterior:  $|u\rangle = |z\rangle + \frac{(|v\rangle, |u\rangle)}{(|v\rangle, |v\rangle)} |v\rangle$ . Calculando ahora la norma de  $|u\rangle$  obtenemos

$$\begin{aligned} \| |u\rangle \|^2 &= \| |z\rangle \|^2 + \| |v\rangle \|^2 \times |( |v\rangle, |u\rangle )|^2 \times \frac{1}{(|v\rangle, |v\rangle)^4} \\ &\geq |( |v\rangle, |u\rangle )|^2 \times \frac{1}{\| |v\rangle \|^2}. \end{aligned}$$

Multiplicando ambos lados de la igualdad por  $\| |v\rangle \|^2$  obtenemos la desigualdad de Schwartz.

### E. Bases ortonormales

Un conjunto de  $D$  vectores  $B = \{|u_i\rangle, i = 1, \dots, D\}$  en un espacio vectorial de dimensión  $D$  es una base ortonormal si y solo si: a) Los  $D$  vectores son linealmente independientes y b) Los vectores satisfacen que  $(|u_i\rangle, |u_j\rangle) = \delta_{i,j}$ .

Todo vector  $|v\rangle$  puede escribirse como combinación lineal de los elementos de una base ortonormal. En efecto,  $|v\rangle = \sum_j v_j |u_j\rangle$  donde los coeficientes  $v_j$  pueden calcularse tomando el producto interno con los estados  $|u_k\rangle$ . De este modo obtenemos  $v_k = (|u_k\rangle, |v\rangle)$ . O sea que la descomposición de cualquier vector es  $|v\rangle = \sum_k (|v_i\rangle, |v\rangle) |v_i\rangle$ .

## F. Funcionales lineales. Notación de Dirac

$f$  es una funcional lineal si  $f$  es una aplicación  $f : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{C}$  (a todo vector le asigna un número complejo) tal que satisface la linealidad  $f(\lambda_1|v_1\rangle + \lambda_2|v_2\rangle) = \lambda_1 f(|v_1\rangle) + \lambda_2 f(|v_2\rangle)$ .

Es importante notar que una vez definido el producto escalar  $(|u\rangle, |v\rangle)$  queda definida una asociación entre vectores y funcionales. Esto es, para todo vector  $|v\rangle$  podemos definir una funcional, que denotaremos  $F_{|v\rangle}$  de modo tal que su acción sobre cualquier otro vector  $|w\rangle$  es tal que  $F_{|v\rangle}(|w\rangle) = (|v\rangle, |w\rangle)$ . Es decir, la funcional asociada al vector  $|v\rangle$  le asigna un número a todo otro vector  $|w\rangle$  que es igual a la proyección de  $|w\rangle$  sobre  $|v\rangle$ .

A partir de ahora usaremos la llamada "Notación de Dirac" para las funcionales. A la funcional  $F_{|v\rangle}$  la denotaremos como  $\langle v|$  (o sea:  $F_{|v\rangle} = \langle v|$ ) y al producto interno entre dos vectores lo denotaremos como  $(|v\rangle, |w\rangle) = \langle v|w\rangle$ .

## G. Operadores lineales

Un operador lineal  $\hat{A}$  es una aplicación  $\hat{A} : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$  tal que cumple con  $\hat{A}(\lambda_1|v_1\rangle + \lambda_2|v_2\rangle) = \lambda_1\hat{A}(|v_1\rangle) + \lambda_2\hat{A}(|v_2\rangle)$ .

Para cada base  $B = \{|u_j\rangle, j = 1, \dots, D\}$  un operador lineal tiene asociada una matriz  $A_{jk}$ . En efecto, supongamos que aplicamos el operador  $\hat{A}$  al vector  $|w\rangle = \sum_k w_k \vec{v}_k$ . Por la linealidad tenemos que  $|w'\rangle = \hat{A}|w\rangle = \sum_k w_k \hat{A}|v_k\rangle$ . Pero el vector  $|w'\rangle$  también puede desarrollarse en la misma base:  $|w'\rangle = \sum_j w'_j |v_j\rangle$ . Entonces, tenemos la igualdad

$$|w'\rangle = \sum_j w'_j |v_j\rangle = \sum_k w_k \hat{A}|v_k\rangle. \quad (6)$$

De aquí podemos despejar  $w'_j$  tomando el producto interno con  $|v_j\rangle$  y obtenemos  $w'_j = \sum_k w_k A_{jk}$ , donde  $A_{jk} = \langle v_j|\hat{A}|v_k\rangle$  (o sea,  $A_{jk} = (|v_j\rangle, \hat{A}|v_k\rangle)$ ). La matriz del operador  $\hat{A}$  en la base  $B$  nos permite obtener las coordenadas del vector transformado por  $\hat{A}$  en función de las coordenadas del vector sin transformar.

Obviamente la matriz del operador depende de la base. Para relacionar la matriz del operador en dos bases diferentes  $B = \{|v_j\rangle, j = 1, \dots, D\}$  y  $B' = \{|v'_j\rangle, j = 1, \dots, D\}$  podemos proceder de la siguiente forma: si vinculamos las dos bases escribiendo  $|v'_j\rangle = \sum_k \langle v_k|v'_j\rangle |v_k\rangle$  y reemplazamos esta expresión en la fórmula para  $A'_{jk} = \langle v'_j|\hat{A}|v'_k\rangle$  obtenemos:

$$\begin{aligned} A'_{jk} &= \langle v'_j|\hat{A}|v'_k\rangle = \sum_{lm} \langle v'_j|v_l\rangle \langle v_l|\hat{A}|v_m\rangle \langle v_m|v'_k\rangle \\ A'_{jk} &= \sum_{lm} U_{jl} A_{lm} U_{km}^* \end{aligned} \quad (7)$$

donde definimos la matriz de cambio de base  $U_{jl} = \langle v'_j|v_m\rangle$ .

## H. Operadores a partir de kets y bras. Proyectores. Algunas virtudes de la notación de Dirac

A partir de dos vectores  $|v\rangle$  y  $|w\rangle$  podemos construir dos operadores lineales distintos:

$$P_{uv} = |u\rangle\langle v|, \quad P_{vu} = |v\rangle\langle u| \quad (8)$$

donde la interpretación de cada uno es simplemente que  $P_{uv}$  aplicado a cualquier vector  $|w\rangle$  siempre apunta en la dirección de  $|u\rangle$  y tiene un módulo proporcional a la proyección de  $|w\rangle$  sobre  $|v\rangle$ . Asimismo, es fácil notar que hay un operador al que podemos denominar el "proyector sobre  $|v\rangle$ " que simplemente resulta ser

$$P_{|v\rangle} = |v\rangle\langle v| \quad (9)$$

Es evidente que este operador cumple que  $P_{|v\rangle}^2 = P_{|v\rangle}$  (que es la regla básica que define a un proyector). El proyector  $P_{|v\rangle}$  proyecta sobre un único vector y por eso se dice que es un proyector de rango 1 (su matriz tiene un único autovalor no nulo). Podemos definir proyectores de mayor rango simplemente sumando los proyectores sobre dos vectores ortogonales  $|v_1\rangle$  y  $|v_2\rangle$ . En efecto, el operador  $P_{1,2} = P_{|v_1\rangle} + P_{|v_2\rangle}$  también es un proyector pero su rango es 2. Esto puede generalizarse a proyectores de rango mas alto, tal como veremos en lo que sigue.

Consideremos una base ortonormal  $B = \{|u_j\rangle, j = 1, \dots, D\}$  y los proyectores  $P_j = |v_j\rangle\langle v_j|$ . Entonces, podemos demostrar que vale que el operador identidad  $\mathbb{1}$  puede escribirse como

$$\mathbb{1} = \sum_j |v_j\rangle\langle v_j| = \sum_j P_j \quad (10)$$

Esto vale para cualquier base ortonormal. Es decir, la identidad se puede escribir como la suma de los proyectores sobre cualquier base ortonormal. Esta descomposición de la identidad es muy útil ya que nos permite obtener fácilmente muchos resultados. Por ejemplo, a partir de ella podemos obtener de manera inmediata la relación que existe entre la matriz del operador en dos bases diferentes. En efecto:

$$\begin{aligned} A'_{jk} &= \langle v'_j|\hat{A}|v'_k\rangle = \langle v'_j|\mathbb{1}\hat{A}\mathbb{1}|v'_k\rangle \\ &= \langle v'_j|(\sum_l |v_l\rangle\langle v_l|)\hat{A}(\sum_m |v_m\rangle\langle v_m|)|v'_k\rangle \\ &= \sum_{lm} \langle v'_j|v_l\rangle \langle v_l|\hat{A}|v_m\rangle \langle v_m|v'_k\rangle \\ &= \sum_{lm} U_{jl} A_{lm} U_{km}^* \end{aligned}$$

También es evidente que la matriz  $U$  satisface que  $U \times U^{T*} = \mathbb{1}$  ya que  $(U \times U^{T*})_{jk} = \sum_l U_{jl} U_{kl}^* = \sum_l \langle v'_j|v_l\rangle \langle v_l|v'_k\rangle = \langle v'_j|(\sum_l |v_l\rangle\langle v_l|)|v'_k\rangle = \langle v'_j|\mathbb{1}|v'_k\rangle = \delta_{jk}$ .

## I. Función de un operador

Sea una función  $f(x) : \mathcal{R} \rightarrow \mathcal{R}$  que admite un desarrollo de Taylor de la forma  $f(x) = \sum_{n \geq 0} f^{(n)}(x)|_{x=0} x^n / n!$ . Entonces, dado un operador  $\hat{A}$  cualquiera, podemos definir al operador lineal  $f(\hat{A})$  como  $f(\hat{A}) = \sum_{n \geq 0} f^{(n)}(x)|_{x=0} \hat{A}^n / n!$ . Por ejemplo, el operador  $\exp(\hat{A}) = \sum_{n \geq 0} \hat{A}^n / n!$ .

## J. Operador Adjunto. Operadores hermíticos y unitarios

Dado un operador  $\hat{A}$  definimos el operador adjunto hermítico, que se denota como  $\hat{A}^\dagger$ , como aquel operador tal que para todo par de vectores  $|u\rangle$  y  $|v\rangle$  vale que

$$(\vec{u}, \hat{A}|v\rangle) = (\hat{A}^\dagger|u\rangle, |v\rangle). \quad (11)$$

Es fácil encontrar una relación simple entre los elementos de matriz de  $\hat{A}$  y de  $\hat{A}^\dagger$ . En efecto:

$$\begin{aligned} (\hat{A}^\dagger)_{jk} &= (|v_j\rangle, \hat{A}^\dagger|v_k\rangle) \\ &= (\hat{A}^\dagger|v_k\rangle, |v_j\rangle)^* = (|v_k\rangle, \hat{A}|v_j\rangle)^* \\ &= (\hat{A})_{kj}^*. \end{aligned} \quad (12)$$

O sea, la matriz de  $\hat{A}^\dagger$  es la transpuesta y conjugada de la matriz de  $\hat{A}$ . Hay propiedades importantes de los operadores adjuntos. En particular se cumple que  $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$ . Esta identidad se demuestra trivialmente usando que la matriz adjunta es la transpuesta y conjugada:  $((\hat{A}\hat{B})^\dagger)_{jk} = (\hat{A}\hat{B})_{kj}^* = \sum_l A_{kl}^* B_{lj}^* = \sum_l (\hat{B}^\dagger)_{jl} (\hat{A}^\dagger)_{lk} = (\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger)_{jk}$ .

Definimos los siguientes tipos de operadores

- $\hat{A}$  es un operador hermítico si y solo si satisface que  $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ . Es evidente que para estos operadores todos los elementos diagonales deben ser reales.
- $\hat{U}$  es un operador unitario si y solo si satisface que  $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = \mathbb{1}$ . Es decir, que para estos operadores la matriz adjunta es la inversa. Un ejemplo importante de este tipo de operadores es el operador de cambio de base. Dadas dos bases  $B = \{|v_j\rangle, j = 1, \dots, D\}$  y  $B' = \{|v'_j\rangle, j = 1, \dots, D\}$  la matriz definida por los productos escalares entre los elementos de ambas bases es unitaria. Es decir, si definimos  $(\hat{U})_{jk} = \langle v'_j | v_k \rangle$  entonces se cumple que  $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \mathbb{1}$ . Esto puede demostrarse apelando a la versatilidad de la notación de Dirac de manera muy sencilla:

$$\begin{aligned} (\hat{U}^\dagger\hat{U})_{jk} &= \sum_l \langle v'_j | \hat{U}^\dagger | v_l \rangle \langle v_l | \hat{U} | v_k \rangle \\ &= \sum_l \langle v_l | \hat{U} | v_j \rangle^* \langle v_l | \hat{U} | v_k \rangle \\ &= \sum_l \langle v'_l | v_j \rangle^* \langle v'_l | v_k \rangle = \sum_l \langle v_j | v'_l \rangle \langle v'_l | v_k \rangle \\ &= \langle v_j | v_k \rangle = \delta_{jk} \end{aligned}$$

- Como ya definimos mas arriba, los proyectores son operadores que cumplen que  $\hat{P}^2 = \hat{P}$ .
- Un operador  $\hat{A}$  es "normal" si y solo si se cumple que  $\hat{A}^\dagger\hat{A} = \hat{A}\hat{A}^\dagger$  (o sea, si  $\hat{A}$  "conmuta" con su adjunta). Evidentemente, los operadores hermíticos y los unitarios son normales.

## K. Traza de un operador

Dado un operador  $\hat{A}$  se define la traza de  $\hat{A}$  como el funcional lineal que cumple  $\text{Tr}(\hat{A}) = \sum_j \langle v_j | \hat{A} | v_j \rangle$ . O sea, la traza es la suma de todos los elementos diagonales de  $\hat{A}$  en una base. Es simple ver que la traza es la misma cualquiera sea la base en la que la calculemos. En efecto, si usamos la base  $B'$  en lugar de la base  $B$  para escribir la traza, podemos ver que

$$\begin{aligned} \sum_j \langle v_j | \hat{A} | v_j \rangle &= \sum_{jkm} \langle v_j | v'_k \rangle \langle v'_k | \hat{A} | v'_m \rangle \langle v'_m | v_j \rangle \\ &= \sum_{km} \left( \sum_j \langle v'_m | v_j \rangle \langle v_j | v'_k \rangle \right) \langle v'_k | \hat{A} | v'_m \rangle \\ &= \sum_{km} \langle v'_m | v'_k \rangle \langle v'_k | \hat{A} | v'_m \rangle \\ &= \sum_m \langle v'_m | \hat{A} | v'_m \rangle \end{aligned}$$

Una propiedad muy importante de la traza, que se deduce de las expresiones anteriores, es que  $\text{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = \text{Tr}(\hat{B}\hat{A})$ . De hecho, puede demostrarse que la única funcional lineal con esta propiedad es la traza, definida mas arriba.

## L. Operadores diagonalizables

Un operador  $\hat{A}$  es diagonalizable si y solo si existe una base ortonormal tal que la matriz de  $\hat{A}$  es diagonal. Si  $\hat{A}$  es diagonal en la base  $B$  entonces se cumple que  $\hat{A}|v_j\rangle = a_j|v_j\rangle$ . Cuando esto sucede, se dice que los vectores  $|v_j\rangle$  son los autovectores de  $\hat{A}$  y  $a_j$  son los correspondientes autovalores.

Es importante saber cuando un operador  $\hat{A}$  es diagonalizable. Para esto previamente definimos el polinomio característico de  $\hat{A}$ , y lo denotamos como  $p(x)$ , como  $p(x) = \det(\hat{A} - x\mathbb{1})$ . Un teorema importante (Cayley Hamilton) establece que el polinomio característico es anulado por  $\hat{A}$ , o sea:  $p(\hat{A}) = 0$ . Dado el polinomio característico  $p(x)$  podemos encontrar sus raíces (dado que el grado de  $p(x)$  es  $D$ , a lo sumo hay  $D$  raíces distintas a las que llamamos  $x_1, x_2, \dots, x_D$ ). O sea  $p(x) = \prod_j (x - x_j)$  (a menos de un factor multiplicativo, o sea, elegimos  $p(x)$  como un polinomio mónico). Cabe notar que si  $\hat{A}$  es diagonalizable entonces las raíces de  $p(x)$  son los autovalores de  $\hat{A}$ . Por último, se define el polinomio "minimal" de  $\hat{A}$ , denotado como  $m(x)$ , como el polinomio de menor grado tal que  $m(\hat{A}) = 0$ . Es posible demostrar, como corolario

del teorema de Cayley Hamilton, que  $m(x)$  divide a  $p(x)$  y que  $m(x)$  tiene las mismas raíces que  $p(x)$ .

Dados estos elementos podemos formular la condición necesaria y suficiente para que  $\hat{A}$  sea diagonalizable:  $\hat{A}$  es diagonalizable si y solo si el polinomio minimal  $m(x)$  no tiene raíces múltiples. Como ejemplo de matriz no diagonalizable podemos mencionar a la matriz  $\sigma_- = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$  cuyo polinomio característico es  $p(x) = x^2$  y cuyo polinomio minimal es  $m(x) = p(x)$ . La matriz (que es nilpotente) no es diagonalizable ya que  $m(x)$  tiene una raíz doble.

Hay otra condición mas sencilla para verificar si una matriz es diagonalizable ya que es posible demostrar el siguiente teorema:  $\hat{A}$  es diagonalizable si y solo si  $\hat{A}$  es normal. En la teoría solamente voy a mencionar esta condición (no la del polinomio).

El método de diagonalización de operadores es bien conocido: una vez conocido el polinomio característico y sus raíces, para cada una de ellas es necesario resolver un sistema de ecuaciones para encontrar los autovectores asociados a cada autovalor. El sistema es de la forma  $\hat{A}|w_j\rangle = x_j|w_j\rangle$ .

### M. Descomposición espectral de un operador.

Supongamos que  $\hat{A}$  es diagonalizable en la base  $B = \{|v_j\rangle, j = 1, \dots, D\}$  y que los autovalores asociados a cada autovector son  $a_j$ . Entonces, es fácil demostrar que el operador puede escribirse como

$$\hat{A} = \sum_j a_j |v_j\rangle\langle v_j|.$$

En un caso mas general, puede haber muchos autovectores que tengan el mismo autovalor. La degeneración del autovalor  $a_j$  será igual al número máximo de autovectores ortogonales que tienen autovalor  $a_j$ . La denotaremos como  $g_j$  y no es otra cosa que la dimensión del subespacio asociado al autovalor  $a_j$ . En ese caso, la base de autovectores de  $\hat{A}$  puede escribirse como  $B = \{|v_{j,\mu_j}\rangle, j = 1, \dots, K, \mu_j = 1, \dots, g_j\}$  (en este caso, la dimensión del espacio de estados es  $D = \sum_{j=1}^K g_j$ ). Entonces, la descomposición espectral del operador es

$$\hat{A} = \sum_{j=1}^K a_j \sum_{\mu=1}^{g_j} |v_{j,\mu_j}\rangle\langle v_{j,\mu_j}| \quad (13)$$

En cualquier caso, esta descomposición es del tipo  $\hat{A} = \sum_j a_j \Pi_j$  donde  $\Pi_j$  es el proyector sobre el subespacio asociado al autovalor  $a_j$  (cuya dimensión es  $g_j$ ).

### N. Operadores compatibles. Teorema: compatibles si y solo si conmutan.

Sean dos operadores diagonalizables  $\hat{A}$  y  $\hat{B}$ . Se dice que estos operadores son compatibles cuando son diagonaliz-

ables en la misma base (o sea, tienen una base común de autovectores). Podemos demostrar que dos operadores  $\hat{A}$  y  $\hat{B}$  son compatibles si y sólo si conmutan (o sea, si y sólo si  $[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$ ).

Este teorema es muy sencillo de probar en una dirección. En efecto, si los operadores son compatibles entonces es evidente que conmutan ya que dos matrices que son diagonales en la misma base conmutan (su producto, en cualquier orden, es diagonal en la misma base). En la otra dirección, el teorema es menos trivial. En efecto, supongamos que  $\hat{A}$  y  $\hat{B}$  conmutan y supongamos que  $\hat{A}$  es diagonal en la base de autovectores  $B = \{|v_{j,\mu_j}\rangle, j = 1, \dots, K, \mu_j = 1, \dots, g_j\}$  (o sea, estamos suponiendo que el operador  $\hat{A}$  puede ser degenerado y que la degeneración del autovalor  $a_j$  es, como antes, igual a  $g_j$ ). Como estos vectores son autovectores de  $\hat{A}$  se cumple que  $\hat{A}|v_{j,\mu_j}\rangle = a_j|v_{j,\mu_j}\rangle$ . Veamos ahora que propiedad tienen los vectores  $\hat{B}|v_{j,\mu_j}\rangle$ . Es fácil probar que estos vectores siguen siendo autovectores de  $\hat{A}$  con el mismo autovalor  $a_j$ . Esto surge de que si usamos la conmutatividad de los dos operadores podemos ver que  $\hat{A}\hat{B}|v_{j,\mu_j}\rangle = \hat{B}\hat{A}|v_{j,\mu_j}\rangle = a_j\hat{B}|v_{j,\mu_j}\rangle$ . En consecuencia, el operador  $\hat{B}$  deja invariantes a los subespacios de dimensión  $g_j$  que están asociados a los distintos autovalores  $a_j$ . Por lo tanto, en esta base las matrices de los operadores  $\hat{A}$  y  $\hat{B}$  son

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} a_1 \mathbb{1}_{g_1 \times g_1} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_2 \mathbb{1}_{g_2 \times g_2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & a_3 \mathbb{1}_{g_3 \times g_3} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_K \mathbb{1}_{g_K \times g_K} \end{bmatrix},$$

$$\hat{B} = \begin{bmatrix} B_{g_1 \times g_1}^{(1)} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & B_{g_2 \times g_2}^{(2)} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & B_{g_3 \times g_3}^{(3)} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & B_{g_K \times g_K}^{(K)} \end{bmatrix}. \quad (14)$$

O sea, en esta base la matriz de  $\hat{B}$  es diagonal por bloques. Los bloques son de  $g_j \times g_j$  y en esos bloques la matriz de  $\hat{A}$  es proporcional a la identidad. Si hacemos cualquier cambio de base en esos subespacios no modificaremos la matriz de  $\hat{A}$  (ya que es proporcional a la identidad). Entonces, como cada una de las submatrices  $B^{(j)}$  es diagonalizable, podemos encontrar una base en ese subespacio en la cual  $B^{(j)}$  es diagonal. Haciendo eso en cada uno de los subespacios asociados a los autovalores  $a_j$  encontramos una base en la cual  $\hat{B}$  será diagonal y en la cual  $\hat{A}$  es también diagonal (y tiene la misma forma que antes). Por lo tanto, existe una base en la que ambos operadores son diagonales.

## O. Descomposición en valores singulares de una matriz

El siguiente es un resultado sÚmamente Útil (y no demasiado conocido). Sea  $A$  una matriz de  $N \times M$  entonces, existen matrices unitarias  $U$  (de  $N \times N$ ) y  $V$  (de  $M \times M$ ) y existe una matriz semidiagonal y positiva  $D$  (de  $N \times M$ ) tal que  $A = UDV$ . La matriz  $D$ , si  $N \leq M$  (lo cual se puede suponer sin pÉrdida de generalidad) es tal que

$$D = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & d_2 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & d_N & 0 \end{pmatrix}_{N \times M} \quad (15)$$

Esto puede demostrarse de la siguiente forma: Dada la matriz  $A$ , podemos construir dos operadores hermÍticos de la siguiente manera  $E = A^\dagger A$  (de  $M \times M$ ) y  $F = AA^\dagger$  (de  $N \times N$ ). El caracter hermÍtico de ambos operadores surge inmediatamente de su definici3n. AdemÁs ambos operadores son positivos. Como ambos operadores son hermÍticos entonces son diagonalizables. En particular, podemos escribir  $F = UKU^\dagger$ , donde  $K$  es una matriz de diagonal de  $N \times N$  con elementos positivos en la diagonal. Ahora bien, cualquier matriz  $K$  de ese tipo puede escribirse como el siguiente producto de dos matrices " diagonales"  $D$ , de  $N \times M$  tal como la que aparece mas arriba. En efecto, siempre podemos escribir  $K = DD^\dagger$  donde los elementos no nulos de  $D$  son las raices cuadradas de los elementos diagonales de  $K$ . De este modo podemos escribir  $F = UDD^\dagger U^\dagger$ . En esta expresi3n podemos introducir la matriz unitaria  $V$ , de  $M \times M$  y su adjunta de modo tal que  $F = UDVV^\dagger D^\dagger U^\dagger$ . En consecuencia, podemos identificar  $A = UDV$  donde  $U$  es la matriz que diagonaliza  $F = AA^\dagger$ . Razonando en forma anÁloga para el operador  $E = A^\dagger A$ , podemos ver que  $V$  es la matriz que diagonaliza  $E$ .

## P. Resumen de los postulados de la mecÁnica cuÁntica

Estamos en condiciones de presentar los postulados de la mecÁnica cuÁntica para sistemas cuyos espacios de estados tienen dimensi3n finita. Estos son:

1. El estado de mÁxima informaci3n de cualquier sistema fÍsico se describe con un vector que pertenece a un espacio de Hilbert. La dimensi3n de ese espacio es el nÚmero mÁximo de resultados posibles en un anÁlisis exhaustivo del sistema. Por lo tanto, los sistemas cuyo espacio de estados es de dimensi3n finita viven en un espacio pre-Hilbert.
2. Las magnitudes observables de cualquier sistema fÍsico estÁn representadas por operadores lineales hermÍticos. Si  $\hat{A}$  es un observador hermÍtico siempre admite una descomposici3n espectral de la forma  $\hat{A} = \sum_i a_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|$  donde  $a_i$  son los autovalores y  $|\phi_i\rangle$  son los autovectores (suponemos que todos los autovalores son diferentes).

3. Si medimos la propiedad representada por el observable  $\hat{A}$ , los resultados posibles son los autovalores del operador.
4. Si el estado del sistema es  $|\Psi\rangle$  y medimos el observable  $\hat{A}$ , la probabilidad de obtener un resultado  $a_i$  es la proyecci3n del estado sobre el subespacio asociado a ese autovalor. O sea, para el caso no degenerado tenemos:  $\text{Prob}(a_i) = |\langle\phi_i|\Psi\rangle|^2$ .
5. Si se mide el observable  $\hat{A}$  y se observa el autovalor  $a_i$ , el estado despu3s de la medici3n es el autovector correspondiente (o el estado original proyectado sobre el subespacio asociado al autovalor medido).

Para el caso de los sistemas de espín 1/2 podemos describir los vectores  $|\Psi\rangle$  como combinaciones lineales de cualquier base de dos vectores. En particular  $|\Psi\rangle = \alpha|0_z\rangle + \beta|1_z\rangle$ . Los observables son todos matrices de  $2 \times 2$  que siempre pueden escribirse como combinaciones lineales de la identidad y las matrices de Pauli  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  y  $\sigma_z$ . En general, cualquier observable es  $\hat{A} = a_0 I + \vec{b} \cdot \vec{\sigma}$  y por lo tanto estÁ definido por cuatro parÁmetros reales. Como es obvio, podemos reescribir a  $\hat{A}$  como  $\hat{A} = a_0 (I + \frac{\vec{b}}{a_0} \cdot \vec{\sigma})$ . Si definimos al versor  $\vec{n} = \vec{b}/|\vec{b}|$ , entonces cualquier operador puede escribirse como  $\hat{A} = a_0 (I + \frac{|\vec{b}|}{a_0} \vec{n} \cdot \vec{\sigma})$ . Este operador obviamente conmuta con  $\vec{n} \cdot \vec{\sigma}$  y por lo tanto puede ser diagonalizado en la misma base que  $\vec{n} \cdot \vec{\sigma}$ . Esto implica que cualquier operador es, en definitiva, un mÚltiplo de  $\vec{n} \cdot \vec{\sigma}$  mas un factor proporcional a la identidad. Esto quiere decir, que los Únicos observables no triviales para un espín son las componentes del vector  $\vec{\sigma}$  en alguna direcci3n.

Asimismo, es fÁcil encontrar autovalores y autovectores de  $\vec{n} \cdot \vec{\sigma}$  (cosa que haremos en detalle mas adelante). En efecto, usando que  $(\vec{n} \cdot \vec{\sigma})^2 = I$  es evidente que el proyector sobre los autoestados de autovalor  $\pm 1$  de  $\vec{n} \cdot \vec{\sigma}$  son  $\hat{P}_{\vec{n}, \pm} = \frac{1}{2}(I \pm \vec{n} \cdot \vec{\sigma})$ .

### III. CLASE 4: ESPACIOS DE HILBERT. DISTRIBUCIONES. OPERADORES POSICIÓN Y MOMENTO

Analizaremos aquí los espacios que necesitaremos para describir los estados físicos de un sistema cualquiera. Estos espacios son espacios vectoriales complejos, con un producto interno hermitiano, tal como los que vimos hasta ahora. A estos espacios se los denomina "espacios pre-Hilbertianos". Para ser un espacio de Hilbert se tiene que cumplir un nuevo axioma: el axioma de completitud. Este axioma es verdaderamente no trivial solamente en el caso en que el espacio tenga dimensión infinita. Este axioma es el que garantiza que en estos espacios de dimensión infinita tengan validez las propiedades más importantes que vimos en el capítulo anterior, para el caso de dimensión finita (en particular, el teorema espectral, que dice que los operadores hermíticos son diagonalizables, etc). El axioma de completitud, que veremos más adelante, dice que toda sucesión convergente -en el sentido de Cauchy- debe converger a un elemento del propio espacio). En el caso de dimensión finita este axioma se satisface automáticamente y por lo tanto los espacios que vimos hasta ahora son también espacios de Hilbert y pueden ser utilizados para describir sistemas como los que vimos hasta ahora, para el caso de partículas con spin 1/2, por ejemplo.

#### A. El espacio de las funciones $\mathcal{L}_2$

El espacio vectorial que usaremos para representar los estados físicos de una partícula que se mueve en una dimensión es el espacio de funciones continuas y de cuadrado integrable. Este espacio, se denomina  $\mathcal{L}_2$ . Los elementos del espacio son las funciones  $f : \mathcal{R} \rightarrow \mathcal{C}$  (co dominio real e imagen compleja), tales que la integral  $\int dx f^*(x)f(x)$  es finita (a menos que se indique lo contrario el dominio de integración de todas las integrales se extiende entre  $-\infty$  y  $+\infty$ ). Es fácil ver que:

1.  $\mathcal{L}_2$  es un espacio vectorial. En efecto, es un conjunto cerrado frente a la suma y el producto por escalares complejos). No es sorprendente que este espacio tenga dimensión infinita: para especificar completamente una función hay que dar infinitos números complejos (uno para cada punto del eje real). Como vimos, los vectores de este espacio son las funciones, a las que podemos denotar como  $|f\rangle$ .
2. En  $\mathcal{L}_2$  se puede definir un producto interno hermitiano. En efecto, diremos que el producto escalar entre dos funciones  $f$  y  $g$  es:  $(f, g) = \int dx f^*(x)g(x)$ . Este producto satisface todas las condiciones necesarias que mencionamos en el capítulo anterior: es lineal en la segunda entrada, es hermitiano  $((f, g) = (g, f)^*$ , el producto de cualquier función consigo misma es real y positivo, etc. Por lo tanto puede usarse para definir una

norma, una noción de distancia y de ortogonalidad entre funciones.

3. Podemos definir funcionales lineales sobre  $\mathcal{L}_2$ . Estas son aplicaciones lineales que a toda función le asignan un número complejo. También podemos definir operadores lineales, etc.
4. Tal como sucede en el caso de dimensión finita, la existencia de un producto escalar nos permite asociar una funcional lineal con toda función. En efecto, la funcional lineal asociada a la función  $f \in \mathcal{L}_2$ , se define como aquella funcional  $F_f$  tal que  $F_f(g) = \int dx f^*(x)g(x)$ . Tal como hicimos en el caso de dimensión finita podemos usar la notación de Dirac y denotar a la funcional asociada a la función  $|f\rangle$  como  $\langle f|$ . El espacio de las funcionales se denomina espacio dual y se denota  $\mathcal{L}_2^*$ .
5. Aquí aparece la primera diferencia significativa con el caso de dimensión finita: En ese caso, existe una relación uno a uno (un isomorfismo) entre los vectores y las funcionales (a todo vector le podemos asignar una funcional y a toda funcional un vector). Sin embargo, en dimensión infinita (en particular en el caso que analizamos aquí, donde además de infinita es no numerable), esto no es cierto. Es fácil ver que hay más funcionales que funciones! Veremos el ejemplo más famoso de una funcional sobre  $\mathcal{L}_2$  que no se origina en una función de  $\mathcal{L}_2$ : Sea  $D_a$  la funcional lineal definida como aquella tal que  $D_a(g) = g(a)$ . Esta funcional simplemente evalúa la función en el punto  $x = a$ . Veremos que no proviene de ninguna función de  $\mathcal{L}_2$ . En efecto, esta funcional (que no es otra cosa más que la famosísima delta de Dirac  $D_a = \delta(x - a)$ ) no proviene de una función sino del límite de una sucesión convergente de funciones cada una de las cuales está en  $\mathcal{L}_2$ . De este modo vemos que este espacio no cumple con el axioma de completitud (el límite de la sucesión de funciones no está en  $\mathcal{L}_2$  pero el límite de la sucesión de las funcionales correspondientes pertenece a  $\mathcal{L}_2^*$ ).

#### B. Distribuciones: funcionales que no provienen de funciones

Consideremos la siguiente sucesión de funciones:

$$f_n(x) = \frac{n}{2} \exp(-n|x|) \quad (16)$$

Para todo  $n > 0$  la función  $f(x) \in \mathcal{L}_2$ . Por otra parte, la sucesión es convergente en el sentido de Cauchy ya que la distancia entre dos elementos sucesivos tiende a cero cuando  $n$  tiende a infinito. En efecto, un cálculo explícito sencillo muestra que

$$\|(f_{n+1} - f_n)\|^2 = \int dx (f_{n+1}(x) - f_n(x))^2 \rightarrow 0 \text{ cuando } n \rightarrow \infty$$

Pese a que la sucesión es convergente, el límite para  $n \rightarrow \infty$  de esta sucesión de funciones no es una función de cuadrado integrable. En efecto, ese límite, que podemos denominar  $f_\infty(x)$ , no es una función bien definida. Es un objeto que toma un valor nulo para  $x \neq 0$  y diverge para  $x = 0$ .

Sin embargo, podemos ver que el límite de las correspondientes funcionales  $\langle f_n |$ , al que podemos denominar  $\langle f_\infty |$  está bien definido y es un elemento de  $\mathcal{L}_2^*$ . Para demostrar esto podemos calcular explícitamente la forma en la que actúa cada una de las funcionales  $\langle f_n |$  sobre alguna función  $|g\rangle \in \mathcal{L}_2$ :

$$\begin{aligned} \langle f_n | g \rangle &= \int dx \frac{n}{2} \exp(-n|x|) g(x) \\ &= \sum_k \frac{g^{(k)}|_0}{k!} \frac{n}{2} \int dx \exp(-n|x|) x^k \\ &= \sum_{k \text{ par}} \frac{g^{(k)}|_0}{k!} n (-1)^k \partial_n^k \int_0^\infty dx \exp(-nx) \\ &= \sum_{k \text{ par}} \frac{g^{(k)}|_0}{k!} n (-1)^k \partial_n^k \frac{1}{n} \\ &= \sum_{k \text{ par}} \frac{g^{(k)}|_0}{k!} \frac{1}{n^k} \end{aligned}$$

Si en la última expresión tomamos el límite para  $n \rightarrow \infty$  vemos que solamente sobrevive el término con  $k = 0$ . Por lo tanto:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle f_n | g \rangle = \langle f_\infty | g \rangle = g(0)$$

Como vemos, las funcionales  $\langle f_n |$  están bien definidas tanto para  $n$  finito como en el límite  $n \rightarrow \infty$ . En cambio, en ese límite  $|f_\infty\rangle$  no es un elemento de  $\mathcal{L}_2$ .

Es evidente que podemos construir otras funcionales idénticas a la anterior pero que evalúan la función en otro punto distinto de  $x = 0$ . En efecto, la sucesión de funciones  $f_n^{(a)}(x) = \frac{n}{2} \exp(-n|x - a|)$ , en el límite para  $n \rightarrow \infty$  evalúa la función en  $x = a$ . O sea:  $\langle f_\infty^{(a)} | g \rangle = g(a)$ . Por simplicidad usaremos la notación  $\langle f_\infty^{(a)} | = \langle a |$ .

Hay otras sucesiones de funciones cuyas funcionales convergen a la misma funcional  $\langle a |$  (que no es otra cosa que la delta de Dirac  $\delta(x - a)$ ). Entre ellas, podemos mencionar las siguientes:

$$\begin{aligned} f_n(x) &= \frac{n}{2} \exp(-n|x - a|), \\ g_n(x) &= \frac{1}{n\pi} \frac{1}{(x - a)^2 + 1/n^2}, \\ h_n(x) &= \frac{n}{\sqrt{\pi}} \exp(-n^2(x - a)^2), \\ d_n(x) &= \frac{1}{\pi} \frac{\sin^2(n(x - a))}{n(x - a)^2}. \end{aligned}$$

En todos estos casos las sucesiones son convergentes y convergen al mismo límite, que no es una función. En

efecto, el límite está bien definido para las funcionales y tenemos que  $\langle f_\infty | = \langle g_\infty | = \langle h_\infty | = \langle d_\infty | = \langle a |$ . Esto muestra que en estos espacios de dimensión infinita es posible construir sucesiones convergentes que no convergen a un elemento del espacio (cosa que no es posible hacer en espacios vectoriales de dimensión finita).

En general, a las funcionales que no se originan de funciones sino del límite de sucesiones convergentes se las denomina distribuciones.

### C. Otros ejemplos de distribuciones (transformada de Fourier)

Otro ejemplo importante de sucesión convergente de funciones cuyo límite no es una función de  $\mathcal{L}_2$  es el siguiente

$$\tilde{f}_n^{(k)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ikx), \text{ para } |x| \leq n,$$

y  $f^{(k)}(x) = 0$  cuando  $|x| > n$ . Es fácil demostrar que esta sucesión es convergente (explícitamente, podemos ver que  $\|\tilde{f}_{n+1}^{(k)} - \tilde{f}_n^{(k)}\| \rightarrow 0$  cuando  $n \rightarrow \infty$ . También es claro que el límite de la sucesión no es una función de  $\mathcal{L}_2$  (en este caso es una función bien definida pero no es de cuadrado integrable). Sin embargo, el límite de las funcionales está bien definido ya que

$$\langle \tilde{f}_\infty^{(k)} | g \rangle = \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \exp(ikx) g(x) = \tilde{g}(k)$$

donde  $\tilde{g}(k)$  es la transformada de Fourier de  $g(x)$  evaluada en  $k$ . Como la transformada de Fourier está bien definida para toda función de  $\mathcal{L}_2$ , la funcional  $\langle \tilde{f}_\infty^{(k)} |$  está bien definida. Para simplificar la notación, a esta funcional la llamaremos simplemente  $\langle k |$ . Su acción sobre cualquier función es tal que  $\langle k | g \rangle = \tilde{g}(k)$ .

Hasta ahora hemos visto que podemos definir funcionales  $\langle x |$  y  $\langle k |$  que son tales que cuando actúan sobre cualquier función  $|g\rangle$  dan como resultado  $g(x)$  y  $\tilde{g}(k)$  respectivamente. También vimos que los vectores  $|x\rangle$  y  $|k\rangle$  no son elementos de  $\mathcal{L}_2$ .

### D. El espacio de estados extendido. Bases continuas

Entonces, hemos visto que el espacio  $\mathcal{L}_2$  tiene un dual,  $\mathcal{L}_2^*$  que es "mas grande" que  $\mathcal{L}_2$  ya que existen bras como  $\langle x |$  y  $\langle k |$  que no provienen de ningún vector. El espacio de Hilbert no es otra cosa mas que el espacio  $\mathcal{L}_2$  completado con todos los límites de todas las sucesiones convergentes (en el sentido de Cauchy). Es posible mostrar que  $\mathcal{H}$  así definido es isomorfo a su dual.  $\mathcal{H} = \mathcal{L}_2^{**}$  incluye vectores que provienen de funciones de cuadrado integrable  $|f\rangle$  y también incluye vectores generalizados que se originan en los límites de sucesiones, que pese a no estar en  $\mathcal{L}_2$  tienen bras bien definidos. O sea  $|x\rangle$  y  $|k\rangle$  pertenecen a  $\mathcal{H}$ . (puede construirse una triada de espacios  $\mathcal{L}_2 \rightarrow \mathcal{L}_2^* \rightarrow$

$\mathcal{L}_2^{**} = \mathcal{H}$  que nos lleva a un espacio  $\mathcal{H}$  que satisface el axioma de completitud. Ese es el espacio de Hilbert.

En este espacio podemos definir bases de vectores generalizados como  $B_x = \{|x\rangle, x \in \mathcal{R}\}$  y  $B_k = \{|k\rangle, k \in \mathcal{R}\}$ . Estas bases son completas y con ellas se puede construir una representación del operador identidad:

$$\mathbb{1} = \int dx |x\rangle\langle x| = \int dk |k\rangle\langle k|.$$

Estas bases son completas y ortonormales en un sentido generalizado. En efecto, los estados no son normalizables (ya que no tienen asociadas funciones de cuadrado integrable). Efectivamente, de lo anterior se sigue que

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x'), \quad \langle k|k'\rangle = \delta(k - k')$$

Asimismo, todo vector en  $\mathcal{H}$  puede proyectarse sobre cualquiera de estas bases. En particular, tenemos

$$\langle x|f\rangle = f(x), \quad \langle k|f\rangle = \tilde{f}(k), \quad \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ikx)$$

### E. Operadores posición y momento

Con las bases continuas  $B_x$  y  $B_k$  podemos construir dos operadores que sean diagonales en dichas bases. Si ahora definimos a  $x$  como una magnitud con unidades de longitud, el operador posición se define como

$$\hat{X} = \int dx x |x\rangle\langle x|$$

Análogamente, podemos definir el operador  $\hat{K}$ , que tendrá unidades de  $(\text{longitud})^{-1}$ . Apelando a la constante de Planck, y definiendo la magnitud  $p = \hbar k$ , que tiene unidades de momento, podemos definir el operador momento como aquel que satisface

$$\hat{P} = \int dp |p\rangle\langle p|, \quad \text{con} \quad \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(ipx/\hbar)$$

### F. Estados, funciones de onda y acción de los operador posición y momento

Como dijimos, los estados de un sistema son vectores  $|\phi\rangle$  pertenecientes a  $\mathcal{H}$  (y que son normalizables, o sea,  $\mathcal{H}$  contiene vectores que representan estados físicos y otros que corresponden a estados no-físicos). La proyección de un estado sobre la base  $B_x$  nos da la función de onda de dicho estado:

$$\phi(x) = \langle x|\phi\rangle, \quad \text{y} \quad |\phi\rangle = \int dx \phi(x) |x\rangle. \quad (17)$$

Análogamente, lo mismo ocurre con el estado en la representación de momentos

$$\tilde{\phi}(p) = \langle p|\phi\rangle, \quad \text{y} \quad |\phi\rangle = \int dp \tilde{\phi}(p) |p\rangle \quad (18)$$

O sea,  $\phi(x)$  y  $\tilde{\phi}(p)$  son simplemente las coordenadas del mismo estado en dos bases diferentes. La forma de cambiar de base es obvia (y muy simple usando la notación de Dirac con las bases continuas):

$$\tilde{\phi}(p) = \langle p|\phi\rangle = \int dx \langle p|x\rangle\langle x|\phi\rangle = \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(-ipx/\hbar) \phi(x) \quad (19)$$

Es fácil ver cómo actúan los operadores posición y momento. Por ejemplo, dado el estado  $|\phi\rangle$ , cuya función de onda es  $\phi(x) = \langle x|\phi\rangle$ , podemos encontrar la función de onda del estado  $|\phi'\rangle = \hat{X}|\phi\rangle$  de la siguiente manera

$$\phi'(x) = \langle x|\hat{X}|\phi\rangle = x\langle x|\phi\rangle = x\phi(x), \quad (20)$$

donde en la expresión anterior usamos que  $\hat{X}|x\rangle = x|x\rangle$ . Para encontrar el efecto del operador momento, debemos calcular la función de onda del estado  $|\phi''\rangle = \hat{P}|\phi\rangle$ . Esta se calcula de la siguiente forma

$$\begin{aligned} \phi''(x) &= \langle x|\phi''\rangle = \langle x|\hat{P}|\phi\rangle = \int dp \langle x|p\rangle\langle p|\hat{P}|\phi\rangle \\ &= \int dp p \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(ipx/\hbar) \langle p|\phi\rangle = \frac{\hbar}{i} \partial_x \int dp \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(ipx/\hbar) \langle p|\phi\rangle \\ &= \frac{\hbar}{i} \partial_x \int dp \langle x|p\rangle\langle p|\phi\rangle = \frac{\hbar}{i} \partial_x \phi(x) \end{aligned}$$

Este es un resultado conocido: el operador momento actúa como  $\hbar/i$  veces el operador gradiente. Una expresión análoga (con un signo de diferencia) se obtiene para la acción del operador posición en la base de momentos:  $\langle p|\hat{X}|\phi\rangle = (-\hbar/i) \partial_p \langle p|\phi\rangle$ .

Por último, analizaremos las relaciones de conmutación entre los operadores posición y momento. Calcularemos los elementos de matriz del conmutador entre dos estados físicos (que tienen funciones de onda de cuadrado integrable).

$$\begin{aligned} \langle \phi|[\hat{X}, \hat{P}]|\psi\rangle &= \int dx (\langle \phi|x\rangle x \langle x|\hat{P}|\psi\rangle - \langle \phi|\hat{P}|x\rangle x \langle x|\psi\rangle) \\ &= \frac{\hbar}{i} \int dx (\langle \phi|x\rangle x \partial_x (\langle x|\psi\rangle) + \partial_x (\langle \phi|x\rangle) x \langle x|\psi\rangle) \\ &= \frac{\hbar}{i} \int dx (\partial_x (\langle \phi|x\rangle x \langle x|\psi\rangle) - \langle \phi|x\rangle \langle x|\psi\rangle) \\ &= -\frac{\hbar}{i} \int dx \langle \phi|x\rangle \langle x|\psi\rangle \\ &= i\hbar \langle \phi|\psi\rangle \end{aligned}$$

donde en el ante último paso usamos el hecho de que el término de superficie se anula pues las funciones en cuestión son de cuadrado integrable y decaen a cero en el infinito suficientemente rápido. Evidentemente, el cálculo anterior nos muestra que  $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$ .

## IV. CLASE 5: POSTULADOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

Tal como describimos mas arriba la mecánica cuántica puede formularse axiomáticamente y eso es lo que haremos en esta clase. Como veremos, esta formulación axiomática es abstracta. Como veremos, algunas de las propiedades que dieron lugar al surgimiento de la mecánica cuántica (la complementariedad, las relaciones de incertidumbre de Heisenberg, etc) no forman parte de esos axiomas. Por el contrario, se deducen como consecuencia de ellos. Por eso, primero formularemos los axiomas (o postulados) y luego los comentaremos y ,en algunos casos los generalizaremos.

### A. Los Postulados Cinemáticos: 1-5

1. **Postulado 1:** "El estado de todo sistema físico está representado por un vector (de norma unidad) en un espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$ " (un espacio vectorial complejo, con un producto interno hermitiano y que satisface el axioma de completitud). La dimensión de dicho espacio es igual al número de resultados distintos que se obtienen en un análisis exhaustivo (completo) del sistema. En realidad, como veremos luego, un vector en un espacio de Hilbert representa un estado "de máxima información" (un estado "puro"). Generalizaremos esta noción mas adelante.
2. **Postulado 2:** "Todas las propiedades observables de un sistema físico se representan por un operador lineal hermítico que actúa sobre  $\mathcal{H}$ " (o sea, pertenece al espacio de operadores lineales sobre el espacio de Hilbert, al que denominamos  $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ ). Como vimos, todo operador hermítico  $\hat{A}$  tiene una base completa de autovectores. Denotamos a los autovalores de  $\hat{A}$  como  $a_n$ , con  $n = 1, \dots, K$ . Cada autovalor tiene asociado un subespacio (el subespacio generado por los autovectores que tienen ese autovalor). Denotaremos como  $P_n$  al proyector asociado a ese subespacio. La descomposición espectral de  $\hat{A}$  es  $\hat{A} = \sum_{n=1}^K a_n P_n$ . Si  $\hat{A}$  es no degenerado, los proyectores  $P_n$  son de rango 1 y se escriben como  $P_n = |\phi_n\rangle\langle\phi_n|$ . En ese caso  $K$  es la dimensión del espacio de estados y los vectores  $|\phi_n\rangle$  forman una base ortonormal de  $\mathcal{H}$ . En cambio, si el  $\hat{A}$  es degenerado y  $g_n$  es la degeneración del autovalor  $a_n$ , entonces podemos escribir los proyectores  $P_n$  como  $P_n = \sum_{l=1}^{g_n} |\phi_{nl}\rangle\langle\phi_{nl}|$  (donde todos los vectores  $|\phi_{nl}\rangle$  satisfacen  $\hat{A}|\phi_{nl}\rangle = a_n|\phi_{nl}\rangle$  para todo  $l = 1, \dots, g_n$ ).
3. **Postulado 3:** "Los resultados posibles de la medición de cualquier observable  $\hat{A}$  son sus autovalores  $a_n$ ". Este postulado lleva implícita una noción sobre lo que quiere decir "medir". Si bien esta noción es la intuitiva, vale la pena discutirla mas

extensamente (cosa que haremos mas adelante). Es suficiente decir aquí que este postulado es compatible con la idea descrita en las clases anteriores: Medir quiere decir filtrar un haz incidente (descrito por un estado cualquiera) dando lugar a un conjunto de haces, cada uno de los cuales corresponde a un autovalor distinto  $a_n$ .

4. **Postulado 4:** (Regla de Born) "Si el estado de un sistema es  $|\psi\rangle$ , la probabilidad de obtener el resultado  $a_n$  en la medición del observable  $\hat{A}$  es siempre  $\text{Prob}(a_n|\psi) = \langle\psi|P_n|\psi\rangle$ , donde  $P_n$  es el proyector asociado al autovalor  $a_n$ . Si  $\hat{A}$  es no degenerado entonces  $P_n = |\phi_n\rangle\langle\phi_n|$  y la probabilidad resulta ser  $\text{Prob}(a_n|\psi) = |\langle\phi_n|\psi\rangle|^2$ . En el caso degenerado  $P_n$  tiene rango  $g_n$  y puede expresarse como la suma de los proyectores asociados a cualquier base en el subespacio de los estados con autovalor  $a_n$ .

Antes de pasar al último postulado cinemático conviene introducir las siguientes definiciones: Diremos que el valor medio del operador  $\hat{A}$  en el estado  $|\psi\rangle$  es  $\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$  (esto también suele denominarse "valor de expectación de  $\hat{A}$  en el estado  $|\psi\rangle$ "). El motivo del nombre es evidente si recordamos que la descomposición espectral de  $\hat{A}$  es  $\hat{A} = \sum_n a_n P_n$ . Teniendo en cuenta el postulado 4, es evidente que

$$\langle\hat{A}\rangle = \sum_n a_n \text{Prob}(a_n|\psi).$$

Por lo tanto, la magnitud  $\langle\hat{A}\rangle$  no es otra cosa que el promedio estadístico de los resultados que se obtiene al medir  $\hat{A}$  muchas veces. (de ahí, el nombre "valor medio"). También podemos definir la dispersión de un operador  $\hat{A}$  en el estado  $|\psi\rangle$  como

$$\Delta^2 \hat{A} = \langle\hat{A}^2\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2. \quad (21)$$

Usando las definiciones anteriores es evidente que  $\Delta A$  es la dispersión estadística de los resultados de la medición ya que  $\Delta^2 \hat{A} = \sum_n a_n^2 \text{Prob}(a_n|\psi) - \langle\hat{A}\rangle^2$ .

Con las definiciones anteriores, el postulado 4 puede formularse diciendo que la probabilidad de obtener el resultado  $a_n$  es el valor medio del proyector correspondiente.

5. **Postulado de proyección o colapso** "Si el estado de un sistema es  $|\psi\rangle$  y medimos el observable  $\hat{A}$  y detectamos el autovalor  $a_n$ , entonces el estado del sistema después es la proyección de  $|\psi\rangle$  sobre el subespacio asociado al autovalor  $a_n$ ". Este postulado en realidad no es cinemático ya que habla sobre la evolución de un sistema cuando se realiza una medición. Es la consecuencia natural de concebir al proceso de medición como un proceso de filtrado, tal como se describió en el caso del espín.

Teniendo en cuenta que en la primera clase dijimos que "el estado es información" entonces este postulado no trae aparejado problemas conceptuales serios: al registrar el resultado  $a_n$  adquirimos información y por lo tanto tenemos que actualizar la descripción del sistema cambiando el estado. El sistema, indudablemente, cambia en el proceso de medición ya que interactúa con otro (el aparato), pero el cambio en el estado del sistema, en la visión que estamos presentando, es simplemente el cambio en la información de la que disponemos sobre el sistema. En resumen, el estado  $|\psi'\rangle$  luego de la detección de  $a_n$  es  $|\psi'\rangle = P_n|\psi\rangle/\langle\psi|P_n|\psi\rangle^{1/2}$ . Para el caso no degenerado, el factor de normalización es  $\langle\psi|P_n|\psi\rangle^{1/2} = |\langle\phi_n|\psi\rangle|$ , y por lo tanto el estado luego de la medición es  $|\psi'\rangle = |\phi_n\rangle$ .

## B. Comentarios y generalizaciones

En lo que sigue, haremos una serie de comentarios y generalizaciones de los postulados que describimos mas arriba.

1. **Estados puros: información máxima.** De los postulados se infiere el motivo por el cual los estados puros (aquellos que se describen por un vector en  $\mathcal{H}$ ) son de máxima información. En efecto, si el estado es  $|\phi\rangle$  entonces siempre existe un experimento cuyo resultado puede predecirse con certeza. En efecto, esto sucede para cualquier experimento que consista en la medición de un observable cuya base de autoestados contiene a  $|\phi\rangle$ . En ese caso la mecánica cuántica predice certezas. En cualquier otro, predice probabilidades no triviales.
2. **Los estados puros son proyectores** Es evidente que todas las predicciones que hace la mecánica cuántica son las mismas si el estado es descrito por el vector  $|\psi\rangle$  o por cualquier otro vector  $|\psi'\rangle$  que sea de la forma  $|\psi'\rangle = \exp(i\xi)|\psi\rangle$ . Es decir, dos vectores que difieren en una fase describen el mismo estado. Por lo tanto, el primer postulado, tal como lo formulamos mas arriba, es en realidad incompleto (o incorrecto). Un estado físico no se describe por un único vector sino por una familia de vectores. Todos esos vectores se relacionan entre si por vía de la multiplicación por un número complejo de módulo unidad. Esto define un rayo en el espacio de Hilbert. La descripción matemáticamente correcta del estado de máxima información sobre un sistema no es mediante un vector  $|\psi\rangle$  sino mediante el proyector  $\rho_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ . El Postulado 1 debería decir "El estado de máxima información de un sistema físico se representa mediante un proyector de rango 1 (y traza unidad) sobre un espacio de Hilbert". Evidentemente el proyector sobre el estado  $|\psi\rangle$  es idéntico al proyector sobre el

estado  $|\psi'\rangle$  asique de esta forma desaparece la ambigüedad en la elección de la fase. En términos de este proyector, podemos reescribir la regla de Born para calcular las probabilidades asociadas a los distintos resultados de una medición de la siguiente manera:  $\text{Prob}(a_n|\psi) = \langle\psi|P_{a_n}|\psi\rangle = \text{Tr}(\rho_\psi P_n)$ . En general, el valor medio de cualquier operador  $\hat{A}$  se calcula entonces como  $\langle\hat{A}\rangle = \text{Tr}(\rho_\psi \hat{A})$ .

3. **Estados mixtos, matriz densidad.** En la mayoría de las situaciones de interés físico no somos capaces de preparar estados puros (que se representan por vectores, o por proyectores de rango 1). Por ejemplo, en el experimento de Stern Gerlach preparamos el estado  $|0_n\rangle$  tomando las partículas que salen por la rama superior de un aparato de  $SG_n$ . Sin embargo, nunca es posible mantener la alineación del imán en una dirección inalterada. Inevitablemente, debido a que nuestra capacidad de control es finita, el eje del imán tendrá fluctuaciones pequeñas alrededor de  $\vec{e}_n$ . Por simplicidad, supongamos que el imán puede estar orientado en  $k$  direcciones  $\vec{e}_i$ , con  $i = 1, \dots, k$  y que a cada una de ellas se le puede asignar una probabilidad  $p_i$ . En una situación como esta, no obtenemos siempre el mismo estado sino que, con probabilidad  $p_i$  preparamos el estado  $|0_i\rangle$ . Esto es lo que se denomina un estado "mixto" que no es otra cosa que un "ensemble" (conjunto) de estados puros, cada uno con una probabilidad diferente. En general, un ensemble es un conjunto de estados con una probabilidad asociada a cada uno de ellos:  $\mathcal{E} = \{|\xi_i\rangle, p_i, i = 1, \dots, k\}$ . Es evidente que, a diferencia de lo que sucede con un estado puro, en este caso no existe ningún experimento en el cual podamos predecir resultados con certeza. Por eso, este estado no es un estado de máxima información.

Cómo se describe matemáticamente un estado como este? Veremos que este ensemble se describe con el operador  $\rho = \sum_{i=1}^k p_i |\xi_i\rangle\langle\xi_i|$ , al que se denomina "operador densidad". Para demostrar esto, basta con probar que a partir de  $\rho$  podemos calcular cualquier probabilidad. Veamos: Si el estado fuera  $|\xi_i\rangle$ , la probabilidad de obtener el resultado  $a_n$  al medir  $\hat{A}$  es  $\text{Prob}(a_n|\xi_i) = \langle\xi_i|P_n|\xi_i\rangle$ . Pero si preparamos  $|\xi_i\rangle$  con probabilidad  $p_i$ , la probabilidad total de obtener  $a_n$  es

$$\begin{aligned} \text{Prob}(a_n|\mathcal{E}) &= \sum_i p_i \text{Prob}(a_n|\xi_i) \\ &= \sum_i p_i \text{Tr}(|\xi_i\rangle\langle\xi_i| P_n) \\ &= \text{Tr}\left(\sum_i p_i |\xi_i\rangle\langle\xi_i| P_n\right) \\ &= \text{Tr}(\rho P_n). \end{aligned}$$

Por lo tanto, el operador  $\rho$  representa al estado del sistema. Cabe notar que en general los estados

$|\xi_i\rangle$  no son ortogonales entre si (esto sucede, por ejemplo, en el caso de las fluctuaciones en el eje del iman del aparato de  $SG$ ).

El operador densidad tiene propiedades importantes: a)  $\rho$  es hermítico ( $\rho^\dagger = \rho$ ), b)  $\text{Tr}(\rho) = 1$ , c)  $\rho$  es semidefinido positivo (o sea, para todo estado  $|\phi\rangle$  se cumple que  $\langle\phi|\rho|\phi\rangle \geq 0$ ). Para incluir a los estados mixtos, el Postulado 1 debe formularse de la siguiente manera: "El estado general de un sistema físico está representado por un operador  $\rho$  (que es hermítico, de traza unidad y semi definido positivo) que actúa sobre un espacio de Hilbert". Los estados puros son aquellos para los cuales  $\rho$  tiene rango unidad.

Como  $\rho$  es hermítico es diagonalizable. Sea  $B = \{|\theta_\mu\rangle, \mu = 1, \dots, D\}$  la base de autovectores de  $\rho$ . En esta base  $\rho$  tiene una descomposición espectral de la forma:  $\rho = \sum_\mu q_\mu |\theta_\mu\rangle\langle\theta_\mu|$ , donde los autovalores  $q_\mu$  son números reales y positivos (ya que  $\rho$  tiene que ser positivo) cuya suma es igual a 1 (o sea, son probabilidades). Esta expresión pone en evidencia una propiedad fundamental de los estados mixtos: existen infinitas maneras de preparar un estado mixto, o sea, un dado operador  $\rho$  puede corresponder a muchas mezclas de estados puros con distintas probabilidades.

Es posible cuantificar la "pureza" de un estado? (o, inversamente, es posible cuantificar cuán mixto es un estado dado?). Evidentemente la respuesta es afirmativa. Para un estado puro, el estado es un proyector de rango 1: satisface las propiedades  $\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = \rho^2$  y  $\text{Tr} \rho = \text{Tr} \rho^2 = 1$ . En cambio, cuando un estado es mixto, si bien  $\text{Tr} \rho = 1$  ya no es cierto que  $\text{Tr} \rho^2 = 1$ . En efecto, escribiendo  $\rho$  en la base en la cual el estado es diagonal podemos escribir  $\rho^2$  como  $\rho^2 = \sum_\mu q_\mu^2 |\theta_\mu\rangle\langle\theta_\mu|$ . Teniendo en cuenta que  $q_\mu^2 \leq q_\mu$  (y que la igualdad solamente se verifica cuando estas probabilidades son iguales a cero o a uno), resulta que  $\xi = \text{Tr} \rho^2 = \sum_\mu q_\mu^2 < 1$  (una desigualdad estricta cuando hay más de un  $q_\mu$  que es no nulo). El grado de impureza es medido por  $\xi$ . En particular, el estado de máxima ignorancia es aquel en el cual  $q_\mu = 1/D$  donde  $D = \dim(\mathcal{H})$ . En ese caso tenemos  $\xi = 1/D$ . En consecuencia, la pureza  $\xi$  toma valores entre 1 (estados puros) y  $1/D$  (estados máximamente mixtos). Es posible medir el grado de pureza con otras medidas que surgen de caracterizar la distribución de probabilidades  $q_\mu$  (la entropía de la distribución, por ejemplo) pero usaremos aquí por el momento, la pureza  $\xi = \text{Tr} \rho^2$  con ese propósito.

#### 4. CCOC

Un concepto muy importante es el de Conjunto Completo de Observables que Conmutan (CCOC). Su definición es sencilla: Se trata de un conjunto de operadores que conmutan todos entre si (y que,

por lo tanto, pueden ser diagonalizados simultáneamente) que cumplen con la condición de "completitud". El conjunto de observables que conmutan  $\{A, B, C, D, \dots\}$  es completo si y sólo si cada secuencia de autovalores  $(a_i, b_j, c_k, d_l, \dots)$  identifica a un único vector de la base ortonormal que diagonaliza a todos los operadores (o sea, que existe un único vector que es autovector de  $\hat{A}$  con autovalor  $a_i$ , de  $\hat{B}$  con autovalor  $b_j$ , etc, etc. En consecuencia, la base que diagonaliza simultáneamente a todos estos operadores puede denotarse como  $B = \{|a_i, b_j, c_k, d_l, \dots\rangle\}$ . Obviamente, un operador no degenerado define, por si mismo, un CCOC.

#### 5. Mediciones alternadas de dos operadores

Es evidente que dos observables compatibles pueden ser medidos simultáneamente o, mejor dicho, que el orden en el que se miden no altera los resultados que se obtienen. O sea: Supongamos que primero mido  $\hat{A}$ , registro el resultado y seguidamente mido  $\hat{B}$  sobre el estado en el que quedó preparado el sistema, registrando también el resultado de la medición. Si los observables son compatibles una nueva medición de  $\hat{A}$  dará el mismo resultado que en la primera medición y si a esta le sigue otra medición de  $\hat{B}$  obtendremos el mismo resultado, etc, etc. Si  $\hat{A}$  y  $\hat{B}$  no conmutan la medición alternada de ellos no dará siempre el mismo resultado. Dado un observable cualquiera siempre existen infinitos que son incompatibles con él.

Todos estas propiedades son simples consecuencias del hecho de que en la mecánica cuántica los estados se representan como vectores y los observables como operadores sobre un espacio de Hilbert. O sea, son consecuencia de los postulados de la mecánica cuántica. Pero es interesante recordar que estas extrañas propiedades tuvieron un rol primordial en el desarrollo histórico de la mecánica cuántica (aunque, como dijimos, ahora son solamente meras consecuencias de postulados más abstractos y generales). Veamos aquí el concepto de complementariedad, acuñado originalmente por Niels Bohr.

#### 6. Operadores complementarios

Quien conozca la obra teatral "Copenhague", escrita por Michael Frayn, recordará las intensas discusiones entre Niels Bohr y Werner Heisenberg, que en Buenos Aires fueron interpretados magistralmente por Juan Carlos Gene y Alberto Segado. Bohr y Heisenberg discutían sobre la complementariedad y la incertidumbre. Estos son dos de los ingredientes básicos de la mecánica cuántica, que ponen de manifiesto cuán extraño es el comportamiento de la naturaleza a escala microscópica. El *principio de complementariedad* es un verdadero atentado contra nuestra intuición. En su versión más general afirma lo siguiente: **Si preparamos**

un objeto de manera tal que la propiedad  $A$  toma un valor preciso, entonces siempre existe otra propiedad  $B$  cuyo valor está completamente indeterminado. En ese caso, afirmamos que las propiedades  $A$  y  $B$  son “complementarias”.

El principio se aplica a situaciones muy habituales en las que sometemos a un objeto a algún proceso de preparación tal que si posteriormente medimos repetidamente la propiedad  $A$  siempre obtenemos el mismo valor. Lo sorprendente es que el principio de complementariedad afirma que “**entonces, siempre existe otra propiedad  $B$  cuyo valor esta completamente indeterminado**”. Que quiere decir esto? Simplemente significa que si preparamos el sistema en un estado en el que la propiedad  $A$  tiene un valor preciso y medimos la propiedad  $B$  entonces obtendremos resultados completamente aleatorios. Si repetimos muchas veces este procedimiento (es decir, preparamos el sistema con un valor de  $A$  y medimos la propiedad  $B$ ) obtendremos resultados diferentes, distribuidos de manera totalmente azarosa.

La demostración del principio de complementariedad es muy sencilla. Consideremos el observable  $\hat{A}$  que es diagonal en la base  $B_A = \{|\phi_i\rangle, i = 1, \dots, D\}$ . Teniendo en cuenta los postulados enunciados mas arriba sabemos que si medimos  $\hat{A}$  obtendremos uno de sus autovalores  $a_i$  como resultado y el estado del sistema quedará preparado en el correspondiente autoestado  $|\phi_i\rangle$ . Es fácil ver que siempre podemos construir un operador  $\hat{B}$  que es tal que si luego de medir  $\hat{A}$  medimos  $\hat{B}$ , la probabilidad de todos los resultados  $b_j$  será uniforme (aleatoriedad completa). Para esto, alcanza con decir cual es la base en la que  $\hat{B}$  debe ser diagonal. Esta base puede elegirse como  $B_B = \{|\tilde{\phi}_j\rangle, j = 1, \dots, D\}$  donde los vectores  $|\tilde{\phi}_j\rangle$  se definen como  $|\tilde{\phi}_j\rangle = \frac{1}{\sqrt{D}} \sum_k \exp(-2\pi i jk/D) |\phi_k\rangle$ . Es evidente que estos vectores son ortonormales ( $\langle \tilde{\phi}_j | \tilde{\phi}_l \rangle = \delta_{jl}$ ) y también es trivial invertir la expresión anterior expresando los vectores de la base  $B_A$  en función de los de la base  $B_B$  (la forma de definir el cambio de base es mediante el uso de la transformada discreta de Fourier). De estas expresiones surge que la probabilidad de medir cualquier autovalor de  $\hat{B}$  en cualquier estado de  $B_A$  es la misma y es igual a  $1/D$  (o sea, todos los estados son equiprobables). Las bases  $B_A$  y  $B_B$  son “mutuamente no sezgadas”. Por cierto, es posible demostrar que en cualquier espacio vectorial de dimensión  $D$  existen a lo sumo  $D + 1$  bases que son mutuamente no sezgadas entre si (y que ese número siempre se puede alcanzar si  $D$  es un número primo o una potencia de un número primo).

En el caso de un sistema de spin 1/2, los observables

$\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  y  $\sigma_z$  son complementarios (y, como vimos, sus bases son no sezgadas).

## 7. Relaciones de indeterminación. Desigualdad de Heisenberg

El principio de indeterminación (o, mal llamado, principio de incertidumbre) de Heisenberg es otra de las piedras fundacionales de la mecánica cuántica. Tuvo una importancia histórica enorme. Podría tomarse como la versión cuantitativa del principio de complementariedad de Bohr. En efecto, es posible demostrar que para cualquier par de observables no compatibles hay una cota inferior al producto de la varianza en la medición de ambos observables. Por ese motivo cuando el estado es tal que la varianza (la dispersión de los resultados en la medición) de uno de los observables disminuye entonces la varianza del otro aumenta. Pese a ser una pieza clave de la mecánica cuántica hoy ha sido “relegada” a ser una consecuencia bastante trivial de los postulados que hemos visto. En particular, en su derivación, que veremos ahora, son fundamentales las propiedades del producto interno en el espacio de Hilbert y reglas elementales del álgebra de operadores.

Partimos de la desigualdad de Schwartz establece que

$$|\langle \phi | \psi \rangle|^2 \leq \langle \phi | \phi \rangle \langle \psi | \psi \rangle$$

Aplicaremos esta desigualdad para dos estados particulares, obtenidos a partir de dos operadores hermíticos  $\hat{A}$  y  $\hat{B}$ . En efecto, tomamos  $|\phi\rangle = (\hat{A} - \alpha)|\xi\rangle$  y  $|\psi\rangle = (\hat{B} - \beta)|\xi\rangle$  (donde  $\alpha$  y  $\beta$  son dos números reales cualesquiera, que después elegiremos a nuestra conveniencia, y  $|\xi\rangle$  es un vector cualquiera de norma unidad). Entonces, la desigualdad de Schwartz implica que

$$\begin{aligned} |\langle \xi | (\hat{B} - \beta) (\hat{A} - \alpha) |\xi \rangle|^2 \\ \leq \langle \xi | (\hat{B} - \beta)^2 |\xi \rangle \langle \xi | (\hat{A} - \alpha)^2 |\xi \rangle. \end{aligned}$$

Si elegimos  $\alpha = \langle \hat{A} \rangle$  y  $\beta = \langle \hat{B} \rangle$  entonces la expresión anterior se reduce a

$$|\langle \xi | (\hat{B}\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle) |\xi \rangle|^2 \leq \Delta^2 \hat{A} \Delta^2 \hat{B} \quad (22)$$

En la expresión anterior podemos reescribir el lado izquierdo de la desigualdad usando la identidad  $BA = \frac{1}{2}\{B, A\} + \frac{1}{2}[B, A]$ . Asimismo, el módulo al cuadrado que aparece en el lado izquierdo puede calcularse explícitamente usando dos propiedades importantes: a) el valor medio del conmutador de dos operadores hermíticos es siempre un número imaginario puro; b) el valor medio del anticonmutador es siempre real. De este modo, la desigualdad resulta ser

$$\Delta^2 \hat{A} \Delta^2 \hat{B} \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2 + K^2(A, B), \quad (23)$$

donde la función de correlación  $K(A, B)$  está definida como  $K(A, B) = \frac{1}{2}\langle\{A, B\}\rangle - \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle$ . Como ambos términos de la desigualdad anterior son positivos, es evidente que de lo anterior se pueden deducir las siguientes desigualdades

$$\Delta\hat{A} \Delta\hat{B} \geq \frac{1}{2}|\langle[A, B]\rangle|,$$

$$\Delta\hat{A} \Delta\hat{B} \geq |K(A, B)|.$$

La primera de estas dos desigualdades es la famosa desigualdad de Heisenberg: si la aplicamos para el caso del operador posición y momento (que serán definidos rigurosamente mas adelante) que satisfacen  $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar\mathbb{1}$  la desigualdad se transforma en  $\Delta\hat{X}\Delta\hat{P} \geq \hbar/2$  (en este caso el lado derecho de la desigualdad es independiente del estado). Cabe aclarar que la segunda desigualdad no es relevante ya que siempre es posible encontrar estados para los cuales la función de correlación se anula (por ejemplo, para cualquier autoestado de  $\hat{A}$  o  $\hat{B}$  vale que  $K(A, B) = 0$ ).

Como el producto de las dos dispersiones debe ser mayor que una cierta cantidad entonces debe cumplirse que cuanto mas pequeña sea  $\Delta\hat{A}$ , mas grande debe ser el valor de  $\Delta\hat{B}$  (y viceversa). Para el caso de posición y momento, la pequeñez del valor de  $\hbar$  (un número con treinta y cuatro ceros detras del punto decimal) explica el motivo por el cual las consecuencias de los principios de complementariedad e incertidumbre no son perceptibles en la escala macroscópica. Por ejemplo, si preparamos una partícula de 1 gramo en un estado donde la posición está determinada con una incerteza de  $\Delta R = 1\text{cm}$ , entonces el principio de indeterminación establece que nunca podremos determinar la velocidad con una incerteza menor que  $10^{-28}\text{m/seg}$ . Claramente ningún instrumento de medición es capaz de detectar una desviación tan pequeña.

No es posible dejar de sorprenderse por las implicancias de los principios de complementariedad y el de incertidumbre, que fueron establecidos respectivamente por Niels Bohr y Werner Heisenberg alrededor de 1925. Ponen en evidencia cuan extraña es la mecánica cuántica y es imposible aceptarlos sin antes intentar demolerlos: Einstein, y cualquier persona en su sano juicio, preguntaría: Cómo es posible que podamos preparar un objeto de modo tal que si medimos la propiedad  $A$  siempre obtenemos el mismo valor pero que sea imposible lograr que el valor de la propiedad complementaria  $B$  tenga también un valor definido? Esta pregunta NO tiene respuesta dentro de la mecánica cuántica. Dicha teoría acepta este hecho sorprendente como una propiedad de la naturaleza y a partir de eso formula un modelo que tiene una notable capacidad predictiva. Con todo dramatismo, la mecánica

cuántica se hiergue hoy, a mas de cien años de su nacimiento, como la única teoría compatible con los resultados experimentales modernos.

Es importante acotar que en todos los libros de texto de mecánica cuántica, el principio de indeterminación se ilustra con una gran cantidad de ejemplos que muestran que cuando uno quiere medir la posición de una partícula con una precisión alta (con una incerteza pequeña  $\Delta X$ ) entonces inevitablemente introduce una PERTURBACION que afecta el valor del momento  $P$ . Por ejemplo, si queremos localizar a la partícula en un intervalo de longitud  $\Delta X$  podemos intentar iluminarla con luz de longitud de onda menor que ese tamaño. En ese caso, cada fotón tendrá un momento  $P_f = \hbar 2\pi/\lambda > \hbar 2\pi/\Delta X$ . Al interactuar con la partícula el fotón transferirá su momento a ella y por lo tanto introducirá una incerteza en el momento del orden de  $\Delta P = P_f$ . Esto lleva a que  $\Delta X \Delta P \geq \hbar/2$ . Sin embargo, a esta altura del desarrollo de la mecánica cuántica este tipo de discusiones puede inducir a equívocos. Esas discusiones sólo sirven para motivar la mecánica cuántica mostrando que no podemos imaginar mecanismos físicos que introduzcan perturbaciones despreciables en todas las propiedades de un sistema. Sin embargo, la interpretación de las relaciones de Heisenberg no tiene NADA que ver con la perturbación del valor de un observable al medirse otro complementario con el anterior. La mecánica cuántica, como dijimos varias veces, es mucho mas radical. Nos dice que "los experimentos que no se realizan, no tienen resultados". O sea, la medición de un observable no puede perturbar el valor que toma otro ya que ese valor no existe, no pre-existe a la medición. Como vimos y veremos, si imaginamos que esos valores existen (y que de alguna manera desconocida determinan el resultado de la medición de estos observables, aún aceptando que no puedan medirse simultaneamente por algún motivo desconocido) llegamos a paradojas y contradicciones con las predicciones de la mecánica cuántica.

## 8. Estado y observables para una partícula de spin 1/2.

Si bien el caso de una partícula de spin 1/2 ha sido el ejemplo motivador de los postulados de la mecánica cuántica. Es útil e importante resumir aquí todo lo que podemos predecir sobre este sistema. Como vimos, hay infinitas bases que se corresponden a autoestados del observable  $S_n = \vec{e}_n \vec{S}$ . A estas bases las denotamos  $B_n = \{|0_n\rangle, |1_n\rangle\}$ . Cualquier estado puede escribirse como combinación lineal de los elementos de alguna de estas bases. Por simplicidad, tomaremos la base  $B_z$  y escribimos un estado como

$$|\psi\rangle = \alpha|0_z\rangle + \beta|1_z\rangle$$

donde  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$  es la condición de normalización del estado. Evidentemente el proyector sobre este estado es

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = |\alpha|^2|0_z\rangle\langle 0_z| + |\beta|^2|1_z\rangle\langle 1_z| + \alpha\beta^*|0_z\rangle\langle 1_z| + \alpha^*\beta|1_z\rangle\langle 0_z|. \quad (24)$$

Es muy útil escribir este proyector de otra manera mucho mas simple. Las matrices de Pauli  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  y  $\sigma_z$  fueron definidas mas arriba. Junto con la identidad  $\mathbb{1}$  estas cuatro matrices forman una base completa del espacio de los operadores que actúan sobre el espacio de estados (en efecto, el espacio de los operadores  $\mathcal{L}(\mathcal{H})$  tiene la estructura de un espacio de Hilbert con un producto interno tal que  $(A, B) = \text{Tr}(A^\dagger B)$ ). Por lo tanto, cualquier operador  $\hat{A}$  puede escribirse como combinación lineal de estos cuatro operadores:

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \frac{1}{2}(a_0\mathbb{1} + a_x\sigma_x + a_y\sigma_y + a_z\sigma_z) \\ &= \frac{1}{2}(a_0\mathbb{1} + \vec{a} \cdot \vec{\sigma}), \end{aligned} \quad (25)$$

(donde el factor  $1/2$  es una mera convención que se introduce por conveniencia). Teniendo en cuenta que todos los operadores  $\sigma_j$  son tales que  $\text{Tr}\sigma_j = 0$  y que dichos operadores cumplen las relaciones  $\{\sigma_j, \sigma_k\} = 2\delta_{jk}$  y  $[\sigma_j, \sigma_k] = 2i\epsilon_{jkl}\sigma_l$ , podemos deducir fácilmente que

$$a_0 = \text{Tr}(A), \quad a_j = \text{Tr}(\hat{A}\sigma_j). \quad (26)$$

Esto vale para cualquier operador  $\hat{A}$  y por lo tanto vale para el proyector  $\rho$  que define al estado del sistema. En ese caso la expresión es mas sencilla ya que, por ejemplo,  $\text{Tr}\rho = 1$ . Entonces,

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \vec{p} \cdot \vec{\sigma}) \quad (27)$$

donde el vector  $\vec{p}$ , llamado vector de polarización, tiene componentes iguales a los valores medios de las respectivas matrices de Pauli. Es decir:  $p_j = \text{Tr}(\rho\sigma_j) = \langle\sigma_j\rangle$ . Es fácil demostrar que el producto escalar entre dos estados  $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$  y  $\rho' = |\psi'\rangle\langle\psi'|$  es

$$|\langle\psi|\psi'\rangle|^2 = \text{Tr}(\rho\rho') = \frac{1}{2}(1 + \vec{p} \cdot \vec{p}') \quad (28)$$

En particular, para cualquier estado puro, que está representado por un proyector de rango 1, vale que  $\text{Tr}(\rho^2) = 1$  y por lo tanto los estados puros están representados por expresiones de la forma  $\rho = (\mathbb{1} + \vec{p} \cdot \vec{\sigma})/2$  con  $\vec{p}^2 = 1$ . O sea, todos los estados puros pueden caracterizarse por un vector  $\vec{p}$  de longitud unidad, que está ubicado sobre la esfera unidad. En efecto, el espacio de estados de una partícula de spin  $1/2$  puede representarse por una esfera de radio 1. Como el producto escalar entre estados es  $\text{Tr}(\rho\rho') = (1 + \vec{p} \cdot \vec{p}')/2$ , los estados ortogonales son

los que cumplen con la propiedad  $\vec{p}' = -\vec{p}$ , o sea que están en los puntos antipódicos de la esfera de Bloch.

Por otra parte, es fácil ver que un estado de la forma  $\rho = (\mathbb{1} + \vec{p} \cdot \vec{\sigma})/2$  con  $\vec{p}^2 = 1$  es autoestado del operador  $\vec{p} \cdot \vec{\sigma}$  con autovalor 1. Esto surge trivialmente del hecho de que para todo par de vectores  $\vec{a}$  y  $\vec{b}$  vale la identidad

$$(\vec{a} \cdot \vec{\sigma})(\vec{b} \cdot \vec{\sigma}) = \vec{a} \cdot \vec{b}\mathbb{1} + i(\vec{a} \wedge \vec{b}) \cdot \vec{\sigma} \quad (29)$$

de donde surge que  $(\vec{a} \cdot \vec{\sigma})^2 = \mathbb{1}$  para todo vector de norma 1. Por lo tanto vale que

$$(\vec{p} \cdot \vec{\sigma})\frac{1}{2}(\mathbb{1} + \vec{p} \cdot \vec{\sigma}) = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \vec{p} \cdot \vec{\sigma}). \quad (30)$$

Por último, de todo lo anterior se deduce que si preparamos el autoestado de  $S_n$  y medimos  $S_{n'}$ , la probabilidad de obtener el resultado  $\hbar/2$  es  $\text{Prob}(S_{n'} = \hbar/2 | S_n = \hbar/2) = (1 + \vec{e}_n \cdot \vec{e}_{n'})/2 = (1 + \cos(\theta_{n,n'}))/2 = \cos^2(\theta_{n,n'}/2)$ , donde  $\theta_{n,n'}$  es el ángulo que se forma entre los ejes  $\vec{e}_n$  y  $\vec{e}_{n'}$ . Esta fórmula había sido mencionada en la introducción pero su validez no había sido demostrada explícitamente hasta ahora.

## 9. Indeterminación o Ignorancia.

A lo largo del siglo XX los físicos hicieron numerosos intentos por encontrar alternativas a la mecánica cuántica y desarrollar teorías que sean mas aceptables para nuestro sentido común. La clase de modelos que naturalmente podrían competir con la mecánica cuántica incluye a aquellos en los que la complementariedad no es una propiedad fundamental sino que es fruto de nuestras limitaciones. Por ejemplo, podríamos imaginar que la naturaleza es tal que cada vez que fijamos el valor de alguna propiedad  $A$  perturbamos el objeto de manera tal que afectamos el valor de  $B$ . En un mundo como ese, la razón por la cual una medición de  $B$  da lugar a resultados aleatorios es nuestra incapacidad de controlar todas las propiedades de los objetos o, equivalentemente, nuestra ignorancia sobre detalles del mundo microscópico que todavía son inaccesibles a nuestras limitadas posibilidades experimentales. Einstein, y cualquier persona razonable, hubiera estado dispuesto a aceptar un mundo de estas características. En ese caso, la mecánica cuántica no proveería una descripción completa de la naturaleza sino solamente daría una descripción parcial. En la próxima Sección presentaremos un famoso argumento formulado por Einstein en 1935 que intentaba demostrar precisamente esto: que la descripción del mundo provista por la mecánica cuántica es incompleta. Mas adelante veremos como, sorprendentemente, los notables avances de la física de fines del siglo XX fueron capaces de demostrar la falsedad del argumento de

Einstein. Es notable, pero la física ha sido capaz de demostrar que el azar no se origina en nuestra ignorancia. Sin embargo, hasta ahora debe reconocer su ignorancia sobre las causas que originan el azar!

10. **El origen de la regla de Born. Teorema de Gleason y envariancia**

## V. CLASE 6: SISTEMAS COMPUESTOS.

La mecánica cuántica de los sistemas compuestos da lugar a muchas sorpresas. En lo que sigue haremos un resumen de ellas. Es notable que todas estas propiedades no requieren ningún nuevo postulado sino que todas ellas se deducen de los postulados anteriores.

### A. El espacio de estados. Producto tensorial.

Consideremos un sistema formado por dos partes, a las que llamaremos  $\mathcal{A}$  y  $\mathcal{B}$ . Cada una de ellas tiene su espacio de estados  $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$  y  $\mathcal{H}_{\mathcal{B}}$ . Cual es el espacio de estados del conjunto  $\mathcal{A} - \mathcal{B}$ ? La respuesta es sencilla. En primero lugar, podemos considerar a los sistemas como independientes y realizar observaciones por separado sobre cada uno de ellos. En ese caso, podemos hacer un examen exhaustivo de las propiedades de  $\mathcal{A}$  y de  $\mathcal{B}$ . El número máximo de resultados distintos que obtenemos cuando realizamos observaciones sobre  $\mathcal{A}$  es  $D_{\mathcal{A}} = \dim(\mathcal{H}_{\mathcal{A}})$  (y análogamente para  $\mathcal{B}$ ). En consecuencia, la dimensión del espacio de estados del conjunto  $\mathcal{A} - \mathcal{B}$  debe ser  $D_{\mathcal{A}} \times D_{\mathcal{B}}$ . En cada espacio vectorial podemos definir una base  $B_{\mathcal{A}}$  y  $B_{\mathcal{B}}$  cada una de las cuales está asociada a un CCOC sobre cada subsistema. Usaremos la notación  $B_{\mathcal{A}} = \{|\phi_j\rangle_{\mathcal{A}}, j = 1, \dots, D_{\mathcal{A}}\}$  y  $B_{\mathcal{B}} = \{|\xi_j\rangle_{\mathcal{B}}, j = 1, \dots, D_{\mathcal{B}}\}$ . Cuando los subsistemas son preparados en los estados  $|\phi_j\rangle_{\mathcal{A}}$  y  $|\xi_k\rangle_{\mathcal{B}}$  tienen valores bien definidos de las propiedades que corresponden al CCOC sobre cada subsistema (por ejemplo, si fueran dos partículas de spin  $1/2$  podríamos tomar la base  $B_{\mathcal{A}}$  como la de los autoestados de  $S_z$  y la base  $B_{\mathcal{B}}$  como lo se los autoestados de  $S_x$  para el segundo subsistema. Evidentemente, una observación exhaustiva sobre las partes implica una observación exhaustiva sobre el conjunto. Por eso, para cada par de vectores  $(|\phi_i\rangle_{\mathcal{A}}, |\xi_k\rangle_{\mathcal{B}})$  tiene que existir un vector en una base ortonormal y completa del espacio de estados del conjunto  $\mathcal{A} - \mathcal{B}$ . A este estado lo denotaremos  $|\phi_i\rangle_{\mathcal{A}} \otimes |\xi_k\rangle_{\mathcal{B}}$  o simplemente  $|\phi_i, \xi_k\rangle_{\mathcal{A}, \mathcal{B}}$ . Esto quiere decir que la estructura matemática del espacio conjunto  $\mathcal{H}_{\mathcal{A}, \mathcal{B}}$  es tal que para todo par de bases de  $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$  y  $\mathcal{H}_{\mathcal{B}}$  existe una base ortonormal en  $\mathcal{H}_{\mathcal{A}, \mathcal{B}}$ . En ese caso se dice que el espacio  $\mathcal{H}_{\mathcal{A}, \mathcal{B}}$  es el producto tensorial de  $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$  y  $\mathcal{H}_{\mathcal{B}}$  y se denota  $\mathcal{H}_{\mathcal{A}, \mathcal{B}} = \mathcal{H}_{\mathcal{A}} \otimes \mathcal{H}_{\mathcal{B}}$  (podríamos decir, un poco mas formalmente, que siempre existe una aplicación de  $\mathcal{H}_{\mathcal{A}} \times \mathcal{H}_{\mathcal{B}}$  en  $\mathcal{H}_{\mathcal{A}, \mathcal{B}}$  tal que mapea todo par de bases  $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$  y  $\mathcal{H}_{\mathcal{B}}$  en una base del espacio de estados del sistema completo).

Como dijimos, tomando una base en el espacio de estados de cada subsistema construimos una base en el espacio de estados del conjunto. Los estados de esa base se denominan "estados producto". La base producto  $B_{\mathcal{A}, \mathcal{B}}$  obtenida a partir de  $B_{\mathcal{A}}$  y  $B_{\mathcal{B}}$  se denotará  $B_{\mathcal{A}} \otimes B_{\mathcal{B}}$  y está formada por los vectores  $B_{\mathcal{A}} \otimes B_{\mathcal{B}} = \{|\phi_i\rangle_{\mathcal{A}} \otimes |\xi_k\rangle_{\mathcal{B}}; j = 1, \dots, D_{\mathcal{A}}, k = 1, \dots, D_{\mathcal{B}}\}$ . En algunas ocasiones, cuando no se induzca confusión usaremos una notación menos recargada omitiendo el símbolo  $\otimes$ .

Como esta es una base del espacio del sistema completo, el estado mas general del mismo será una combinación lineal de los elementos de esta base. Es fácil ver que, entonces, el estado mas general no es un estado producto. En efecto, el espacio  $\mathcal{H}_{\mathcal{A}, \mathcal{B}}$  tiene estados producto y otros que no lo son. A estos últimos (los que no son producto) se los denomina estados entrelazados.

La existencia de estados entrelazados se puede probar de muchas formas. La mas sencilla es exhibirlos en un ejemplo: Consideremos dos partículas de spin  $1/2$  y tomemos las bases  $B_{\mathcal{A}}$  y  $B_{\mathcal{B}}$  como los autoestados de  $S_z$  para cada spin, a los que denotaremos  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$ . Consideremos el siguiente estado del conjunto:  $|\psi\rangle_{\mathcal{A}, \mathcal{B}} = (|0\rangle \otimes |0\rangle + |1\rangle \otimes |1\rangle)/\sqrt{2}$  (en todos los casos el primer término del producto tensorial corresponde a un estado del sistema  $\mathcal{A}$  y el segundo a uno de  $\mathcal{B}$ ). Para ver que este estado no es un producto, podemos escribir el estado producto mas general como

$$\begin{aligned} |\psi\rangle_{\mathcal{A}, \mathcal{B}} &= (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) \otimes (\alpha'|0\rangle + \beta'|1\rangle) \\ &= \alpha\alpha'|0\rangle \otimes |0\rangle + \alpha\beta'|0\rangle \otimes |1\rangle \\ &\quad + \beta\alpha'|1\rangle \otimes |0\rangle + \beta\beta'|1\rangle \otimes |1\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |0\rangle + |1\rangle \otimes |1\rangle). \end{aligned}$$

Para que esta última igualdad sea válida debe cumplirse que  $\alpha\beta' = 0$  y  $\alpha'\beta = 0$ . Esto claramente no es posible (ya que  $\alpha\beta' = 0$  implica que  $\alpha = 0$  o que  $\beta' = 0$  y en ambos casos el estado resultante no puede ser nunca el deseado). En conclusión, el estado considerado no es un producto.

### B. Estados entrelazados. Descomposición de Schmidt

Cual es la forma mas general de un estado entrelazado? En principio, todo estado entrelazado puede escribirse como la combinación lineal de la base producto. En el caso general, siempre podemos escribir

$$|\phi\rangle_{\mathcal{A}, \mathcal{B}} = \sum_j^{D_{\mathcal{A}}} \sum_k^{D_{\mathcal{B}}} c_{jk} |\phi_j\rangle_{\mathcal{A}} \otimes |\xi_k\rangle_{\mathcal{B}}. \quad (31)$$

Entonces, para escribir al estado mas general pareciera que siempre necesitamos  $D_{\mathcal{A}} \times D_{\mathcal{B}}$  términos. Pero esto no es cierto, ya que siempre podemos elegir una base en cada espacio de modo tal que el estado en cuestión siempre se escriba como una suma de a lo sumo  $\min(D_{\mathcal{A}}, D_{\mathcal{B}})$ . Para demostrar esto podemos usar la SVD (descomposición en valores singulares) de la matriz cuyos coeficientes son  $c_{jk}$ . Esta es una matriz de dimensión  $D_{\mathcal{A}} \times D_{\mathcal{B}}$  que siempre puede escribirse como  $C = U \times \Lambda \times V$  donde  $U$  y  $V$  son matrices unitarias cuya dimensión es  $D_{\mathcal{A}} \times D_{\mathcal{A}}$  y  $D_{\mathcal{B}} \times D_{\mathcal{B}}$  respectivamente. Por su parte,  $\Lambda$  es una matriz de  $D_{\mathcal{A}} \times D_{\mathcal{B}}$  que tiene un bloque diagonal con  $\min(D_{\mathcal{A}}, D_{\mathcal{B}})$  elementos reales y mayores o iguales que cero (todos sus otros elementos son nulos). Teniendo en cuenta esto, podemos escribir  $c_{j,k} = \sum_m U_{jm} \Lambda_m V_{mk}$ .

Reemplazando esto en la expresión anterior para el estado mas general obtenemos

$$\begin{aligned} |\psi\rangle_{\mathcal{A},\mathcal{B}} &= \sum_m \Lambda_m \left( \sum_j U_{j,n} |\phi_j\rangle \right) \otimes \left( \sum_k V_{nk} |\xi_k\rangle \right) \\ &= \sum_m \Lambda_m |\tilde{\phi}_m\rangle \otimes |\tilde{\xi}_m\rangle \end{aligned}$$

En esta última expresión los vectores  $|\tilde{\phi}_m\rangle$ , que pertenecen al espacio  $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$  son ortonormales (ya que son una combinación lineal unitaria de los elementos de una base ortonormal). Lo mismo sucede con los vectores  $|\tilde{\xi}_m\rangle$ . En consecuencia, hemos demostrado que el estado mas general del espacio producto se puede escribir siempre como una combinación lineal de estados productos que tiene a lo sumo  $\min(D_{\mathcal{A}}, D_{\mathcal{B}})$  elementos. Esta descomposición de cualquier estado se denomina "descomposición de Schmidt", y las bases correspondientes se llaman "bases de Schmidt" (que, obviamente, dependen del estado  $|\psi\rangle_{\mathcal{A},\mathcal{B}}$ ). Por último, es claro que la condición de normalización del estado  $|\psi\rangle_{\mathcal{A},\mathcal{B}}$  implica que  $\sum_m \Lambda_m^2 = 1$ .

El número de términos que aparecen en la descomposición de Schmidt es una propiedad del estado. Lo denominaremos "S=número de Schmidt". En el caso de un estado producto, tenemos que  $S = 1$  y, como vimos, siempre se cumple que  $S \leq \min(D_{\mathcal{A}}, D_{\mathcal{B}})$ .

Varias consecuencias se derivan simplemente de la descomposición de Schmidt. En particular, vemos que no hay ninguna pérdida de generalidad al considerar un estado entrelazado con  $D$  elementos cuando  $D_{\mathcal{A}} = D_{\mathcal{B}} = D$ .

### C. Operadores sobre un espacio producto

Los operadores lineales sobre el espacio  $\mathcal{H}_{\mathcal{A},\mathcal{B}}$  reflejan la estructura de este espacio (que es el producto tensorial de  $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$  y  $\mathcal{H}_{\mathcal{B}}$ ). Dados dos operadores lineales  $\hat{M}_{\mathcal{A}}$  y  $\hat{N}_{\mathcal{B}}$ , que actúan sobre los espacios de cada una de las dos partes de un sistema compuesto, podemos definir un operador que actúa sobre el sistema total. Para hacer esto, sólo tenemos que decir cómo actúa ese operador sobre una base de  $\mathcal{H}_{\mathcal{A},\mathcal{B}}$  y podemos hacerlo de manera trivial. Definiremos el operador  $M_{\mathcal{A}} \otimes N_{\mathcal{B}}$  como aquel que cumple

$$(M_{\mathcal{A}} \otimes N_{\mathcal{B}})|\phi\rangle \otimes |\xi\rangle = M_{\mathcal{A}}|\phi\rangle \otimes N_{\mathcal{B}}|\xi\rangle.$$

Estos operadores son "operadores producto", transforman estados producto en estados productos. En cambio, el operador lineal mas general no es de esta forma sino que siempre puede escribirse como suma de operadores productos. Es decir, en general cualquier operador lineal sobre  $\mathcal{H}_{\mathcal{A},\mathcal{B}}$  puede escribirse como  $O_{\mathcal{A},\mathcal{B}} = \sum_m^{D_{\mathcal{A}}} \sum_n^{D_{\mathcal{B}}} a_{m,n} A_m \otimes B_n$ . En esta expresión, los operadores  $A_m$  y  $B_n$  son una base ortonormal del espacio de operadores sobre el espacio de cada una de las partes (y, por lo tanto, tienen  $D_{\mathcal{A}}^2$  y  $D_{\mathcal{B}}^2$  elementos). Para los operadores podemos derivar un resultado idéntico al de la

descomposición de Schmidt, que obtuvimos para los estados. En efecto, podemos probar que el operador lineal mas general sobre  $\mathcal{H}_{\mathcal{A},\mathcal{B}}$  siempre puede escribirse como

$$O_{\mathcal{A},\mathcal{B}} = \sum_k^{\min(D_{\mathcal{A}}^2, D_{\mathcal{B}}^2)} \alpha_k \tilde{A}_k \otimes \tilde{B}_k. \quad (32)$$

Los operadores sobre el espacio de estados del sistema compuesto tienen las mismas propiedades que las mencionadas mas arriba (son simplemente operadores sobre un espacio de Hilbert).

Vimos que dados un operador sobre  $\mathcal{A}$  y otro sobre  $\mathcal{B}$  podemos definir un operador sobre el conjunto  $\mathcal{A} - \mathcal{B}$  (el operador producto). Asimismo, vimos que el operador mas general no es un producto. Ahora veremos una forma simple de obtener un operador sobre cada parte dado un operador sobre el conjunto. Esto puede hacerse mediante una operación que se denomina "traza parcial". Como dijimos, esta operación mapea un operador sobre  $\mathcal{H}_{\mathcal{A},\mathcal{B}}$  en otro que actúa sobre  $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$  (o, análogamente, sobre  $\mathcal{H}_{\mathcal{B}}$ ). Para definir la traza parcial, consideremos un operador  $O_{\mathcal{A},\mathcal{B}} = \sum_k \alpha_k \tilde{A}_k \otimes \tilde{B}_k$ . Las trazas parciales de este operador sobre  $\mathcal{A}$  o sobre  $\mathcal{B}$  se definen de la siguiente manera es

$$\begin{aligned} O_{\mathcal{A}} &= \text{Tr}_{\mathcal{B}}(O_{\mathcal{A},\mathcal{B}}) = \sum_k \alpha_k \text{Tr}_{\mathcal{B}}(\tilde{B}_k) \tilde{A}_k \\ O_{\mathcal{B}} &= \text{Tr}_{\mathcal{A}}(O_{\mathcal{A},\mathcal{B}}) = \sum_k \alpha_k \text{Tr}_{\mathcal{A}}(\tilde{A}_k) \tilde{B}_k \end{aligned}$$

Como vemos, estos operadores actúan sobre los espacios de cada una de las partes. Cabe notar que  $O_{\mathcal{A},\mathcal{B}} \neq O_{\mathcal{A}} \otimes O_{\mathcal{B}}$ .

### D. El estado del todo y el estado de cada una de las partes

Consideremos un estado puro del conjunto  $\mathcal{A} - \mathcal{B}$ . Este es un estado de máxima información, lo que significa que siempre existe un experimento cuyo resultado puede ser predicho con certeza (dicho experimento consiste en medir cualquier observable que sea diagonal en una base que contenga al estado en cuestión como uno de sus elementos). Para un estado producto, también tenemos máxima información sobre cada una de las partes. Sin embargo, si el estado del conjunto es entrelazado (o sea, si no es un producto), las predicciones sobre resultados de experimentos "locales" (que afecten a cada una de las partes por separado) son mucho mas limitadas. Como veremos, los estados entrelazados se caracterizan por tener máxima información sobre el todo pero por tener información no-máxima sobre cada parte. En efecto, veremos que hay estados entrelazados (los que tienen entrelazamiento máximo) que corresponden a estados de máxima ignorancia sobre cada una de las partes.

Para estudiar esto primero conviene analizar si es posible definir un estado para cada una de las partes, como que conocemos el estado del conjunto. Supongamos

que el estado del conjunto tiene una descomposición de Schmidt tal que

$$|\psi\rangle_{\mathcal{A},\mathcal{B}} = \sum_m \Lambda_m |\tilde{\phi}_m\rangle \otimes |\tilde{\xi}_m\rangle.$$

Obviamente, este estado tiene un proyector asociado que llamaremos

$$\rho_{\mathcal{A},\mathcal{B}} = |\psi_{\mathcal{A},\mathcal{B}}\rangle\langle\psi_{\mathcal{A},\mathcal{B}}|$$

Usando la forma explícita del estado (en su descomposición de Schmidt) podemos reescribir esto como

$$\rho_{\mathcal{A},\mathcal{B}} = \sum_{k,k'} \Lambda_k \Lambda_{k'} |\tilde{\phi}_k\rangle\langle\tilde{\phi}_{k'}| \otimes |\tilde{\xi}_k\rangle\langle\tilde{\xi}_{k'}|. \quad (33)$$

A partir de esta expresión podemos calcular las trazas parciales de este operador sobre cada uno de los subsistemas (veremos que estos operadores nos permitirán definir el estado de cada una de las partes). En efecto, usando lo anterior podemos escribir

$$\begin{aligned} \rho_{\mathcal{A}} &= \text{Tr}_{\mathcal{B}} \rho_{\mathcal{A},\mathcal{B}} \\ &= \sum_k \Lambda_k^2 |\tilde{\phi}_k\rangle\langle\tilde{\phi}_k|, \\ \rho_{\mathcal{B}} &= \text{Tr}_{\mathcal{A}} \rho_{\mathcal{A},\mathcal{B}} \\ &= \sum_k \Lambda_k^2 |\tilde{\xi}_k\rangle\langle\tilde{\xi}_k|, \end{aligned} \quad (34)$$

Veremos ahora que  $\rho_{\mathcal{A}}$  y  $\rho_{\mathcal{B}}$  son los operadores que describen a los estados de cada una de las partes. Para demostrar esto basta con probar que estos dos operadores nos permiten predecir las probabilidades de los resultados de cualquier experimento realizado sobre cada subsistema. Veamos esto: las probabilidades de los resultados de experimentos realizados sobre  $\mathcal{A}$  se obtienen calculando el valor medio de un proyector de la forma  $P_{\mathcal{A}} \otimes \mathbb{1}_{\mathcal{B}}$  en el estado  $|\psi\rangle_{\mathcal{A},\mathcal{B}}$  (análogamente, lo mismo puede hacerse con el subsistema  $\mathcal{B}$ ). Usando la forma explícita del estado obtenemos

$$\begin{aligned} \langle\psi_{\mathcal{A},\mathcal{B}}|(P_{\mathcal{A}} \otimes \mathbb{1}_{\mathcal{B}})|\psi_{\mathcal{A},\mathcal{B}}\rangle &= \sum_{kk'} \Lambda_k \Lambda_{k'} \langle\tilde{\phi}_k|P_{\mathcal{A}}|\tilde{\phi}_k\rangle\langle\tilde{\xi}_k|\mathbb{1}_{\mathcal{B}}|\tilde{\xi}_k\rangle \\ &= \sum_k \Lambda_k^2 \langle\tilde{\phi}_k|P_{\mathcal{A}}|\tilde{\phi}_k\rangle \\ &= \text{Tr}_{\mathcal{A}}(\rho_{\mathcal{A}} P_{\mathcal{A}}) \end{aligned} \quad (35)$$

Por lo tanto, el estado de la parte  $\mathcal{A}$  es  $\rho_{\mathcal{A}}$  ya que a partir de ese operador podemos calcular cualquier probabilidad

## E. Medidas de entrelazamiento

Como vemos, a menos que el estado completo sea un producto (o sea, que su número de Schmidt sea  $S = 1$ ) el estado de cada parte es mixto (en efecto, si  $S > 1$  tenemos  $\text{Tr}\rho_{\mathcal{A}}^2 < 1$ ). En particular, para un estado en el cual todos los coeficientes en la representación de

Schmidt tienen el mismo peso tenemos que  $\Lambda_k^2 = 1/S$ . En ese caso el estado de cada parte es proporcionalidad a la identidad en un subespacio de dimensión  $S$  ya que  $\rho_{\mathcal{A}} = \sum_k |\tilde{\phi}_k\rangle\langle\tilde{\phi}_k|/S$ . Es decir, un estado como este, en el cual todos los coeficientes de la descomposición de Schmidt son idénticos, es un estado de máxima información sobre el conjunto  $\mathcal{A} - \mathcal{B}$  pero de máxima ignorancia sobre cada una de las partes  $\mathcal{A}$  y  $\mathcal{B}$ .

Notemos que esta propiedad de los sistemas compuestos es extremadamente rara: Hay estados tales que, si los preparamos, podemos asegurar que existe un experimento realizado sobre el conjunto  $\mathcal{A} - \mathcal{B}$  cuyo resultado puede ser predicho con certeza. Sin embargo, los resultados de todos los experimentos realizados sobre cada una de las partes dan siempre resultados equi probables!! Veremos que esta propiedad crucial de la mecánica cuántica tiene consecuencias notables. En palabras de Schroedinger: el entrelazamiento no es una propiedad mas de la mecánica cuántica sino que es aquella que nos obliga a abandonar cualquier descripción de la naturaleza compatible con nuestra intuición clásica.

Es posible definir diferentes medidas del entrelazamiento de un sistema. Aquí usaremos la mas sencilla de todas. Como vimos, lo que distingue a los estados entrelazados de los estados productos es el poder predictivo que tenemos para mediciones locales sobre las partes. Para estados producto, tenemos máxima información sobre las partes mientras que para estados entrelazados tenemos información no-máxima. Diremos que el entrelazamiento puede ser cuantificado mediante alguna medida de la ignorancia que tenemos para mediciones locales. Para esto pueden utilizarse diversos cuantificadores (entropías, por ejemplo). El mas sencillo de todos está determinado por la pureza de cada estado  $\rho_{\mathcal{A}}$  y  $\rho_{\mathcal{B}}$ . En efecto, una medida del entrelazamiento es  $\eta_{\mathcal{A},\mathcal{B}} = 1 - \text{Tr}\rho_{\mathcal{A}}^2 = 1 - \text{Tr}\rho_{\mathcal{B}}^2$ . Cabe notar que la descomposición de Schmidt implica que las purezas de los estados de cada una de las partes son iguales (o sea  $\text{Tr}\rho_{\mathcal{A}} = \text{Tr}\rho_{\mathcal{B}}$ , lo que se demuestra trivialmente a partir de la observación de que ambos operadores tienen los mismos autovalores). Como vemos,  $\eta_{\mathcal{A},\mathcal{B}} = 0$  cuando el estado es un producto y es menor que la unidad para estados entrelazados. En particular, para los estados con número de Schmidt máximo y con todos los pesos de los estados de Schmidt idénticos, se cumple que  $\eta_{\mathcal{A},\mathcal{B}} = 1 - 1/D$ .

Esta medida del entrelazamiento es, por cierto, un tanto arbitraria. Una verdadera medida debería estar motivada por alguna razón física. Es decir, la cantidad de entrelazamiento tendría que cuantificar, de alguna forma, una magnitud que pueda relacionarse con otras magnitudes de la física. En las últimas décadas se han identificado algunas tareas (como la teleportación, por ejemplo, que veremos mas adelante) que sólo pueden ser realizadas en presencia de entrelazamiento entre dos subsistemas. En la actualidad, el entrelazamiento se concibe como un recurso físico que puede generarse, manipularse y utilizarse para realizar alguna tarea (vinculada a la transmisión de información, por ejemplo). Entonces,

las medidas mas naturales del entrelazamiento se definen en función de esta visión operacional. En los casos que analizaremos en el curso, la diferencia entre las distintas medidas del entrelazamiento no tendrá un rol importante.

### F. Ejemplo: Dos spines. Base de Bell.

El estudio de un sistema formado por de dos partículas de spin  $1/2$  no solamente es ilustrativo sobre los aspectos centrales del entrelazamiento sino que también es muy importante y tiene numerosas aplicaciones que veremos mas adelante.

Como dijimos mas arriba, para que haya entrelazamiento el número de Schmidt en este caso debe ser  $S = 2$  (con  $S = 1$  el estado es un producto). Mas arriba vimos un ejemplo de un estado entrelazado. Definiremos ahora una base completa formada por cuatro estados entrelazados, a la que denominaremos "Base de Bell" (por John Bell). Esta base está formada por  $B_{Bell} = \{|\Phi_+\rangle, |\Phi_-\rangle, |\Psi_+\rangle, |\Psi_-\rangle\}$ , donde los estados están definidos como

$$|\Phi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle \pm |11\rangle), \quad |\Psi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle \pm |10\rangle). \quad (36)$$

La ortonormalidad de estos estados puede ser demostrada de manera directa y por lo tanto los cuatro forman una base del espacio de estados del conjunto formado por los dos spines. Por otra parte, es interesante notar que los estados de Bell son autoestados comunes de un CCOC formado por los siguientes operadores

$$M_1 = \sigma_x \otimes \sigma_x, \quad M_2 = \sigma_z \otimes \sigma_z \quad (37)$$

Asimismo, los estados de Bell son autoestados de  $M_3 = \sigma_y \otimes \sigma_y$ , lo que suge de lo anterior ya que  $M_3 = -M_1 \times M_2$ . Es interesante notar que estos dos operadores,  $M_1$  y  $M_2$ , conmutan entre si pese a estar contruidos como producto de factores que no conmutan sobre cada subsistema. Dado que los operadores conmutan entonces pueden ser medidos simultaneamente, lo que quiere decir que es posible diseñar un aparato de medición que mida  $M_1$  junto con  $M_2$ . Debemos notar que para eso es necesario lograr medir directamente el producto que da lugar a  $M_1$  sin medir cada uno de sus factores ya que si lo hiciéramos entonces no podríamos medir también  $M_2$ . Es decir, tanto  $M_1$  como  $M_2$  forman parte de otros CCOC distintos al formado por ambos dos.  $M_1$  es parte del CCOC formado por  $C_x = \{\sigma_x \otimes \mathbb{1}, \mathbb{1} \otimes \sigma_x\}$  y  $M_2$  forma parte del CCOC formado por  $C_z = \{\sigma_z \otimes \mathbb{1}, \mathbb{1} \otimes \sigma_z\}$ . Pero para medir  $M_1$  junto con  $M_2$  no podemos usar los aparatos de medición correspondientes al CCOC  $C_x$  ni al CCOC  $C_z$  sino que debemos diseñar otro aparato de medición. El diseño de este aparato (o de sendos aparatos que solamente midan  $M_1$  o  $M_2$  sin medir los factores que los conforman), será discutido mas adelante.

Teniendo en cuenta lo anterior, es fácil ver que los es-

tados de Bell cumplen las siguientes relaciones

$$\begin{aligned} M_1|\Phi_+\rangle &= (+1)|\Phi_+\rangle, & M_2|\Phi_+\rangle &= (+1)|\Phi_+\rangle \\ M_1|\Phi_-\rangle &= (-1)|\Phi_-\rangle, & M_2|\Phi_-\rangle &= (+1)|\Phi_-\rangle \\ M_1|\Psi_-\rangle &= (-1)|\Psi_-\rangle, & M_2|\Psi_-\rangle &= (-1)|\Psi_-\rangle \\ M_1|\Psi_+\rangle &= (+1)|\Psi_+\rangle, & M_2|\Psi_+\rangle &= (-1)|\Psi_+\rangle \end{aligned}$$

En efecto, esto dice que el autovalor de  $M_1$  es  $+1$  para los estados de tipo "+" ( $|\Phi_+\rangle$  y  $|\Psi_+\rangle$ ), mientras que es  $-1$  para los estados de tipo "-"; Por su parte el autovalor de  $M_2$  es  $+1$  para los estados de tipo  $|\Phi\rangle$  mientras que es  $-1$  para los estados de tipo  $|\Psi\rangle$ . Los estados de Bell pueden denotarse, entonces, como  $|\beta_{m_1, m_2}\rangle$  donde  $m_1, m_2 = \pm 1$  son los autovalores de  $M_1$  y  $M_2$ . O sea,  $|\beta_{+1, +1}\rangle = |\Phi_+\rangle$ ,  $|\beta_{-1, +1}\rangle = |\Psi_+\rangle$ ,  $|\beta_{+1, -1}\rangle = |\Phi_-\rangle$ ,  $|\beta_{-1, -1}\rangle = |\Psi_-\rangle$ .

Teniendo en cuenta lo anterior, podemos afirmar que si preparamos cualquiera de los cuatro estados de Bell y medimos  $M_1$  o  $M_2$  obtendremos una única respuesta con probabilidad 1. En cambio, es fácil demostrar (de hecho, es un caso particular de la demostración discutida mas arriba en la cual se analizo el caso en que los estados en los que todos los coeficientes de la descomposición de Schmidt tienen el mismo módulo) que para cualquiera de los estados de Bell se cumple que

$$\rho_A = \frac{1}{2}\mathbb{1}_A, \quad \rho_B = \frac{1}{2}\mathbb{1}_B. \quad (38)$$

Esto implica que no es posible realizar ninguna predicción con resultados no triviales si medimos alguna propiedad del subsistema  $\mathcal{A}$  o del subsistema  $\mathcal{B}$ . En el estado máximamente mixto de un spin, la medición de cualquier componente del spin tiene resultados  $\pm\hbar/2$  con probabilidad  $1/2$ .

Para demostrar esta y otras propiedades de los estados de Bell es útil aplicar las siguientes propiedades, cuya demostración se propone como ejercicio:

$$\sigma_j \otimes \mathbb{1}|\beta_{a,b}\rangle \perp |\beta_{a,b}\rangle, \quad \mathbb{1} \otimes \sigma_j|\beta_{a,b}\rangle \perp |\beta_{a,b}\rangle, \quad (39)$$

para todo  $j = x, y, z$ . Lo mismo sucede cuando aplicamos operadores que se obtienen como productos de operadores de Pauli. En efecto,

$$\sigma_j \otimes \sigma_k|\beta_{a,b}\rangle \perp |\beta_{a,b}\rangle \quad (40)$$

para  $j \neq k$ . Para  $j = k$ , en cambio, estos operadores se reducen a  $M_1$ ,  $M_2$  y  $M_3 = -M_1 \times M_2 = \sigma_y \otimes \sigma_y$ . Los autovalores de  $M_1$  y  $M_2$  en los estados de Bell ya fueron mencionados mas arriba mientras que es fácil demostrar que  $M_3|\beta_{a,b}\rangle = -a \times b |\beta_{a,b}\rangle$ .

La matriz densidad de los estados de Bell puede escribirse como combinación lineal de una base completa del espacio de los operadores sobre el espacio del sistema compuesto. En efecto, cualquier matriz densidad puede escribirse como

$$\rho_{A,B} = \frac{1}{4}(\mathbb{1} \otimes \mathbb{1} + \vec{p}_A \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{1} + \vec{p}_B \cdot \mathbb{1} \otimes \vec{\sigma} + K_{j,k} \sigma_j \otimes \sigma_k). \quad (41)$$

Teniendo en cuenta los resultados anteriores, es fácil ver que para los estados de Bell obtenemos

$$\rho_{m_1, m_2} = \frac{1}{4} (\mathbb{1} \otimes \mathbb{1} + m_1 \sigma_x \otimes \sigma_x - m_1 \times m_2 \sigma_y \otimes \sigma_y + m_2 \sigma_z \otimes \sigma_z).$$

Los estados entrelazados se caracterizan por tener correlaciones muy fuertes entre los resultados de los experimentos que se realizan sobre cada una de las partes  $\mathcal{A}$  y  $\mathcal{B}$ . Supongamos que medimos la componente  $\vec{a}$  del spin del subsistema  $\mathcal{A}$  y la componente  $\vec{b}$  del spin del subsistema  $\mathcal{B}$ . Calculemos la función de correlación del experimento en cuestión. Esta función está definida como el promedio de los productos de los resultados menos el producto de los promedios. Es evidente que si la función de correlación será nula si y sólo si la distribución conjunta de los resultados de las mediciones de  $\mathcal{A}$  y  $\mathcal{B}$  es un producto de las dos distribuciones marginales. La función de correlación en cualquiera de los estados de Bell es definida como

$$K_{m_1, m_2}(\vec{a}, \vec{b}) = \langle \beta_{m_1, m_2} | \vec{a} \cdot \vec{\sigma} \otimes \vec{b} \cdot \vec{\sigma} | \beta_{m_1, m_2} \rangle \quad (42)$$

donde ya utilizamos el hecho de que el valor medio de cualquier operador de Pauli en un estado de Bell se anula (con lo cual los promedios de las mediciones locales son nulos). La forma explícita del estado nos permite escribir que

$$K_{m_1, m_2}(\vec{a}, \vec{b}) = m_1 a_x b_x - m_1 m_2 a_y b_y + m_2 a_z b_z. \quad (43)$$

En particular, para el estado "singlete"  $|\beta_{-1, -1}\rangle = (|01\rangle - |10\rangle)/\sqrt{2}$  la función de correlación resulta particularmente simple:

$$K_{-1, -1}(\vec{a}, \vec{b}) = -\vec{a} \cdot \vec{b}. \quad (44)$$

Por último, y por completitud, vamos a calcular las probabilidades conjuntas para los resultados de los experimentos realizados en los laboratorios en los que se encuentran cada uno de los spines. Recordemos que en un laboratorio se mide  $\vec{a} \cdot \vec{\sigma}$  y en el otro se mide  $\vec{b} \cdot \vec{\sigma}$ . Los resultados de ambos experimentos son  $\epsilon_a = \pm 1$  y  $\epsilon_b = \pm 1$ . Como sabemos, las probabilidades se calculan como el valor medio de los correspondientes proyectores, que pueden escribirse como

$$P_{\epsilon_a, \epsilon_b} = \frac{1}{2} (I + \epsilon_a \vec{a} \cdot \vec{\sigma}) \otimes \frac{1}{2} (I + \epsilon_b \vec{b} \cdot \vec{\sigma}).$$

Al tomar el valor medio de este operador podemos usar los resultados que obtuvimos hasta ahora: i) cualquier operador de Pauli actuando sobre un estado de Bell lo transforma en otro estado de Bell ortogonal al anterior; ii) lo mismo sucede cuando aplicamos cualquier operador de la forma  $\sigma_j \otimes \sigma_k$  salvo cuando  $j = k$  (y en ese caso los valores medios son iguales a  $m_1$ ,  $-m_1 \times m_2$  y  $m_2$  cuando  $j = x, y, z$ ). Teniendo en cuenta esto, la probabilidad conjunta es

$$\begin{aligned} \text{Prob} \left( \vec{a} \cdot \vec{\sigma} = \epsilon_a; \vec{b} \cdot \vec{\sigma} = \epsilon_b \middle| |\beta_{m_1, m_2}\rangle \right) \\ = \langle \beta_{m_1, m_2} | P_{\epsilon_a, \epsilon_b} | \beta_{m_1, m_2} \rangle \\ = \frac{1}{4} (1 + \epsilon_a \epsilon_b (m_1 a_x b_x - m_1 m_2 a_y b_y + m_2 a_z b_z)) \end{aligned}$$

En el caso particular del estado singlete, tenemos que  $m_1 = m_2 = -1$  y entonces las probabilidades anteriores (en una notación más compacta) pueden escribirse como  $\text{Prob}^{(-, -)}(\epsilon_a; \epsilon_b) = \frac{1}{4} (1 - \epsilon_a \epsilon_b)$ . En cambio, para el estado  $|\Phi_+\rangle$  resulta que  $m_1 = +1$  y  $m_2 = +1$  y por lo tanto la probabilidad conjunta es  $\text{Prob}^{(+, +)}(\epsilon_a; \epsilon_b) = \frac{1}{4} (1 + \epsilon_a \epsilon_b (a_x b_x - a_y b_y + a_z b_z))$ . Como vemos, en todos los casos estas probabilidades conjuntas tienen las siguientes propiedades: a) Las probabilidades marginales son triviales (en efecto  $\text{Prob}^{(-, -)}(\epsilon_a) = \sum_{\epsilon_b} \text{Prob}^{(-, -)}(\epsilon_a; \epsilon_b) = \frac{1}{2}$ ), b) Las probabilidades conjuntas no pueden escribirse como un producto de las probabilidades marginales (lo cual es la manifestación obvia de que los resultados no son independientes ino que están correlacionados).

## G. Correlaciones clásicas

Es importante destacar que la existencia de correlaciones entre las partes de un sistema completo no es una propiedad que caracterice a la mecánica cuántica. Por cierto, las correlaciones entre eventos distantes (observaciones en laboratorios espacialmente separados, por ejemplo) también existen en sistemas clásicos. Lo que caracteriza a los sistemas cuánticos es la naturaleza de dichas correlaciones. Mas adelante veremos que las correlaciones predichas por la mecánica cuántica son cualitativamente y cuantitativamente diferentes de aquellas predichas por cualquier modelo físico compatible con nuestro sentido común.

Veremos aquí un ejemplo de un sistema clásico que en el que aparecen correlaciones fuertes y que es análogo al sistema de dos spines descrito por el estado singlete  $|\Psi_-\rangle$ . Consideramos un objeto macroscópico, una piedra por ejemplo, que se encuentra inicialmente en reposo con respecto a algún sistema de coordenadas. Inicialmente el momento angular del sistema es  $\vec{J}_S = 0$ . En un dado instante el objeto estalla y se divide en dos fragmentos, que llamaremos  $\mathcal{A}$  y  $\mathcal{B}$ . Debido a la conservación del momento angular, si uno de los dos fragmentos adquiere un momento angular  $\vec{J}$ , el otro necesariamente tendrá momento angular  $-\vec{J}$ . Sin pérdida de generalidad, supondremos que  $\vec{J}_A = \vec{J}$  y  $\vec{J}_B = -\vec{J}$ . Supongamos cada fragmento se dirige a un laboratorio distinto. En un laboratorio se mide el signo de la proyección del momento angular  $\vec{J}_A$  en la dirección del eje  $\vec{a}$  y en el otro, análogamente, se mide  $\text{sign}(\vec{J}_B \cdot \vec{b})$ . Estas son dos variables dicotómicas, que toman siempre valores que son iguales a  $\pm 1$ . En ese sentido, estas mediciones son análogas a las que se realizan con una partícula de spin 1/2 en la cual siempre se obtienen dos resultados. El experimento se repite muchas veces y en cada ocasión el mecanismo que da lugar a la explosión genera un momento angular diferente. Supondremos que ese mecanismo es isótropo y no elige ninguna dirección privilegiada. Es decir, en cada evento (cada explosión) el momento angular  $\vec{J}$  es una variable que es elegida al azar sobre una esfera unidad.

Es evidente que los resultados de las mediciones en los dos laboratorios no son, en general, independientes sino que están correlacionados. Por ejemplo, si en ambos laboratorios se mide el momento angular en la misma dirección (o sea,  $\vec{a} = \vec{b}$ ) entonces los resultados siempre están correlacionados ya que el momento angular total es nulo. Obviamente esto se cumple para cualquier elección del vector  $\vec{a}$ .

En este ejemplo es posible calcular la función de correlación. Para eso, consideramos que  $\theta$  es el ángulo entre los vectores  $\vec{a}$  y  $\vec{b}$  (o sea,  $\vec{a} \cdot \vec{b} = \cos \theta$ ). Cada uno de estos vectores divide la esfera unidad en dos hemisferios. Si el vector  $\vec{J}$  apunta hacia el hemisferio norte asociado al vector  $\vec{a}$  las mediciones en el laboratorio  $\mathcal{A}$  dará como resultado  $\text{sign}(\vec{J}_{\mathcal{A}} \cdot \vec{a}) = +1$  (y si apunta en la dirección del hemisferio sur el resultado será  $-1$ ). Por su parte, lo mismo ocurre con las mediciones en el laboratorio  $\mathcal{B}$ : Si  $\vec{J}$  apunta en la dirección del hemisferio norte asociado a  $\vec{b}$  tendremos  $\text{sign}(\vec{J}_{\mathcal{B}} \cdot \vec{b} = +1$ , etc). Entonces en ambos laboratorios se obtendrán valores  $+1$  cuando  $\vec{J}$  apunte hacia el norete de  $\vec{a}$  y hacia el sur de  $\vec{b}$ . Análogamente los resultados  $(+1, -1)$  corresponden a vectores  $\vec{J}$  que apunten en la dirección del norte de  $\vec{a}$  y  $\vec{b}$ . Entonces la función de correlación, que se obtiene como suma de los productos de los resultados de los experimentos en ambos laboratorios (es obvio que el valor medio de los experimentos locales se anula) puede calcularse como

$$K_{bomba}(\vec{a}, \vec{b}) = \frac{A_{NS} + A_{SN} - A_{NN} - A_{SS}}{A_T}$$

donde  $A_{NN}$  es el áreas de la región de la esfera unidad que se forma por la intersección de los dos hemisferios norte (y análogamente para  $A_{NS}$ ,  $A_{SS}$  y  $A_{SN}$ ) y  $A_T$  es el área total de la esfera unidad. Es fácil calcular las áreas de cada región. En efecto,

$$\begin{aligned} \frac{A_{NS}}{A_T} &= \frac{A_{SN}}{A_T} = \frac{\theta}{2\pi}, \\ \frac{A_{NN}}{A_T} &= \frac{A_{SS}}{A_T} = \frac{\pi - \theta}{2\pi}. \end{aligned}$$

Por lo tanto, la función de correlación es

$$K_{bomba}(\vec{a}, \vec{b}) = -\left(1 - \frac{2\theta}{\pi}\right)$$

Es interesante notar que si  $\theta = 0$  la función de correlación es siempre igual a  $-1$  lo que refleja que en ese caso las variables están perfectamente anti correlacionadas. En cambio, cuando  $\theta = \pi/2$  la función de correlación se anula (mientras que si  $\theta = \pi$  la función de correlación es  $+1$ ). Este resultado debe ser comparado con lo que obtuvimos para el estado singlete que, como vimos mas arriba, que resulta ser

$$K_{-1,-1}(\vec{a}, \vec{b}) = -\vec{a} \cdot \vec{b} = -\cos \theta$$

Ambas funciones de correlación coinciden en los puntos  $\theta = 0, \pi/2, \pi$  pero no coinciden en puntos intermedios.

Entonces, el desacuerdo entre las correlaciones clásicas y cuánticas se manifiesta en un nivel puramente cuantitativo. Veremos que ese desacuerdo trae aparejadas consecuencias realmente notables.

## H. Otro ejemplo: una partícula en tres dimensiones

Como dijimos antes, la existencia de estados entrelazados no es una sorpresa sino que es una novedad reciente sino que es algo que es bien conocido desde los orígenes de la mecánica cuántica. El hecho de que el espacio de estados de un sistema compuesto es el producto tensorial de los espacios de cada una de sus partes es algo fundamental y bien conocido. Por cierto, esta estructura matemática se utiliza no solamente para describir sistemas compuestos por objetos distintos sino que también se aplica a la descripción de espacio de estados de sistemas con mas de un grado de libertad. El ejemplo mas obvio es el de una partícula que se mueve en el espacio de 3 dimensiones. En efecto, el espacio de estados  $\mathcal{H}_{\vec{r}}$  es el producto tensorial de los espacios que describen a partículas en movimiento en las tres direcciones cartesianas. En efecto  $\mathcal{H}_{\vec{r}} = \mathcal{H}_x \otimes \mathcal{H}_y \otimes \mathcal{H}_z$ . En este espacio, la base de autoestados de la posición formada por los estados  $|\vec{r}\rangle$  es el producto tensorial de las tres bases formadas respectivamente por los estados  $|x\rangle$ ,  $|y\rangle$  y  $|z\rangle$ . Es decir  $|\vec{r}\rangle = |x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle = |x, y, z\rangle$ . Los estados entrelazados, en este caso, son aquellos estados  $|\Psi\rangle$  en los que la función de onda  $\Psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \Psi \rangle$  no puede escribirse como un producto de funciones de cada coordenada (es decir  $\Psi(\vec{r}) \neq f_1(x)f_2(y)f_3(z)$ ). Hay múltiples ejemplos de este tipo (por ejemplo aquellas funciones que se obtienen como autoestados de la energía de un átomo de hidrógeno).

## I. Contextualidad: un ejemplo con dos spines

Como dijimos, la mecánica cuántica resulta ser incompatible con la idea de que los resultados de los experimentos pre existen a la medición. En el caso de un sistema de dos partículas de spin  $1/2$  es posible poner esto de manifiesto de manera contundente. Ya hemos visto que no es posible suponer que cualquier componente del spin toma un valor  $\pm\hbar/2$  antes de la medición y a la vez mantener la hipótesis de consistencia funcional que establece que los valores de las propiedades cumplen con las mismas relaciones funcionales que estas. Pero, como dijimos, el argumento puede ser cuestionado desde varios puntos de vista. La primera hipótesis es demasiado fuerte ya que estamos suponiendo que es posible asignarles valores (pre existentes a la medición) a observables incompatibles, que no pueden ser medidos simultáneamente. Podemos relajar un poco esta hipótesis y jugar con otra mas débil: Supongamos que solamente podemos asignar valores a observables que forman un CCOC. En el caso de un spin, esta hipótesis no conduce a nada ya que hay

un único observable no trivial en cada CCOC. Pero para espacios de dimensión mas alta es posible derivar consecuencias interesantes de esta hipótesis, que nos permiten mostrar la incompatibilidad de la mecánica cuántica con un conjunto de teorías "muy razonables". Supongamos entonces que en un sistema físico los valores de los observables que forman un CCOC están definidos y que la medición de los mismos "revela" ese valor. Si el CCOC está formado por los observables  $\{\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots\}$ , podremos asignarles a estos observables valores bien definidos que llamaremos  $C = \{v(\hat{A}), v(\hat{B}), v(\hat{C}), \dots\}$ . Supondremos también que vale la hipótesis de consistencia funcional, que dice que si hay una relación funcional entre los operadores, esa misma relación debe cumplirse para los valores de los mismos. En otras palabras, si vale una relación del tipo  $F(\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots) = 0$  entonces debe valer también la relación  $F(v(\hat{A}), v(\hat{B}), v(\hat{C}), \dots) = 0$ .

Ahora bien, el observable  $\hat{A}$  puede formar parte de muchos CCOC. Por ejemplo, supongamos que el conjunto  $C' = \{\hat{A}, \hat{B}', \hat{C}', \dots\}$  es un CCOC. Esto quiere decir que el observable  $\hat{A}$  puede ser medido en distintos "contextos", los que están definidos por los otros observables compatibles con  $\hat{A}$  que decidimos medir junto con él. La hipótesis anterior nos permite asignar valores simultáneos a todos los observables del conjunto  $C'$ . Es decir, podemos decir que en el sistema están bien definidos  $v'(\hat{A}), v'(\hat{B}'), v'(\hat{C}'), \dots$ . Pero: qué relación hay entre  $v(\hat{A})$  y  $v'(\hat{A})$ . Ambos son los valores asignados al observable  $\hat{A}$  en distintos contextos. La hipótesis de "no contextualidad" es la que dice que ambos son idénticos, o sea, que el valor de un observable no depende del contexto y  $v(\hat{A}) = v'(\hat{A})$ . Esta es una hipótesis adicional, muy fuerte, que suena muy razonable. En efecto, para justificarla podríamos imaginar una secuencia de mediciones de los observables en la cual primero medimos el observable  $\hat{A}$  y luego decidimos que otros observables medir. Si es posible realizar una secuencia de este tipo (lo cual se ha hecho en varios experimentos en los que los observables se miden de uno a la vez con aparatos que no definen un contexto) entonces la hipótesis de no contextualidad es equivalente a la hipótesis que dice que el valor del observable pre existe a la medición.

Es fácil ver, usando un sistema de dos partículas de spin  $1/2$ , que las teorías (realistas) no contextuales que satisfacen la consistencia funcional son incompatibles con la mecánica cuántica. Esto se demuestra de la siguiente manera. Consideremos los siguientes nueve observables:

$$M = \begin{bmatrix} \sigma_x \otimes \mathbb{1} & \sigma_z \otimes \mathbb{1} & \sigma_x \otimes \sigma_z \\ \mathbb{1} \otimes \sigma_x & \mathbb{1} \otimes \sigma_z & \sigma_z \otimes \sigma_x \\ \sigma_x \otimes \sigma_x & \sigma_z \otimes \sigma_z & \sigma_y \otimes \sigma_y \end{bmatrix} \quad (45)$$

Es fácil demostrar que los tres observables pertenecientes a cualquier fila o cualquier columna de esta matriz forman un CCOC. Cada elemento de la matriz, entonces, pertenece a dos contextos distintos (el de la fila y el de la columna). Por otra parte es fácil ver que  $M_{1,j} \times M_{2,j} = M_{3,j}$  para todo valor de  $j = 1, 2, 3$  (el último elemento

de cada columna es el producto de los otros dos). En cambio, para las dos primeras filas  $k = 1, 2$  se cumple que  $M_{k,1} \times M_{k,2} = M_{k,3}$  pero para la tercera fila vale  $M_{3,1} \times M_{3,2} = -M_{3,3}$ . Estas seis identidades definen relaciones funcionales dentro de cada uno de los CCOC's formados por las filas y columnas. De acuerdo a nuestro razonamiento anterior, debería ser posible asignar valores a los observables de cada fila y cada columna. Si lo hacemos de manera no contextual, eso quiere decir que podemos escribir seis identidades de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} v(\sigma_x \otimes \mathbb{1}) \times v(\mathbb{1} \otimes \sigma_x) &= v(\sigma_x \otimes \sigma_x) \\ v(\sigma_z \otimes \mathbb{1}) \times v(\mathbb{1} \otimes \sigma_z) &= v(\sigma_z \otimes \sigma_z) \\ v(\sigma_x \otimes \sigma_z) \times v(\sigma_z \otimes \sigma_x) &= v(\sigma_y \otimes \sigma_y) \\ v(\sigma_x \otimes \mathbb{1}) \times v(\mathbb{1} \otimes \sigma_z) &= v(\sigma_x \otimes \sigma_z) \\ v(\sigma_z \otimes \mathbb{1}) \times v(\mathbb{1} \otimes \sigma_x) &= v(\sigma_z \otimes \sigma_x) \\ v(\sigma_x \otimes \sigma_x) \times v(\sigma_z \otimes \sigma_z) &= -v(\sigma_y \otimes \sigma_y) \end{aligned}$$

Esto lleva inevitablemente a una contradicción si además recordamos que todos los valores de estos observables  $v(\hat{A} \otimes \hat{B}) = \pm 1$ . En efecto, si multiplicamos las seis identidades obtenemos una identidad en la que cada uno de los valores en cuestión aparece dos veces. Por lo tanto todos los productos que están del lado izquierdo de la ecuación que obtenemos serán iguales a  $(+1)$ , mientras que lo que obtenemos del lado izquierdo será siempre igual a  $(-1)$ . Entonces, el conjunto de ecuaciones anterior se reduce a  $+1 = -1$ , lo cual es obviamente absurdo.

El absurdo proviene de suponer todas las hipótesis anteriores: que los valores de todos los elementos de un CCOC pre existen a la medición (y son iguales al valor medido), que el valor de un observable es independiente del contexto y que los valores de los observables cumplen las mismas relaciones funcionales que los propios observables. Lo que hemos demostrado es que estas hipótesis (totalmente compatibles con nuestro sentido común) son incompatibles con la mecánica cuántica. Que quiere decir esto? Obviamente la mecánica cuántica está fundada sobre otras hipótesis lo cual implica que no es extraño que otra teoría fundada en otras hipótesis sea incompatible con ella (está escrita, inclusive, en otro lenguaje). Lo que lo anterior implica es que si alguna vez la mecánica cuántica es reemplazada por otra teoría que la supere y que mantenga las predicciones de la mecánica cuántica que han sido comprobadas hasta el presente, entonces esa teoría superadora no podrá satisfacer las hipótesis discutidas mas arriba (realismo, contextualidad, consistencia funcional).

## VI. CLASE 7: TEORÍA DE TRANSFORMACIONES FÍSICAS EN EL ESPACIO DE HILBERT.

### NOTA: ESTA SECCION NO ESTA CORREGIDA POR EL AUTOR

Como vimos, el escenario de la mecánica cuántica es el espacio de Hilbert (un espacio vectorial complejo, con un producto interno hermitiano y que satisface el axioma de completitud). En ese espacio se representan todos los estados físicos de cualquier sistema. El objetivo principal de la física es descubrir y describir la distintas maneras en las que los sistemas pueden transformarse, pueden evolucionar, pueden modificar su estado. En este capítulo describiremos como representar cualquier transformación física en el espacio de estados de la mecánica cuántica.

En primer lugar conviene aclarar que es lo que entendemos por una "transformación física" de un sistema. En ese concepto incluiremos a cualquier cambio que tiene lugar en el sistema real, y por lo tanto ocurre en el laboratorio. Por ejemplo, podemos tomar un sistema cualquiera (un conjunto de partículas puntuales, por ejemplo) y desplazarlo moviéndolo de un lugar a otro. También podemos imprimirle un impulso en alguna dirección o rotarlo alrededor de algún eje. Asimismo, también podemos dejar que el sistema evolucione librado a su propia suerte, movida por su propia dinámica interna o a causa de su interacción con otros objetos. Cambios bruscos en la posición o en la velocidad, rotaciones y evolución temporal debido a interacciones naturales son los ejemplos típicos de las transformaciones físicas a las que nos referiremos en este capítulo. Cualquiera de estas transformaciones tiene lugar en el laboratorio. La pregunta a la que nos abocaremos es: cómo están representadas en el espacio de estados de la mecánica cuántica? O sea, supongamos que en nuestro laboratorio tenemos un sistema físico que fue preparado en un estado descrito por el vector  $|\phi\rangle$ . Supongamos que en el laboratorio aplicamos al sistema alguna de las transformaciones mencionadas mas arriba, a la que llamaremos  $T$ . Al aplicarla, el estado cambiará y pasará a ser otro al que llamaremos  $|\phi'\rangle$ . Entonces, nuestro objetivo será encontrar al "representante" de la transformación  $T$  en el espacio de Hilbert. Es decir, para cada  $T$  existirá un operador  $\mathcal{D}(T) : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  tal que  $|\phi'\rangle = \mathcal{D}(T)|\phi\rangle$  para todo estado  $|\phi\rangle$ .

El método que usaremos será sencillo: En primer lugar, describiremos la teoría clásica de las transformaciones de un sistema analizando cómo se representan estas transformaciones en el espacio de las fases. Esta es la teoría de las transformaciones canónicas, que repasaremos brevemente. Con esta herramienta a mano, estudiaremos ciertas propiedades esenciales que definen a cada una de ellas. Estas propiedades de las transformaciones reales, que deben ser heredadas por sus representantes en el espacio de estados. Nos adelantamos a mencionar el ejemplo mas sencillo: las rotaciones. Es conocido el hecho de que si rotamos a un objeto primero alrededor de un

eje y luego lo rotamos alrededor de otro eje diferente del anterior obtenemos un estado distinto que aquel al que llegamos si hacemos las rotaciones en el orden inverso. Esta diferencia puede ser cuantificada matemáticamente y esta propiedad, que define a las rotaciones, nos servirá para definir a su representante en el espacio de Hilbert.

### A. El caso clásico: Transformaciones canónicas

El escenario de la física clásica es el espacio de las fases. Para un sistema de  $N$  grados de libertad, dicho espacio tiene dimensión  $2N$  siendo cada punto identificado por  $N$  coordenadas y  $N$  momentos:  $\alpha = (q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N)$ . Las coordenadas y momentos son, todos, propiedades observables del sistema.

Los representantes de las transformaciones físicas en el espacio de las fases corresponden a cambios en las coordenadas  $\alpha$ . Si el estado inicial está descrito por el punto  $\alpha = (q, p)$  el estado luego de la transformación estará descrito por las coordenadas  $\alpha' = F(\alpha)$  (omitimos por comodidad los subíndices en las coordenadas  $q$  y los momentos  $p$ , que son vectores con  $N$  componentes).

Los representantes de las transformaciones físicas en el espacio de las fases deben cumplir una condición fundamental. Supongamos que no tenemos información completa sobre el estado del sistema. En ese caso, el estado no está representado por un punto en el espacio de las fases sino por una densidad de probabilidad en dicho espacio. Esta es una función  $\rho(\alpha)$  que permite calcular la probabilidad de encontrar al sistema en cualquier región del espacio de las fases. Si la región es  $\mathcal{R}$ , la probabilidad será  $\text{Prob}(\text{mathcal{R}}) = \int_{\mathcal{R}} d\alpha \rho(\alpha)$ .

Supongamos que aplicamos una transformación que modifica el estado del sistema y que está representada por la función  $\alpha' = F(\alpha)$ . Si el estado antes de la transformación estaba descrito por la función  $\rho(\alpha)$ , entonces el estado después de la transformación estará descrito por la función  $\rho'(\alpha) = \rho(F^{-1}(\alpha))$  (esto se lee así: el valor de la nueva función  $\rho'$  en el punto  $\alpha$  es el que tenía la vieja función  $\rho$  en el punto que se transforma en  $\alpha$  al aplicar la transformación). También podemos aplicar la transformación a la región  $\mathcal{R}$ . Esto es debido a que toda región del espacio de fases puede asociarse en forma unívoca a un estado físico: aquél en el cual la densidad de probabilidad es uniforme sobre la región  $\mathcal{R}$  y vale cero fuera de ella. A esta función la llamaremos  $\mathcal{R}(\alpha)$ . Por lo tanto la transformación física mapea la región a  $\mathcal{R}'(\alpha) = \mathcal{R}(F^{-1}(\alpha))$ .

Teniendo en cuenta lo anterior surge naturalmente una condición fundamental para la función  $F(\alpha)$ . Esta función debe ser tal que se preserva el área de cualquier región del espacio de fases. Esto surge de exigir que la probabilidad de que el sistema cuyo estado es  $\rho(\alpha)$  se encuentre en la región  $\mathcal{R}(\alpha)$  debe ser la misma que la probabilidad de que el sistema cuyo estado es  $\rho'(alpha) = \rho(F^{-1}(\alpha))$  se encuentre en la región  $\mathcal{R}'(\alpha) = \mathcal{R}(F^{-1}(\alpha))$ . Este es el requisito fundamental que deben satisfacer los

representantes de las transformaciones físicas en el espacio de fases: Deben conservar el área de cualquier región (no solamente el volumen total sino también cualquier área definida en cualquier superficie del espacio de fases). Una transformación que cumple con esta condición es lo que se denomina "transformación canónica".

Un poderoso teorema, cuya prueba omitiremos (y puede hallarse en los buenos libros de Mecánica Clásica) establece condiciones necesarias y suficientes para que una transformación sea canónica. Sólo mencionaremos aquí algunas de ellas, que son las que usaremos mas adelante. Una transformación es canónica si y solo si existe una función generatriz a partir de la cual puede derivarse. Hay funciones generatrices de diverso tipo (cuatro tipos distintos) y todas ellas dependen de una de las componentes de  $\alpha = (q, p)$  y de otra de las componentes de  $F(\alpha) = (Q, P)$ . Existen por lo tanto cuatro tipos de funciones  $F_1(q, Q)$ ,  $F_2(q, P)$ ,  $F_3(p, P)$ ,  $F_4(p, Q)$ . Para funciones del segundo tipo, por ejemplo, la transformación es canónica si se cumple que  $Q = \partial_q F_2(q, P)$  y  $p = \partial_P F_2(q, P)$ . Un caso particular es aquel en el cual  $F_2(q, P) = qP$ . En ese caso es inmediato ver que la transformación es la identidad.

Es importante considerar el caso de transformaciones que difieren poco de la identidad. Estas son llamadas "transformaciones canónicas infinitesimales". Todas ellas son generadas por funciones del tipo  $F_2(q, P) = qP + \epsilon G(q, P)$ , donde  $\epsilon$  es un parámetro pequeño y la función  $G(q, P)$  puede ser cualquiera. Esta función caracteriza a la transformación y se la denomina "generador de la transformación canónica". En ese caso, las viejas y nuevas coordenadas y momentos están relacionadas de la siguiente forma:

$$Q = q + \epsilon \partial_P G(q, P), \quad p = P + \epsilon \partial_q G(q, P).$$

Lo interesante es que para cualquier elección de  $G(q, P)$  la transformación resultante es canónica. Algunos ejemplos sencillos serán discutidos mas adelante.

## B. Traslaciones espaciales infinitesimales

Veamos la representación de la primera operación física: las traslaciones. Supongamos que desplazamos rígidamente a nuestro sistema desde su posición originl  $\vec{r}_0$  hasta una posición vecina  $\vec{r}'_0 = \vec{r}_0 + \vec{\epsilon}$  para un cierto vector de magnitud infinitesimal  $\vec{\epsilon}$ . Supongamos por ahora que el sistema tiene solamente 1 grado de libertad (la generalización es inmediata). Obviamente en el espacio de las fases esta transformación debe de estar representada por la función que mapea  $\alpha = (q, p)$  en  $\alpha' = (Q, P) = (q + \epsilon, p)$ . El estado del sistema, entonces, será  $\rho'(q, p) = \rho(q - \epsilon, p)$ . Teniendo en cuenta lo anterior, es también evidente que esta transformación es canónica y que está generada por  $G(q, P) = \epsilon P$  (o sea,  $F_2(q, P) = qP + \epsilon P$ ).

Para encontrar el representante de las traslaciones en la mecánica cuántica tenemos que encontrar una propiedad

de esta operación que no esté directamente asociada a la formulación en el espacio de fases. Podemos ver que las traslaciones satisfacen la siguiente propiedad: Definamos dos transformaciones como la composición de una traslación y otra operación (que NO es el representante de una operación física) que consiste en multiplicar por el argumento de la función  $\rho$ , que define al estado. A esta última transformación la podemos denominar  $M_q$ . Consideremos ahora que es lo que sucede si primero aplicamos una traslación y luego  $M_q$ . Es evidente que en ese caso obtenemos una función que es  $\tilde{\rho}_1(q, p) = q\rho'(q, p)$ . En cambio, si aplicamos esta operación en el orden inverso (primero  $M_q$  y luego la traslación, obtenemos  $\tilde{\rho}_2(q, p) = (q - \epsilon)\rho'(q, p)$ . A primer orden en  $\epsilon$ , la diferencia entre estas dos transformaciones ( $M_q T - T M_q$  es, a primer orden en  $\epsilon$ ,  $\delta\tilde{\rho}(q, p) = \epsilon\rho(q, p)$ ). Por eso, podemos decir que el representante de las traslaciones en el espacio de fases cumple con la propiedad  $M_q T - T M_q = \epsilon\mathbb{1} = \epsilon qP$ . Es interesante notar que si imponemos la validez de esta relación (relación de conmutación!) de aquí surge que el generador de las traslaciones es el momento. En efecto, consideremos ahora que todavía no sabemos cual es la transformación canónica que representa a las traslaciones: simplemente digamos que dicha transformación es tal que  $(q, p) \rightarrow (Q, P)$ . Si pedimos que valga la condición de conmutación anterior deducimos que debe cumplirse lo siguiente

$$Q(q, p)\rho'(q, p) - q\rho'(q, p) = \epsilon\rho'(q, p) \quad (46)$$

de donde surge que  $Q(q, p) = q + \epsilon$ , ya que la igualdad anterior tiene que ser válida para todo  $(q, p)$ . De aquí resulta inmediato que el generador es el momento). Lo interesante de este cálculo es notar que la relación de conmutación define completamente a las traslaciones espaciales. Es decir, que podemos decir que las traslaciones espaciales infinitesimales son operaciones que tienen un representante que satisface  $M_q T - T M_q = \epsilon\mathbb{1}$ .

## C. Traslaciones en momento.

Otra transformación física posible es imprimir brúscamente (acoplado a alguna fuente externa, por ejemplo) un pequeño momento  $\vec{\epsilon}'$  a todas las partículas. En ese caso la transformación canónica es  $Q = q$  y  $P = p + \epsilon'$ . El generador en este caso es  $G(q, P) = \epsilon'q$ . Podemos notar fácilmente que podemos aplicar el mismo argumento anterior componiendo ahora la traslación en momento con otra operación  $M_p$  que multiplica por el argumento de la función que representa al estado. Tal como vimos en el caso de la posición si comparamos lo que obtenemos aplicando estas dos operaciones en distinto orden obtenemos

$$\delta'\rho(q, p) = P\rho'(q, p) - p\rho(q, p) = \epsilon'\rho(q, p),$$

Como antes, imponer la validez de esta relación es equivalente a pedir que la transformación sea tal que  $P =$

$p + \epsilon$ . Nuevamente, vemos que la relación de conmutación (clásica) entre  $M_p$  y  $T_p$ , es equivalente a imponer la representación natural, que está dada por  $Q = q$ ,  $P = p + \epsilon'$ . La virtud de la relación de conmutación es que podrá ser utilizada para definir las traslaciones en el caso cuántico.

#### D. Rotaciones

Toda rotación en el espacio tridimensional está caracterizada por un eje de rotación y un ángulo. El eje  $\vec{e}_n$  es el eje de rotación y el ángulo nos dice cuanto rotamos alrededor de dicho eje. La acción de las rotaciones en el espacio real es bien conocida: Cuando rotamos una partícula alrededor del eje  $\vec{e}_n$  en un ángulo  $\phi$  la nueva posición  $\vec{r}'$  se relaciona con la posición antes de la transformación ( $\vec{r}$ ) mediante la ecuación  $\vec{r}' = R_{\vec{e}_n}(\phi)\vec{r}$ . En los casos particulares de los ejes cartesianos, la forma de la matrices de  $3 \times 3$  que aparece en esa expresión es bien conocida. Por ejemplo, una rotación alrededor del eje  $\vec{e}_z$  está descrita por la matriz

$$R_{\vec{e}_z}(\phi) = \begin{bmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (47)$$

Análogamente, las matrices de rotación alrededor de los otros ejes cartesianos son

$$R_{\vec{e}_y}(\phi) = \begin{bmatrix} \cos \phi & 0 & \sin \phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \phi & 0 & \cos \phi \end{bmatrix}, R_{\vec{e}_x}(\phi) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi & -\sin \phi \\ 0 & \sin \phi & \cos \phi \end{bmatrix}. \quad (48)$$

Evidentemente, las expresiones anteriores implican que, para ángulos pequeños  $\delta\phi$  tenemos

$$R_{\vec{e}_x}(\delta\phi)R_{\vec{e}_y}(\delta\phi) \approx \begin{bmatrix} 1 - \frac{\delta\phi^2}{2} & 0 & \delta\phi \\ \phi^2 & 1 - \frac{\delta\phi^2}{2} & -\delta\phi \\ -\delta\phi & \delta\phi & 1 - \delta\phi^2 \end{bmatrix}, \quad (49)$$

mientras que las rotaciones en orden inverso dan lugar a

$$R_{\vec{e}_y}(\delta\phi)R_{\vec{e}_x}(\delta\phi) \approx \begin{bmatrix} 1 - \frac{\delta\phi^2}{2} & \delta\phi^2 & \delta\phi \\ 0 & 1 - \frac{\delta\phi^2}{2} & -\delta\phi \\ -\delta\phi & \delta\phi & 1 - \delta\phi^2 \end{bmatrix}. \quad (50)$$

Por lo tanto, el conmutador de las dos rotaciones es:

$$\begin{aligned} R_{\vec{e}_x}(\delta\phi)R_{\vec{e}_y}(\delta\phi) - R_{\vec{e}_y}(\delta\phi)R_{\vec{e}_x}(\delta\phi) &\approx \begin{bmatrix} 0 & -\delta\phi^2 & 0 \\ \delta\phi^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ &\approx R_{\vec{e}_z}(\delta\phi^2) - \mathbb{1} \end{aligned} \quad (51)$$

Esta expresión nos muestra que las rotaciones infinitesimales conmutan ya que el conmutador es una matriz en la que solamente aparecen términos de segundo orden en  $\delta\phi$ . Pero esta misma expresión define la forma en que las rotaciones dejan de conmutar y permite definir a las rotaciones. Es sencillo probar que otras igualdades del mismo

tipo se obtienen permutando cíclicamente los índices en la anterior. Entonces, la expresión que usaremos para caracterizar a las rotaciones es:

$$R_{\vec{e}_j}(\delta\phi)R_{\vec{e}_k}(\delta\phi) - R_{\vec{e}_k}(\delta\phi)R_{\vec{e}_j}(\delta\phi) = \epsilon_{jkl}R_{\vec{e}_l}(\delta\phi^2) - \mathbb{1}. \quad (52)$$

Es fácil ver que si pedimos que el representante de las rotaciones en el espacio de las fases satisfaga esta identidad entonces resulta que el generador de una rotación infinitesimal alrededor del eje  $\vec{e}_n$  es  $\vec{L}\vec{e}_n$ , es decir, la componente del momento angular sobre el eje de rotación. Veremos que lo mismo sucede en el caso cuántico.

#### E. Evolución temporal

La evolución temporal en el caso de la mecánica cuántica está dictada por las ecuaciones de Hamilton. Estas ecuaciones son un caso particular de transformación canónica infinitesimal cuyo generador es del Hamiltoniano del sistema clásico  $H(q, P)$ . En efecto, si consideramos la transformación infinitesimal cuya función generatriz es  $F_2(q, P) = qP + dt H(q, P)$  entonces la relación entre las viejas y las nuevas coordenadas estará dada por

$$Q = q + dt \partial_P H(q, P), \quad p = P + dt \partial_q H(q, P), \quad (53)$$

es decir que, definiendo  $dq = Q - q$  y  $dp = P - p$  tenemos que estas ecuaciones son equivalentes a

$$\dot{q} = \partial_p H(q, p), \quad \dot{p} = -\partial_q H(q, p). \quad (54)$$

Estas son las ecuaciones de Hamilton en su versión mas sencilla (que pueden reescribirse de manera completamente simétrica como  $\dot{q} = \{q, H\}_{PB}$  y  $\dot{p} = \{p, H\}_{PB}$  utilizando el corchete de Poisson que se define como  $\{A, B\} = \partial_q A \partial_p B - \partial_p A \partial_q B$ ).

#### F. Transformaciones físicas en el espacio de Hilbert

Tal como razonamos en el caso del espacio de las fases, es posible imponer restricciones muy fuertes sobre las posibles formas que puede tener las representaciones de las transformaciones físicas en el espacio de Hilbert. En efecto, en el espacio de las fases pudimos razonar de la siguiente forma: dado que las áreas de las distintas regiones tienen una interpretación física (en términos de probabilidades) concluimos que las transformaciones físicas deben ser representadas en dicho espacio mediante transformaciones que preserven dichas áreas. Estas son las transformaciones canónicas. En el caso de la mecánica cuántica podemos razonar de la misma manera: Dados dos estados  $|\phi\rangle$  y  $|\psi\rangle$ , el módulo del producto escalar entre ambos tiene una interpretación física ya que  $|\langle\phi|\psi\rangle|^2$  es la probabilidad de que una vez preparado el estado  $|\phi\rangle$  realicemos un conjunto completo de experimentos y detectemos todas las propiedades que caracterizan al estado  $|\psi\rangle$ . Teniendo en cuenta esto, si realizamos una

transformación física en el espacio real que cambia los estados  $|\phi\rangle$  y  $|\psi\rangle$  mapeandolos a los estados  $|\phi'\rangle = \mathcal{U}|\phi\rangle$  y  $|\psi'\rangle = \mathcal{U}|\psi\rangle$  debemos exigir que el representante de la transformación (que aquí denominamos  $\mathcal{U}$ ) satisfaga la ley de conservación de las probabilidades (las probabilidades deben ser idénticas antes y después de la transformación:

$$|\langle\phi'|\psi'\rangle| = |\langle\phi|\psi\rangle|. \quad (55)$$

Esta igualdad debe valer para cualquier par de estados  $|\phi\rangle$  y  $|\psi\rangle$ . Por lo tanto, los representantes de la transformación deben satisfacer que

$$\mathcal{U}^\dagger \mathcal{U} = \pm \mathbb{1}. \quad (56)$$

(notar que  $\mathcal{U}^\dagger \mathcal{U}$  es siempre un operador hermítico). Es decir, las transformaciones deben estar representados por operadores unitarios o antiunitarios. En particular, aquellas transformaciones que forman una familia continua que incluye a la identidad (por ejemplo, las traslaciones espaciales, en momento, las rotaciones, la evolución temporal, etc), deben ser representadas por operadores unitarios. Esta es la condición mas importante que imponemos sobre los representantes de las transformaciones físicas en el espacio de Hilbert.

Para transformaciones infinitesimales esta conclusión impone límites muy fuertes a la expresión matemática que pueden adoptar los operadores que representan a la transformación. Consideremos una transformación infinitesimal de algún tipo, que está caracterizada por algún parámetro pequeño  $\delta a$  (que podrá ser una distancia, un momento, un ángulo, un intervalo de tiempo, etc, según sea la transformación en cuestión). Cualquier transformación de este tipo puede ser expresada como  $\mathcal{D}(\delta a) = \mathbb{1} - i\delta a \mathcal{K} + O(\delta a^2)$ , donde el operador  $\mathcal{K}$  caracteriza a la transformación (es el generador de la transformación). Es fácil demostrar que este operador debe ser hermítico, es decir:  $\mathcal{K}^\dagger = \mathcal{K}$ . Esta es una condición necesaria y suficiente para que  $\mathcal{D}(\delta a)$  sea unitario. En efecto, esto puede demostrarse notando que

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^\dagger(\delta a)\mathcal{D}(\delta a) &= (\mathbb{1} + i\delta a \mathcal{K}^\dagger)(\mathbb{1} - i\delta a \mathcal{K}) + O(\delta a^2) \\ &= \mathbb{1} + i\delta a(\mathcal{K}^\dagger - \mathcal{K}) + O(\delta a^2). \end{aligned}$$

Por último es posible obtener una expresión simple para una transformación física no infinitesimal, sino finita. En efecto, el operador  $\mathcal{D}(A)$  puede obtenerse como una composición de  $n$  operadores  $\mathcal{D}(\delta a)$  donde  $\delta a = A/n$ . Tomando el límite para  $n \rightarrow \infty$  con  $\delta a \rightarrow 0$  de modo tal que  $n\delta a = A$  obtenemos la siguiente expresión

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(A) &= \lim_{n \rightarrow \infty} (\mathbb{1} - i\frac{A}{n}\mathcal{K})^n \\ &= \exp(-iA\mathcal{K}). \end{aligned}$$

En la deducción anterior hay una hipótesis implícita, que se cumple en todos los casos que estudiaremos salvo para la evolución temporal. En efecto, estamos suponiendo que el generador de la transformación infinitesimal  $\mathcal{K}$  que

nos permite dar un salto desde 0 hasta  $\delta a$  es el mismo que el que nos permite dar saltos sucesivos de tamaño  $\delta a$  desde cualquier otro punto del eje del parámetro de la transformación.

### G. Representante de las traslaciones espaciales.

El representante de las traslaciones será un operador unitario tal que para el caso infinitesimal cumple con la relación de conmutación análoga a la que vimos en el caso clásico. El representante de una traslación infinitesimal en una distancia  $\epsilon$  será denotado como  $\mathcal{T}(\epsilon)$ . Teniendo en cuenta lo anterior, este operador debe satisfacer:

$$\hat{X}\mathcal{T}(\epsilon) - \mathcal{T}(\epsilon)\hat{X} = \epsilon\mathbb{1}.$$

Reemplazando la expresión  $\mathcal{T}(\epsilon) \approx \mathbb{1} - i\epsilon K_x$ , obtenemos que el generador de las traslaciones debe cumplir que

$$[\hat{X}, K_x] = i\mathbb{1}. \quad (57)$$

Es decir, el generador de las traslaciones espaciales es un operador tal que su conmutador con el operador posición es el indicado mas arriba. Obviamente  $K_x$  tiene unidades de  $L^{-1}$  y siempre puede escribirse como  $K_x = P/\hbar$ . De este modo, el generador de las traslaciones espaciales es el operador que satiface la relación de conmutación

$$[X, P] = i\hbar\mathbb{1}. \quad (58)$$

En términos de este operador (el momento), las traslaciones infinitesimales son  $\mathcal{T}(\epsilon) = \mathbb{1} - i\epsilon P/\hbar$  y las traslaciones finitas resultan ser  $\mathcal{T}(x_0) = \exp(-ix_0 P/\hbar)$ .

### H. Traslaciones en momento y en el espacio de fases

Razonando en forma análoga a la anterior. Podemos deducir fácilmente que las traslaciones en momento tienen un generador  $K_p$  tal que satisface la relación de conmutación  $[P, K_x] = i\mathbb{1}$ . Nuevamente, el operador  $K_x$  tiene unidades de inversa de momento y puede ser escrito siempre como  $K_p = -X/\hbar$ . Entonces, el generador de las traslaciones en momento es el operador posición (con el signo cambiado). Las traslaciones en momento, infinitesimales y finitas, resultan ser  $\mathcal{T}(\epsilon') \approx \mathbb{1} + i\epsilon' X/\hbar$  y  $\mathcal{T}(p_0) = \exp(+ip_0 X/\hbar)$ .

Usando traslaciones espaciales y en momento podemos definir operadores de traslación en el espacio de las fases. En efecto, estos se definen como la composición de una traslación espacial y una en momento. Sin embargo, estas operaciones no conmutan asique la forma de definir traslaciones en el espacio de las fases no es única. La relación entre traslaciones espaciales y en momento es la siguiente:

$$\mathcal{T}(x_0)\mathcal{T}(p_0) = \mathcal{T}(p_0)\mathcal{T}(x_0) \exp(-ix_0 p_0/\hbar).$$

El operador de desplazamiento en el espacio de fases se define de modo tal que sea simétrico ante el orden de las traslaciones. Esto es:

$$\begin{aligned}\mathcal{D}(x_0, p_0) &= \exp(-i(x_0P - p_0X)/\hbar) \\ &= \mathcal{T}(x_0)\mathcal{T}(p_0)\exp(ix_0p_0/2\hbar). \\ &= \mathcal{T}(p_0)\mathcal{T}(x_0)\exp(-ix_0p_0/2\hbar).\end{aligned}$$

Para demostrar la validez de estas identidades podemos proceder a partir de la versión infinitesimal de estas transformaciones o bien aplicar la relación de BCH que establece que  $\exp(A+B) = \exp(A)\exp(B)\exp(-[A,B]/2)$  si  $A$  y  $B$  conmutan con  $[A, B]$ .

Es interesante notar que los operadores de traslación en el espacio de fases forman una base ortonormal y completa del espacio de operadores. En efecto, es sencillo probar que

$$\text{Tr}(\mathcal{D}^\dagger(x_0, p_0)\mathcal{D}(x'_0, p'_0)) = 2\pi\delta(p_0 - p'_0)\delta(x_0 - x'_0)$$

### I. Evolución temporal. Postulado 6 de la Mecánica Cuántica.

El caso de la evolución temporal es un caso fundamental de transformación física. El caso clásico, descripto mas arriba, es sencillo: la evolución temporal está generada por el Hamiltoniano. Este operador determina completamente la dinámica. Este es un postulado, que da lugar a las ecuaciones clásicas de movimiento. El mismo postulado se adopta en la mecánica cuántica y es importante destacar que esto es, efectivamente, un postulado (y no algo que puede deducirse de alguna otra manera). Por cierto, el postulado se puede formular de la siguiente forma. **Postulado 6:** "El operador de evolución temporal infinitesimal es generado por el Hamiltoniano". Teniendo en cuenta esto, podemos escribir:

$$\mathcal{U}(t+dt, t) = \mathbb{1} - i dt H(t)/\hbar + O(dt^2). \quad (59)$$

Teniendo en cuenta que el Hamiltoniano puede depender del tiempo, no es inmediato deducir la forma de este operador para un desplazamiento temporal finita. En cambio, es sencillo deducir una ecuación diferencial para el operador de evolución temporal, que resulta ser

$$\begin{aligned}d\mathcal{U} &= \mathcal{U}(t+dt, t) - \mathcal{U}(t, t) \\ &= -iH(t) dt/\hbar \\ \frac{d\mathcal{U}}{dt} &= -\frac{i}{\hbar}H(t)\mathcal{U}.\end{aligned}$$

Esta ecuación puede integrarse y de este modo obtener una expresión para la traslación temporal finita  $\mathcal{U}(t, 0)$ . Integrando

$$\begin{aligned}\mathcal{U}(t, 0) - \mathbb{1} &= \sum_{n \geq 1} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \times \\ &\times \int_0^t dt_n \int_0^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_0^{t_2} dt_1 H(t_n) \dots H(t_1).\end{aligned} \quad (60)$$

Si el Hamiltoniano conmuta a distintos tiempos (o sea, si  $[H(t), H(t')] = 0$  para todo par de tiempos  $t$  y  $t'$ ) entonces el integrando en la expresión anterior es una función completamente simétrica de  $t_1, t_2, \dots, t_n$ . Por lo tanto, las integrales anidadas pueden reescribirse de la forma

$$\begin{aligned}\mathcal{U}(t, 0) - \mathbb{1} &= \sum_{n \geq 1} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \times \\ &\times \int_0^t dt_n \int_0^t dt_{n-1} \dots \int_0^t dt_1 H(t_n) \dots H(t_1).\end{aligned} \quad (61)$$

En este caso es fácil ver que esto no es otra cosa que el desarrollo de la exponencial de modo tal que

$$\mathcal{U}(t, 0) = \exp(-i \int_0^t dt' H(t')/\hbar). \quad (62)$$

Obviamente, la situación mas sencilla es aquella en la cual el Hamiltoniano es independiente del tiempo. En ese caso, el operador de evolución es

$$\mathcal{U}(t, 0) = \exp(-i H t/\hbar). \quad (63)$$

### J. Rotaciones

Buscaremos ahora al representante de una rotación  $R_{\vec{e}_n}(\phi)$  al que denotaremos  $\mathcal{D}(R_{\vec{e}_n}(\phi))$ . Como vimos, una rotación infinitesimal en un ángulo  $\delta\phi$  alrededor del eje  $\vec{e}_n$  tiene un representante por un operador unitario que debe cumplir una propiedad esencial: Su desarrollo a primer orden en  $\delta\phi$  debe ser tal que  $\mathcal{D}(R_{\vec{e}_n}(\delta\phi)) \approx \mathbb{1} - iJ_n\delta\phi/\hbar$  donde  $J_n$  es algún operador hermítico con unidades de momento angular (las mismas que  $\hbar$ ) y cuyas propiedades debemos determinar. Para encontrar las propiedades que deben cumplir los generadores de las rotaciones alrededor de los tres ejes cartesianos impondremos la condición que establece que estos representantes tengan las mismas propiedades que sus representados. Es decir, impondremos la validez de la condición

$$\mathcal{D}(R_{\vec{e}_x}(\delta\phi))\mathcal{D}(R_{\vec{e}_y}(\delta\phi)) - \mathcal{D}(R_{\vec{e}_y}(\delta\phi))\mathcal{D}(R_{\vec{e}_x}(\delta\phi)) = \mathcal{D}(R_{\vec{e}_z}(\delta\phi^2)) - \mathbb{1} \quad (64)$$

Es fácil ver que reemplazando las expresiones correspondientes para los representantes de las rotaciones alrededor de los ejes cartesianos se verifica que se debe cumplir la siguiente relación entre los generadores:

$$[J_j, J_k] = i\epsilon_{jkl}J_l. \quad (65)$$

Es decir, para encontrar el representante de la rotación mas general debemos encontrar tres operadores que satisfagan esta relación de conmutación. Una vez hecho esto podemos escribir  $J_n = \vec{e}_n \vec{J}$  y la rotación infinitesimal alrededor del eje  $\vec{e}_n$  está representada entonces por la expresión que escribimos mas arriba. Con el mismo argumento que aplicamos a las traslaciones, para obtener la rotación finita debemos componer un número infinito

de rotaciones infinitesimales. Haciendo esto obtenemos que una rotación finita debe ser tal que

$$\mathcal{D}(R_{\vec{e}_n}(\phi)) = \exp(-i\phi\vec{e}_n\vec{J}/\hbar) \quad (66)$$

Mas adelante veremos ejemplos sencillos de rotaciones en los espacios vectoriales que hemos visto hasta ahora.

## K. Ejemplos y comentarios

Algunas conclusiones interesantes pueden obtenerse a partir de las expresiones anteriores:

1. La constante de Planck. Es importante notar que la teoría de transformaciones en el espacio de Hilbert requiere, necesariamente, la existencia de una constante fundamental con unidades de acción. En el caso clásico, las funciones generatrices tienen unidades de acción: la que corresponde a la identidad, por ejemplo, es  $F_2(q, P) = qP$  y claramente tiene esas unidades. En cambio, el operador que representa a la identidad en el espacio de Hilbert es adimensional: es simplemente el operador identidad  $U(0) = I$ . Entonces, si usamos como principio que los generadores de las distintas transformaciones cuánticas sean los mismos que los de las transformaciones clásicas, al escribir  $\mathcal{D}(T(\epsilon)) = I - i\epsilon K$  tenemos que usar un generador  $K$  cuyas unidades sean las inversas de las de  $\epsilon$ . En el caso del tiempo,  $K$  tiene unidades de frecuencia. Imponer que  $K$  sea proporcional al Hamiltoniano (el principio de cuantización) implica que hay que utilizar una constante con dimensiones de acción de modo de poder escribir  $K = H/\hbar$ . Lo mismo sucede con las traslaciones y las rotaciones. Siempre hay que usar una constante. Evidentemente una elección apropiada de unidades en cada caso puede lograr que la constante sea la misma para todas las transformaciones. Entonces, el formalismo de la mecánica cuántica visto hasta ahora implica la existencia de una constante  $\hbar$ . El valor de esa constante queda indeterminado y debe ser fijado por los experimentos.
2. Los autoestados de la posición son invariantes ante desplazamientos en momento y los autoestados de momento son invariantes frente a traslaciones en posición. Esto surge directamente del hecho de que posición y momento son generadores de las respectivas transformaciones. Esto equivale a decir que los autoestados de momento están completamente deslocalizados en posición y viceversa.
3. En un espacio de dimensión finita ( $N$ ) no es posible encontrar operadores  $X$  y  $P$  tales que  $[X, P] = i\hbar\mathbb{1}$  y por lo tanto no es posible construir representaciones de las traslaciones en dichos espacios. Es sencillo demostrar que esto no es posible ya que en todo espacio de dimensión finita podemos usar

libremente la relación  $\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA)$ . Por lo tanto, debería cumplirse que  $\text{Tr}[A, B] = 0$ , con lo cual no podría cumplirse la condición antedicha que impone que  $\text{Tr}[X, P] = i\hbar N$ . Esto tiene una interpretación natural ya que las representaciones que discutimos mas arriba corresponden a traslaciones infinitesimales o finitas pero continuas (continuamente conectadas con la identidad). Sin embargo, en un espacio de dimensión finita es posible encontrar una forma de representar a las traslaciones discretas. En efecto, supongamos que en ese espacio definimos una base  $\mathcal{B} = \{|j\rangle, j = 0, \dots, N-1\}$ . Podemos pensar que cada estado  $|j\rangle$  representa al sistema ubicado en una posición fija en una red de  $N$  puntos (con condiciones de contorno periódicas). Sea  $U$  el operador de traslación discreto. Naturalmente este operador debe cumplir que  $U^a|j\rangle = |j+a, \text{mod}(N)\rangle$ . Evidentemente este operador es unitario (mapea una base en otra base) y satisface  $U^N = \mathbb{1}$  y por lo tanto sus autovalores son las raíces  $N$ -ésimas de la unidad. Asimismo, podemos definir un operador  $V$  que traslade en momentos por analogía con el caso continuo: debe ser un operador que sea diagonal en la base  $\mathcal{B}$ , que represente a los autoestados de la posición y también debe cumplir  $V|j\rangle = \exp(i2\pi j/N)|j\rangle$  (o sea, sus autovalores también son las raíces  $N$ -ésimas de la unidad. Tal como lo hicimos en el caso continuo, en este caso discreto el operador de traslación en el espacio de fases puede definirse de modo tal que  $\mathcal{D}(a, b) = U^a V^b \exp(i\pi ab/N)$ . Es interesante ver un ejemplo concreto: Para  $N = 2$  tenemos  $\text{matcalB} = \{|0\rangle, |1\rangle\}$ , el operador de traslación en posición es  $U = \sigma_x$ , el operador de traslación en momento es  $V = \sigma_z$  (donde  $\sigma_i$  son las conocidas matrices de Pauli). Es un ejercicio interesante construir explícitamente estos operadores para  $N = 3$  (prometo solución!). En conclusión para dimensión finita no es posible encontrar operadores posición y momento que satisfagan las relaciones de conmutación canónicas. Sin embargo, podemos definir perfectamente operadores que trasladan en la base de posición y en la base de momento (y es posible demostrar que dichas bases se relacionan una con la otra mediante la transformada de Fourier discreta). Estos operadores de traslación cumplen con las mismas relaciones que en el caso continuo (reemplazando en todas las expresiones  $\hbar \rightarrow 2\pi/N$ ).

4. Para encontrar al representante de las rotaciones en un espacio cualquiera, basta con encontrar tres operadores que satisfagan la relación de conmutación  $[J_j, J_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}J_l$ . Mas adelante veremos una forma constructiva de hacer esto para cualquier dimensión. Pero hay algunas conclusiones que son evidentes a partir de estas relaciones de conmutación. Para dimensión finita es inmediato ver que  $\text{Tr}(J_k) = 0$  para todo  $k = x, y, z$  y por lo tanto todos estos operadores tienen autovalores positivos

y negativos (que suman cero). Hay algunos ejemplos sencillos que es importante estudiar:

- (1) Dimensión  $N = 2$  (spin  $1/2$ ): En este caso es evidente que a partir de las matrices de Pauli podemos construir tres operadores que satisfacen las relaciones requeridas:  $S_k = \frac{\hbar}{2}\sigma_k$  (en efecto, esto es evidente usando que  $[\sigma_j, \sigma_k] = 2i\epsilon_{jkl}\sigma_l$ ). En consecuencia, el representante de las rotaciones en el espacio de dimensión  $N = 2$  es:

$$\mathcal{D}(R_{\vec{e}_n}(\phi)) = \exp(-i\phi\vec{n}\vec{S}) = \exp(-i\vec{n}\vec{\sigma}\phi/2)$$

Est expresión se simplifica notablemente expandiendo la exponencia como suma de potencias pares e impares. Usando la relación  $(\vec{n}\vec{\sigma})^2 = \mathbb{1}$ , es fácil mostrar que en este caso podemos escribir

$$\mathcal{D}(R_{\vec{e}_n}(\phi)) = \cos(\phi/2)\mathbb{1} - i\vec{n}\vec{\sigma} \sin(\phi/2)$$

Al aplicar una rotación modificamos el estado del sistema y por lo tanto también cambian los valores medios de todos los observables. Para ver cómo se modifican los valores medios de las distintas componentes del spin, podemos calcular el operador  $\vec{\sigma}' = \mathcal{D}(R_{\vec{e}_n}(\phi))^\dagger \vec{\sigma} \mathcal{D}(R_{\vec{e}_n}(\phi))$ . En particular, podemos ver cómo cambia la componente  $\vec{e}_x$  del spin cuando realizamos una rotación alrededor del eje  $\vec{e}_z$ . Esto es:

$$\begin{aligned} \sigma'_x &= \mathcal{D}(R_{\vec{e}_z}(\phi))^\dagger \sigma_x \mathcal{D}(R_{\vec{e}_z}(\phi)) \\ \sigma'_x &= (\cos(\phi/2)\mathbb{1} + i\sigma_z \sin(\phi/2))\sigma_x \\ &\quad (\cos(\phi/2)\mathbb{1} - i\sigma_z \sin(\phi/2)) \\ \sigma'_x &= \sigma_x \cos(\phi) - \sigma_y \sin(\phi) \end{aligned}$$

Análogamente, tenemos

$$\sigma'_y = \sin(\phi)\sigma_x + \cos(\phi)\sigma_y.$$

Estas son solamente casos particulares de una relación mas general, que es natural y esperable:

$$\begin{aligned} \vec{\sigma}' &= \mathcal{D}(R_{\vec{e}_n}(\phi))^\dagger \vec{\sigma} \mathcal{D}(R_{\vec{e}_n}(\phi)) \\ \vec{\sigma}' &= R_{\vec{e}_n}(\phi)\vec{\sigma} \end{aligned}$$

- (2) Dimensión  $N = 3$  (spin  $1$ ): En este caso es fácil encontrar tres matrices de  $3 \times 3$  que cumplan con las relaciones de conmutación requeridas (aunque por ahora no resulta obvio que haya una forma sistemática para hacerlo). Veamos un caso particular:

$$\begin{aligned} J_x &= \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, J_y = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{bmatrix}, \\ J_z &= \hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (67)$$

La comprobación de que  $[J_x, J_y] = i\hbar J_z$  puede hacerse de manera inmediata. Asimismo, es inmediato diagonalizar cualquiera de estas tres matrices ya que solamente tenemos que diagonalizar un bloque de  $2 \times 2$  en el cual aparece una matriz de Pauli ( $\sigma_x$  o  $\sigma_y$ ). Por ese mismo motivo, es claro que las tres matrices tienen autovalores  $0$  y  $\pm\hbar$ . A los autoestados de cada una de ellas podemos agruparlos en tres bases de la forma  $\mathcal{B}_k = \{|m_j\rangle, m_j = 0, \pm 1\}$ , con  $k = x, y, z$ . Es interesante notar que la representación de los generadores de las rotaciones en este espacio dada en (??) no es la habitual ya que ninguna de las matrices es diagonal en la base elegida para escribirlas. En efecto, dicha base tiene la siguiente propiedad: el primer vector es autoestado de  $J_x$  con autovalor nulo, el segundo es autoestado de  $J_y$  con autovalor nulo y el tercero es autovector de  $J_z$  con autovalor nulo. Esta base, entonces, podemos denotarla como  $\mathcal{B} = \{|0_x\rangle, |0_y\rangle, |0_z\rangle\}$ . Por lo que dijimos mas arriba, es evidente que la base de autoestados de  $J_z$  es  $\mathcal{B}_z = \{|0_z\rangle, (|0_x\rangle \pm |0_y\rangle)/\sqrt{2}\}$ . La representación (??) hace evidente una propiedad importante de estos operadores: Sus cuadrados conmutan, o sea:  $[J_j^2, J_k^2] = 0$ , para todo par  $j, k$ . En efecto, las expresiones anteriores nos permiten demostrar que los operadores  $\Pi_k = J_k/\hbar$  son proyectores (esto se deduce inmediatamente notando que todos son diagonales en la base  $\mathcal{B}$  que sus autovalores son  $1$  y  $0$ ). En otras palabras, la base  $\mathcal{B}$  es la base de autovectores comunes de  $J_x^2, J_y^2$  y  $J_z^2$ .

Otra propiedad importante que se deduce a partir de la anterior es que  $J_j^3/\hbar^3 = J_j/\hbar$ , etc. En consecuencia, la matriz que representa a una rotación finita alrededor de cualquier eje en este espacio siempre puede escribirse como

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(R_{\vec{e}_n}(\phi)) &= \exp(-i\phi J_n/\hbar) \\ &= \mathbb{1} - i\frac{J_n}{\hbar} \sin \phi \\ &\quad + \frac{J_n^2}{\hbar^2} (\cos \phi - 1). \end{aligned}$$

**Ejercicio:** Usar la expresión anterior para  $\vec{e}_n = \vec{e}_z$  y demostrar que el operador  $\vec{J}' = \mathcal{D}(R_{\vec{e}_n}(\phi))^\dagger \vec{J} \mathcal{D}(R_{\vec{e}_n}(\phi))$  resulta ser simplemente  $\vec{J}' = R_{\vec{e}_z}(\phi)\vec{J}$ . **Solución:** Para demostrar esto vamos a usar las siguientes identidades, que surgen trivialmente de la forma explícita de las matrices

$J_k$  que figuran mas arriba:  $J_z J_x J_z^2 = 0$ ,  $J_z J_x J_z = 0$ ,  $J_z^2 J_x J_z^2 = 0$ ,  $\{J_z^2, J_x\}/\hbar^2 = J_x$ . Entonces, la expresión anterior se reduce a

$$\begin{aligned} J'_x &= (\mathbb{1} + i \frac{J_z}{\hbar} \sin \phi + \frac{J_z^2}{\hbar^2} (\cos \phi - 1)) J_x \\ &\times (\mathbb{1} - i \frac{J_z}{\hbar} \sin \phi + \frac{J_z^2}{\hbar^2} (\cos \phi - 1)) \\ &= J_x \cos \phi - J_y \sin \phi. \end{aligned}$$

##### 5. Algunos ejercicios propuestos.

Los operadores de punto. **Enunciado:** Demostrar que los operadores  $A(q, p) = \mathcal{D}(q, p) R \mathcal{D}^\dagger(q, p) / \pi$  (con  $R$  el operador de reflexión definido como aquel tal que  $R|x\rangle = |-x\rangle$ ) son hermíticos y forman una base ortonormal del espacio de operadores. que actúan sobre el espacio de Hilbert de una partícula (en una dimensión). **Solución:** La hermiticidad es trivial. Para demostrar que son ortonormales hay que demostrar que  $\text{Tr}(A(q, p) A(q', p')) = \delta(q - q') \delta(p - p')$ . Para esto podemos proceder de la siguiente forma, usando lo definición de estos operadores

$$\begin{aligned} \pi^2 \text{Tr}(A(q, p) A(q', p')) &= \text{Tr}(\mathcal{D}(q, p) R \mathcal{D}^\dagger(q, p) \mathcal{D}(q', p') R \mathcal{D}^\dagger(q', p')) \\ &= \text{Tr}(\mathcal{D}(q - q', p - p') R \mathcal{D}^\dagger(q - q', p - p')) \\ &= \text{Tr}(\mathcal{D}(q - q', p - p') \mathcal{D}^\dagger(q' - q, p' - p)) \\ &= 2\pi \delta(q - q') \delta(p - p') \end{aligned}$$

La función de Wigner.

## VII. CLASE 8: EVOLUCIÓN TEMPORAL.

Como vimos mas arriba, el **Postulado 6** de la mecánica cuántica establece que el Hamiltoniano es el generador de la evolución temporal. Esto conduce a que el operador de evolución temporal  $\mathcal{U}(t, t')$  tenga una forma que, para saltos temporales infinitesimales es

$$\mathcal{U}(t + dt, t) = \mathbb{1} - i dt H(t)/\hbar.$$

De aquí se deduce la ecuación de evolución de dicho operador: En efecto, si queremos obtener una ecuación para  $\mathcal{U}(t, 0)$  podemos escribir que  $\mathcal{U}(t + dt, 0) = \mathcal{U}(t + dt, t) \times \mathcal{U}(t, 0)$  y entonces

$$\mathcal{U}(t + dt, 0) - \mathcal{U}(t, 0) = (\mathcal{U}(t + dt, t) - \mathbb{1})\mathcal{U}(t, 0)$$

Por lo tanto, usando la expresión para el operador de evolución entre  $t$  y  $t + dt$  resulta que

$$\mathcal{U}(t + dt, 0) - \mathcal{U}(t, 0) = -idt \frac{H(t)}{\hbar} \mathcal{U}(t, 0)$$

Tomando el límite para  $dt \rightarrow 0$  esta ecuación da lugar a la siguiente ecuación diferencial para el operador de evolución temporal.

$$i\hbar \partial_t \mathcal{U}(t, t') = H(t)\mathcal{U}(t, t')$$

Como vimos, es posible integrar esta ecuación, al menos formalmente, y en algunos casos obtener expresiones sencillas para este operador. En efecto, en el caso general tenemos (tomando  $t' = 0$  lo cual no implica pérdida de generalidad)

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(t, 0) - \mathbb{1} &= \sum_{n \geq 1} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \times \\ &\times \int_0^t dt_n \int_0^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_0^{t_2} dt_1 H(t_n) \dots H(t_1). \end{aligned} \quad (68)$$

Las integrales temporales están anidadas por lo que los tiempos aparecen siempre ordenados de izquierda (el mayor) a derecha (el menor). Esta expresión puede reescribirse de manera compacta definiendo el "producto temporalmente ordenado" de operadores como  $T(A(t_1)A(t_2)) = \theta(t_1 - t_2)A(t_1)A(t_2) + \theta(t_2 - t_1)A(t_2)A(t_1)$ . En efecto, en el integrando, el producto de Hamiltonianos está ordenado temporalmente y por lo tanto podemos escribirlo de ese modo. Una vez hecho esto, este integrando es invariante frente al intercambio del orden entre los tiempos (ya que el producto temporalmente ordenado lo es). Por ese motivo se puede transformar la expresión pasando todas las integrales al dominio  $(0, t)$ . De ese modo obtenemos

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(t, 0) &= \sum_{n \geq 0} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \times \\ &\times \int_0^t dt_n \int_0^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_0^{t_2} dt_1 H(t_n) \dots H(t_1). \end{aligned}$$

$$\mathcal{U}(t, 0) = T\left(\exp\left(-i \int_0^t dt' H(t')/\hbar\right)\right)$$

donde el símbolo  $T(A(t)B(t))$  indica el producto ordenado temporalmente, en el que los operadores aparecen evaluados en tiempos que decrecen de mayor a menor (de izquierda a derecha). Vimos también que esta expresión puede simplificarse en dos casos. En primer lugar, si el Hamiltoniano conmuta a distintos tiempos (o sea, si  $[H(t), H(t')] = 0$  para todo par de tiempos  $t$  y  $t'$ ) entonces el orden temporal no importa y la expresión anterior se reduce a

$$\mathcal{U}(t, 0) = \exp\left(-i \int_0^t dt' H(t')/\hbar\right). \quad (69)$$

Por último, si el Hamiltoniano es independiente del tiempo esto se reduce a la expresión

$$\mathcal{U}(t, 0) = \exp(-i H t/\hbar). \quad (70)$$

Existen otras situaciones en las que es posible obtener la forma explícita del operador de evolución. Por ejemplo, si vale  $[H(t_1), [H(t_2), H(t_3)]] = 0$  existe una expresión compacta que puede demostrarse de manera relativamente sencilla y que resulta ser: COMPLETAR.

Tal como lo describimos mas arriba, el operador  $\mathcal{U}(t, t')$  es el que nos permite conocer el estado a tiempo  $t$ , si conocemos el estado a tiempo  $t'$ . En algún sentido, el operador nos permite actualizar la información que poseemos sobre el sistema. Como vimos, el estado es información (por ejemplo, es la información recogida a partir de los resultados de un conjunto de experimentos que se realiza en el proceso de preparación del sistema). Así que la dinámica actualiza la información. Pero esta no es la única manera de describir la evolución temporal en mecánica cuántica. Veremos dos enfoques, uno debido a Schrodinger y otro debido a Heisenberg. Ambos son formulaciones totalmente equivalentes, pero en cada uno de ellos la evolución temporal de un sistema se describe de manera distinta, siempre apelando al uso del operador de evolución  $\mathcal{U}$ . Pero antes, es importante destacar una de las consecuencias mas notables e importantes de la unitariedad de la evolución temporal.

### A. Consecuencias de la Unitariedad: No es posible clonar un estado cuántico

La mecánica cuántica acepta el hecho de que no es posible medir las propiedades de un sistema físico sin alterar su estado. La medición es, inevitablemente, un proceso de interacción y la mecánica cuántica establece un límite preciso (cuantitativo) sobre la forma en que la interacción generada en el proceso de medición afecta al estado del sistema medido (y establece que esta perturbación nunca puede hacerse infinitamente pequeña). Sin embargo, podría haber una vía de escape para este argumento que nos permitiría obtener toda la información sobre un sistema sin perturbar su estado. En efecto, supongamos que tenemos un sistema preparado en un estado descrito por el vector  $|\phi\rangle$ . Supongamos que

mediante algún procedimiento físico podemos "copiar" (o clonar) el estado. Qué entendemos por eso? Supongamos que tenemos otro sistema preparado inicialmente en algún estado conocido, que arbitrariamente llamaremos  $|0\rangle$ . El estado inicial del conjunto formado por los dos sistemas (a los que denominaremos  $A$  y  $B$  respectivamente) es  $|\Phi\rangle_{AB} = |\phi\rangle_A \otimes |0\rangle_B$ . Realizar una copia del estado  $|\phi\rangle$  quiere decir lograr que el conjunto  $A-B$  evolucione de alguna manera (con algún operador de evolución temporal que denominaremos  $\mathcal{U}_{copy}$ ) de modo tal que el estado inicial se transforme de la siguiente manera

En este procedimiento, el sistema  $B$  pasa a estar en el mismo estado en el que originalmente se encontraba el sistema  $A$ , mientras que  $A$  permanece en el mismo estado que antes. Evidentemente, si esto fuera posible, podríamos realizar múltiples copias del estado  $|\phi\rangle$ , reteniendo el original en el sistema  $A$ . De ese modo, podríamos realizar tantos experimentos como los que quisiéramos sobre las copias, reteniendo el original. En ese caso, sería posible medir sin perturbar! Es notable que este procedimiento de copiado o clonado está prohibido por el postulado de evolución temporal que establece que la evolución es unitaria. Este hecho fue notado por Wootters y Zurek a fines de la década de 1980 y se conoce con el nombre de "no cloning theorem", teniendo grandes consecuencias sobre el procesamiento cuántico de la información.

La demostración de la no clonabilidad cuántica es muy simple. Supongamos que existe el operador de copia  $\mathcal{U}_{copy}$  y lo aplicamos para copiar dos estados distintos  $|\phi\rangle$  y  $|\psi\rangle$ . Para realizar las copias tendremos que aplicar el operador  $\mathcal{U}_{copy}$  a los estados  $|\Phi\rangle_{AB} = |\phi\rangle_A \otimes |0\rangle_B$  y  $|\Psi\rangle_{AB} = |\psi\rangle_A \otimes |0\rangle_B$ . Haciendo esto obtenemos los estados

$$\begin{aligned} |\Phi'\rangle_{AB} &= \mathcal{U}_{copy}|\Phi\rangle_{AB} = |\phi\rangle_A \otimes |\phi\rangle_B \\ |\Psi'\rangle_{AB} &= \mathcal{U}_{copy}|\Psi\rangle_{AB} = |\psi\rangle_A \otimes |\psi\rangle_B \end{aligned}$$

Como consecuencia de que la evolución temporal es unitaria, podemos afirmar que

$$\langle \Phi' | \Psi' \rangle_{AB} = \langle \Phi | \Psi \rangle_{AB}$$

Esta ecuación nos conduce inmediatamente a que la identidad

$$\langle \phi | \psi \rangle^2 = \langle \phi | \psi \rangle \quad (71)$$

debe ser válida para todo par de estados  $|\phi\rangle$  y  $|\psi\rangle$ . Esto es evidentemente absurdo (la identidad solamente vale si los estados son idénticos u ortogonales). El absurdo proviene de suponer la existencia de  $\mathcal{U}_{copy}$ . Por lo tanto, no es posible copiar un estado como consecuencia de la unitariedad de la evolución temporal. Es notable que este postulado sea el que nos rescata del posible colapso de otra de las reglas básicas de la mecánica cuántica: la imposibilidad de medir sin perturbar. es un proceso por el cual para

## B. Representación de Schrodinger

Esta descripción de la evolución temporal es la que, implícitamente estuvimos usando hasta ahora. El sistema se encuentra inicialmente en un estado  $|\phi(0)\rangle$  y la dinámica lo transforma en otro estado a otros tiempos. El operador de evolución nos permite encontrar un estado en función del otro, es decir:

$$|\phi(t)\rangle = \mathcal{U}(t, 0)|\phi(0)\rangle$$

Teniendo en cuenta que hemos demostrado que el operador de evolución temporal satisface una ecuación diferencial sencilla, la expresión anterior nos permite deducir una ecuación diferencial para el estado como función del tiempo. Esta es:

$$i\hbar\partial_t|\phi(t)\rangle = H|\phi(t)\rangle$$

Esta es la famosa ecuación de Schrodinger (escrita en forma un tanto abstracta: es la ecuación que nos dice cómo evoluciona el vector que describe al estado. Esencialmente nos dice que el ritmo de variación del estado está dado por el Hamiltoniano (la energía del sistema). En materias anteriores han aprendido que la ecuación de Schrodinger es una ecuación diferencial en derivadas parciales. Veamos que la ecuación anterior puede escribirse de ese modo. Consideremos una partícula en un potencial central cuyo Hamiltoniano es  $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r)$ . La ecuación anterior puede escribirse en representación posición de la siguiente manera

$$i\hbar\partial_t\langle\vec{r}|\phi(t)\rangle = \langle\vec{r}|H|\phi(t)\rangle$$

La función de onda es  $\phi(\vec{r}, t) = \langle\vec{r}|\phi(t)\rangle$  y el término de la energía cinética puede ser reescrito usando el resultado que obtuvimos anteriormente:  $\langle\vec{r}|\vec{p}^2|\phi(t)\rangle = -\hbar^2\vec{\nabla}^2\phi(\vec{r}, t)$ . De este modo, la ecuación anterior se reduce a su forma originalmente escrita por Schrodinger:

$$i\hbar\partial_t\phi(\vec{r}, t) = \left\{ \frac{-\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(r) \right\}\phi(\vec{r}, t).$$

La solución de la ecuación de Schrodinger en general es una tarea difícil. Para sistemas cuyos Hamiltonianos no dependen del tiempo, la mayor dificultad reside en encontrar los autovectores del Hamiltoniano. En efecto, supongamos que conocemos los vectores  $|\phi_n\rangle$  tales que

$$H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle.$$

Teniendo en cuenta que el Hamiltoniano es hermítico sabemos que los autovalores son reales y los autovectores son ortogonales. Como los estados  $|\phi_n\rangle$  forman una base del espacio de estados, podemos escribir al estado del sistema en cualquier instante como combinación lineal de estos vectores. Es decir,  $|\phi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|\phi_n\rangle$ . Reemplazando esta expresión en la ecuación de Schrodinger y usando la ortogonalidad de los vectores  $|\phi_n\rangle$ , podemos demostrar que la ecuación de Schrodinger se reduce

al siguiente conjunto de ecuaciones diferenciales para los coeficientes  $c_k(t)$ :

$$\dot{c}_k(t) = -i \frac{E_k}{\hbar} c_k(t)$$

Esta ecuación puede resolverse trivialmente y por lo tanto podemos escribir al estado en cualquier instante como

$$|\phi_n(t)\rangle = \sum_k c_k(0) \exp(-i \frac{E_k}{\hbar} t) |\phi_n\rangle$$

Esta es la solución formal de la ecuación de Schrodinger para sistemas cuyo Hamiltoniano es independiente del tiempo. Lo único que necesitamos hacer es escribir el estado inicial como combinación lineal de los autoestados del Hamiltoniano. El estado a tiempo  $t$  tendrá la misma expresión salvo por el hecho de que aparecen las fases  $\exp(-iE_k t/\hbar)$  multiplicando a cada coeficiente  $c_k(0)$ . Es interesante notar que usando esta expresión podemos calcular la evolución temporal del valor medio de cualquier operador  $\hat{A}$ . En efecto, esto resulta ser:

$$\begin{aligned} \langle \phi(t) | \hat{A} | \phi(t) \rangle &= \langle \phi(0) | \mathcal{U}^\dagger(t, 0) \hat{A} \mathcal{U}(t, 0) | \phi(0) \rangle \\ &= \sum_{n,m} c_n(0) c_m^*(0) \exp(-i\omega_{nm}t) \langle \phi_m | \hat{A} | \phi_n \rangle \end{aligned}$$

donde las frecuencias  $\omega_{nm}$ , denominadas "frecuencias de Bohr" del sistema, se definen como  $\omega_{nm} = (E_n - E_m)/\hbar$ .

Cuando el Hamiltoniano depende del tiempo, el problema es técnicamente mas complejo y será discutido (sobre todo apelando a algunos ejemplos importantes) mas adelante en este capítulo. Esta forma de tratar la evolución temporal, usando la representación de Schrodinger, es conceptualmente sencilla y puede usarse para calcular de manera simple y sistemática. Sin embargo, existe otro enfoque que no solamente aporta una visión diferente sino que permite enfocar los problemas desde otra perspectiva y es mas útil para algunas aplicaciones.

### C. Representación de Heisenberg

El objetivo de la mecánica cuántica es realizar predicciones sobre los resultados de los experimentos. Pero, como vimos, las únicas predicciones son de naturaleza estadística y lo que se predice son probabilidades. Estas probabilidades siempre se calculan como valores medios de ciertos operadores (los proyectores sobre el subespacio asociado al autovalor medido). En consecuencia, el objetivo principal de la mecánica cuántica es calcular valores medios de observables en función del tiempo. Tal como dijimos mas abajo, esto puede hacerse apelando a la representación de Schrodinger evolucionando los estados y obteniendo

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle(t) &= \langle \phi(t) | \hat{A} | \phi(t) \rangle \\ &= \langle \phi(0) | \mathcal{U}^\dagger(t, 0) \hat{A} \mathcal{U}(t, 0) | \phi(0) \rangle. \end{aligned}$$

Teniendo en cuenta esta expresión vemos que en realidad es totalmente equivalente atribuir la evolución temporal al vector que representa el estado del sistema (tal como hacíamos en la representación de Schrodinger) a atribuírsela a los operadores. En efecto, dado el operador  $\hat{A}$ , al que llamaremos  $\hat{A}_S$  para indicar que es un operador definido en la representación de Schrodinger, podemos definir un operador  $\hat{A}_H(t)$  que evoluciona en el tiempo de modo tal que

$$\hat{A}_H(t) = \mathcal{U}^\dagger(t, 0) \hat{A}_S \mathcal{U}(t, 0)$$

La diferencia entre  $A_H(t)$  y  $A_S$  es clara. El operador  $A_S$  no tiene dinámica, es decir que no depende del tiempo a menos que exista alguna dependencia explícita con este parámetro (que puede ser introducida por el acoplamiento del sistema con alguna fuente externa que varíe con el tiempo de alguna forma predeterminada). En cambio la dependencia temporal del operador  $A_H(t)$  se origina en el operador de evolución  $\mathcal{U}(t, 0)$  que aparece en la expresión anterior (por supuesto, si  $A_S$  depende explícitamente con el tiempo, esta dependencia explícita también afectará a  $A_H(t)$ ). A partir de la definición del operador  $A_H(t)$  podemos deducir una ecuación diferencial que gobierna su evolución. Esta es:

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{A}_H &= -\mathcal{U}^\dagger H \hat{A}_S \mathcal{U} + \\ &+ \mathcal{U}^\dagger \hat{A}_S H \mathcal{U} + i\hbar \mathcal{U}^\dagger \partial_t \hat{A}_S \mathcal{U} \\ &= [\hat{A}_H(t), H_H(t)] + i\hbar (\partial_t A_S)_H \end{aligned}$$

donde el subíndice  $H$  indica que el operador correspondiente está en la representación de Heisenberg. Cabe acotar aquí que si el Hamiltoniano  $H$  es independiente del tiempo entonces el operador de evolución temporal  $\mathcal{U}(t, 0) = \exp(-iHt/\hbar)$  conmuta con el Hamiltoniano y entonces  $H_H = H$  (o sea, el Hamiltoniano en ambas representaciones es el mismo).

Esta forma de enfocar la evolución temporal (los operadores evolucionan pero el vector que describe al estado permanece inmutable) permite resolver de manera muy simple algunos problemas (que ilustraremos mas abajo). Es, por otra parte, la forma mas simple de tratar la evolución del campo electromagnético (tal como mostraremos mas adelante). Tiene una interpretación física sencilla: el estado es información que se genera al prepararlo. Esa información permanece inmutable (el vector que describe al sistema es siempre el mismo, no evoluciona) mientras que lo que cambian son las propiedades observables del sistema. En cualquier caso estas son cuestiones de interpretación. Ambas representaciones, la de Heisenberg y la de Schrodinger dan lugar a las mismas predicciones físicas. En efecto, en la representación de Heisenberg los valores medios de los operadores se calculan como

$$\langle \hat{A} \rangle(t) = \langle \phi_H | \hat{A}_H(t) | \phi_H \rangle$$

donde el estado en la representación de Heisenberg es  $|\phi_H\rangle = |\phi(0)\rangle$  y el operador es  $\hat{A}_H(t) = \mathcal{U}^\dagger \hat{A}_S \mathcal{U}$ . Ambas

representaciones coinciden en el instante inicial. La expresión anterior, usando la definición de los operadores de Heisenberg es idéntica a la que se obtiene en la representación de Schrodinger.

Es importante tener en cuenta que existe un estrecho vínculo entre ambas representaciones, que nos permite extraer información físicamente relevante. Supongamos que tenemos un estado  $|\psi_H\rangle = |\psi(0)\rangle$  que es autoestado del operador  $\hat{A}_H(t)$  con autovalor  $a_0(t)$ . Entonces, podemos afirmar que si evolucionamos al estado  $|\phi(0)\rangle$  hasta el instante  $t$  (en la representación de Schrodinger), obtendremos un autoestado del operador  $\hat{A}_S$  con el mismo autovalor  $a_0(t)$ . Esto surge simplemente de las siguientes ecuaciones. Si  $|\psi(0)\rangle$  es autoestado de  $\hat{A}_H(t)$  entonces

$$\begin{aligned}\hat{A}_H(t)|\psi(0)\rangle &= a_0(t)|\psi(0)\rangle \\ \mathcal{U}^\dagger \hat{A}_S \mathcal{U} |\psi(0)\rangle &= a_0(t)|\psi(0)\rangle.\end{aligned}$$

de donde se deduce inmediatamente que

$$\hat{A}_S \mathcal{U} |\psi(0)\rangle = a_0(t) \mathcal{U} |\psi(0)\rangle.$$

Es decir, si logramos conocer por algún medio el operador  $\hat{A}_H(t)$  y encontramos sus autovectores entonces sabremos cuales son los estados iniciales que, en la representación de Schrodinger, dan lugar a autoestados de  $\hat{A}_S$  a tiempo  $t$ . Veamos dos aplicaciones inmediatas de esto.

#### D. Ecuaciones de Heisenberg para el oscilador armónico

En este caso el Hamiltoniano es  $H = p^2/2m + m\omega^2 x^2/2$ . Podemos escribir las ecuaciones de Heisenberg para los operadores posición y momento. Para eso tenemos que recordar las relaciones de conmutación  $[p, x^2] = -2i\hbar x$  y  $[x, p^2] = 2i\hbar p$ . En consecuencia, las ecuaciones de Heisenberg son

$$\begin{aligned}\dot{x}_H &= \frac{p_H}{m} \\ \dot{p}_H &= -m\omega^2 x_H\end{aligned}$$

Estas ecuaciones son idénticas a las ecuaciones clásicas de un oscilador y por lo tanto pueden resolverse trivialmente:

$$\begin{aligned}x_H(t) &= x_S \cos(\omega t) + \frac{p_S}{m\omega} \sin(\omega t) \\ p_H(t) &= p_S \cos(\omega t) - m\omega x_S \sin(\omega t)\end{aligned}$$

Notemos que los operadores  $x_H(t)$  y  $p_H(t)$  coinciden con  $x_S$  y  $p_S$  para ciertos tiempos. Por lo tanto, si consideramos un autoestado de  $x_S$ , este estado es autoestado de  $X_H(t)$  para tiempos tales que  $\omega t = n\pi$ . En consecuencia un autoestado de la posición evoluciona en un autoestado de la posición para estos tiempos (el signo del autovalor cambia como  $(-1)^n$ ). Por otra parte, el mismo razonamiento nos permite concluir que un autoestado de la posición evoluciona en un autoestado del momento para

tiempos tales que  $\omega t = (2n+1)\pi/2$ . Estas consecuencias son evidentes a partir del análisis de las ecuaciones de Heisenberg pero demostrarlas usando la representación de Schrodinger es mucho más trabajoso.

#### 1. Teorema de Eherenfest

Usando las ecuaciones de Heisenberg podemos deducir inmediatamente ecuaciones de evolución para los valores medios de cualquier operador. Supongamos que el sistema es una partícula que se mueve en una dimensión con un Hamiltoniano  $H = p^2/2m + V(x)$ . En ese caso, las ecuaciones de Heisenberg son

$$\begin{aligned}\dot{x}_H &= \frac{p_H}{m} \\ \dot{p}_H &= -V'(x_H)\end{aligned}$$

Estas ecuaciones para los operadores son idénticas a las ecuaciones de Hamilton. Sin embargo, cuando tomamos el valor medio en cualquier estado  $|\psi(0)\rangle$  obtenemos las siguientes ecuaciones

$$\begin{aligned}\langle \dot{x}_H \rangle &= \frac{\langle p_H \rangle}{m} \\ \langle \dot{p}_H \rangle &= -\langle V'(x_H) \rangle\end{aligned}$$

Tomando el valor medio de estas ecuaciones es evidente que los valores medios evolucionan en el tiempo siguiendo ecuaciones que son muy similares a las ecuaciones de Hamilton. Sin embargo, hay una diferencia fundamental que aparece para potenciales no lineales en los cuales  $\langle V'(x) \rangle \neq V'(\langle x \rangle)$ . En estos potenciales los valores medios no siguen las ecuaciones de Hamilton. Se pueden preparar estados para los cuales la función de onda está suficientemente localizada de modo tal que el valor medio del potencial es aproximadamente igual al potencial evaluado en el valor medio de la posición. Pero esta identidad tenderá a dejar de ser válida para tiempos largos. El tiempo para el cual los valores medios cuánticos se desvían de sus contrapartes clásicas es denominado tiempo de Eherenfest. Comentarios tiempo de Eherenfest. Caos.

#### E. Spin 1/2 en un campo magnético

Consideremos una partícula de spin 1/2 que evoluciona en un campo magnético constante, que apunta en la dirección del versor  $\vec{e}_n$ . En ese caso, el Hamiltoniano es  $H = \hbar\Omega \vec{e}_n \cdot \vec{\sigma}$ . Podemos encontrar las ecuaciones de Heisenberg para las tres componentes del vector de spin. Es fácil ver que estas ecuaciones son:

$$\dot{\vec{S}} = \vec{\Omega} \wedge \vec{S}$$

donde  $\vec{\Omega} = \omega \vec{e}_n$ . La interpretación de estas ecuaciones es muy sencilla: El vector  $\vec{S}$  precece alrededor de la

dirección  $\vec{e}_n$  con una velocidad angular  $\Omega$ . La componente de  $\vec{S}$  en la dirección de  $\vec{e}_n$  se conserva y las componentes perpendiculares rotan con velocidad angular  $\Omega$ . Tomando valores medios en esta ecuación obtenemos inmediatamente las ecuaciones de evolución para las componentes del vector de Bloch, que se comporta de manera idéntica a la descrita por las ecuaciones anteriores (el vector de Bloch, que representa al estado en una esfera de radio unidad, precede alrededor de la dirección  $\vec{e}_n$ ).

## F. Representación de Interacción

En la mayoría de los casos la ecuación de Schrodinger no puede ser resuelta exactamente. Ejemplos típicos de este tipo son casos en los que no resulta posible encontrar expresiones analíticas para los autoestados del Hamiltoniano. También surgen dificultades para resolver esta ecuación (al menos siguiendo la estrategia descrita en la sección anterior) con Hamiltonianos que dependen explícitamente del tiempo. Veremos aquí que en muchos casos resulta muy útil usar una descripción de la evolución temporal, llamada "representación de interacción", que conceptualmente es un híbrido entre las representaciones de Heisenberg y Schrodinger. Este enfoque resulta útil cuando tenemos un sistema que evoluciona con un Hamiltoniano de la forma  $H = H_0 + V_{int}$ , donde  $H_0$  es un Hamiltoniano cuya solución (exacta o aproximada) es conocida y  $V_{int}$  es un término (habitualmente llamado "hamiltoniano de interacción" que describe la interacción del sistema descrito por  $H_0$  con otros sistemas, o términos de interacción -que pueden depender del tiempo o no- entre las componentes del sistema descrito por  $H_0$ ).

Consideremos el operador de evolución  $\mathcal{U}_0(t, 0)$  asociado al Hamiltoniano  $H_0$ . Este operador satisface la ecuación  $i\hbar\partial_t\mathcal{U}_0 = H_0\mathcal{U}_0$ . Por el contrario, el operador de evolución completo satisface la ecuación  $i\hbar\partial_t\mathcal{U} = H\mathcal{U}$ . Supongamos que el estado del sistema en un dado instante  $t = 0$  es  $|\phi_S(t)\rangle$ . Definiremos al estado del sistema en la representación de interacción, al que denotaremos  $|\phi_I(t)\rangle$ , como aquel que evoluciona de acuerdo a la ecuación

$$|\phi_I(t)\rangle = \mathcal{U}_0^\dagger \mathcal{U} |\phi_S(0)\rangle. \quad (72)$$

Es decir, el estado  $|\phi_I(t)\rangle$  se obtiene a partir del estado del sistema en la representación de Schrodinger  $|\phi_S(t)\rangle$  descontando la evolución asociada al Hamiltoniano  $H_0$ . Por otra parte, para todo operador  $\hat{A}_S$  definiremos su representación de interacción de la siguiente manera

$$\hat{A}_I(t) = \mathcal{U}_0^\dagger \hat{A}_S \mathcal{U}_0. \quad (73)$$

Es decir, los operadores en la representación de interacción evolucionan tal como lo harían en la representación de Heisenberg si el Hamiltoniano fuera  $H_0$ . Es evidente que si tomamos el valor medio de cualquier op-

erador  $A_I(t)$  en el estado  $|\phi_I(t)\rangle$ , obtenemos

$$\begin{aligned} \langle \phi_I(t) | \hat{A}_I(t) | \phi_I(t) \rangle &= \langle \phi_S(t) | \hat{A}_S | \phi_S(t) \rangle \\ &= \langle \phi_H(t) | \hat{A}_H(t) | \phi_H(t) \rangle \end{aligned}$$

El estado en la representación de interacción satisface una ecuación muy sencilla que se deduce a partir de su definición. En efecto,

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t |\phi_I(t)\rangle &= \dot{\mathcal{U}}_0^\dagger \mathcal{U} |\phi_S(0)\rangle + \mathcal{U}_0^\dagger \dot{\mathcal{U}} |\phi_S(0)\rangle \\ &= \mathcal{U}_0^\dagger (H - H_0) \mathcal{U} |\phi_S(0)\rangle \\ &= \mathcal{U}_0^\dagger V_{int} \mathcal{U}_0 \mathcal{U}_0^\dagger \mathcal{U} |\phi_S(0)\rangle \\ &= (V_{int})_I(t) |\phi_I(t)\rangle \end{aligned}$$

Entonces, el estado en la representación de interacción evoluciona solamente movido por el término de interacción. Esta representación resulta sumamente útil para estudiar problemas dependientes del tiempo, entre los cuales veremos un ejemplo muy importante a continuación.

## G. Oscilaciones de Rabi (se da en la teórica)

Consideraremos un sistema de dos niveles (una partícula de spin 1/2 o un átomo de dos niveles). El Hamiltoniano del sistema es

$$H_0 = E_e |e\rangle\langle e| + E_g |g\rangle\langle g|.$$

La frecuencia de Bohr del sistema es  $\omega_{eg} = (E_e - E_g)/\hbar$ . El sistema es irradiado por un campo electromagnético de frecuencia  $\omega$ . La interacción entre el átomo y el campo se modela mediante el Hamiltoniano

$$H_{int} = \hbar\Omega |e\rangle\langle g| \exp(-i\omega t) + h.c.$$

Hay diversas situaciones de interés físico que se describen de este modo. Mencionaremos solamente dos de ellas. En primer lugar, el sistema de dos niveles puede ser el asociado al espín nuclear de ciertos elementos (como el hidrógeno, el  $C_{13}$ , etc). En ese caso el Hamiltoniano  $H_0$  está generado por un campo magnético intenso orientado en alguna dirección (que llamaremos  $\vec{e}_z$ ). Es decir,  $H_0 = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ , que puede reescribirse como  $H_0 = \hbar\omega_{eg}(|e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|)/2$ . Esto es lo que ocurre en un resonador magnético en el que se aprovecha el fenómeno que se denomina RMN (resonancia magnética nuclear) que podemos describir con el modelo en cuestión. En ese caso, la diferencia de energías entre el nivel excitado y el fundamental es tal que la frecuencia de Bohr está en el rango de las micro ondas. Por ejemplo, para un espectrómetro con un imán de 11 Tesla (como el que existen en la FCEyN) esa frecuencia es de 500 MHz (las frecuencias de resonancia de otros espines nucleares son menores ya que son inversamente proporcionales a la masa del isótopo en cuestión). En este caso, el campo externo es generado por bobinas que producen un campo

magnético variable en el plano perpendicular al campo  $\vec{B}$ . Para el caso en que el campo de radio frecuencias sea  $\vec{B}_{rf}(t) = B_0(\cos \omega t \vec{e}_x + \sin \omega t \vec{e}_y)$  el Hamiltoniano de interacción resulta ser tal como el que describimos mas arriba.

Otra aplicación importante es la que veremos mas adelante cuando estudiemos la interacción entre átomos y fotones. En ese contexto, el sistema de dos niveles representa a un subespacio de todos los niveles atómicos cuya dimensión es igual a dos. Estos niveles son los únicos que son explorados (poblados) en el experimento y por ese motivo el átomo puede aproximarse por un sistema de dos niveles. En la aplicación que tenemos en vista, estos dos niveles serán estados altamente excitados asociados a átomos de Rydberg y son tales que la frecuencia de Bohr también está en el rango de las micro ondas. El problema que estamos estudiando es relevante para describir lo que sucede con un átomo de estas características que ingresa a un dispositivo que se denomina "zona de Ramsey: en el cual interactúa con un campo electromagnético (clásico) con el que se acopla por vía del dipolo eléctrico. El campo oscila en el rango de las micro ondas y, como veremos, el Hamiltoniano anterior también es una buena descripción de este problema.

Veremos cómo resolver la dinámica del sistema usando la representación de interacción (también podremos obtener el estado en la representación de Schrodinger). Lo interesante es que veremos que la interacción con el campo induce un comportamiento oscilante del sistema, cuyo estado oscila entre  $|e\rangle$  y  $|g\rangle$ . En efecto, podremos obtener una fórmula simple para la probabilidad de encontrar al sistema en cualquiera de estos estados y veremos que la misma depende fuertemente de la relación entre la frecuencia del forzado ( $\omega$ ) y la frecuencia de Bohr del sistema.

Para resolver el problema usaremos la representación de interacción, usando  $U_0 = \exp(-iH_0t/\hbar)$ . El Hamiltoniano de interacción en la representación de interacción es

$$\begin{aligned}\tilde{H}_{int} &= U_0^\dagger H_{int} U_0 \\ \tilde{H}_{int} &= \hbar\Omega|e\rangle\langle g| \exp(i\delta t) + h.c.\end{aligned}$$

donde definimos  $\delta = (E_e - E_{g_1})/\hbar - \omega$  como la desintonía entre el campo y el átomo (o el espín). La desintonía indica cuán distinta es la frecuencia del campo de la frecuencia de Bohr que caracteriza la transición entre los estados  $|e\rangle$  y  $|g\rangle$ . Para deducir la expresión anterior basta con usar la identidad

$$\mathcal{U}_0^\dagger |e\rangle\langle g| \mathcal{U}_0 = \exp(i(E_e - E_g)t/\hbar)$$

Si escribimos el estado en la representación de interacción como combinación lineal de los dos niveles

$$\begin{aligned}|\tilde{\Psi}(t)\rangle &= U_0^\dagger |\Psi(t)\rangle, \\ &= \alpha(t)|e\rangle + \beta(t)|g\rangle.\end{aligned}$$

La ecuación de evolución del estado en la representación de interacción es

$$i\hbar\partial_t|\tilde{\Psi}(t)\rangle = \tilde{H}_{int}(t)|\tilde{\Psi}(t)\rangle,$$

la ecuación de Schrodinger en la representación de interacción ( $i\hbar\partial_t|\tilde{\Psi}(t)\rangle = \tilde{H}_{int}|\tilde{\Psi}(t)\rangle$ ) se reduce al siguiente sistema de ecuaciones diferenciales para  $\alpha(t)$  y  $\beta(t)$ :

$$\begin{aligned}\dot{\alpha} &= -i\Omega\beta e^{i\delta t}, \\ \dot{\beta} &= -i\Omega\alpha e^{-i\delta t}.\end{aligned}$$

Este sistema de dos ecuaciones diferenciales de primer orden es equivalente a la siguiente ecuación de segundo orden para  $\alpha$ :

$$\ddot{\alpha} + \Omega^2\alpha - i\delta\dot{\alpha} = 0. \quad (74)$$

Proponiendo soluciones de la forma  $\alpha(t) \propto \exp(i\lambda t)$ , resulta que  $\lambda$  debe ser tal que

$$\lambda_{\pm} = \frac{\delta}{2} \pm \sqrt{\frac{\delta^2}{4} + \Omega^2}. \quad (75)$$

En consecuencia:

$$\alpha(t) = \exp(i\delta t/2)(A \exp(i\Omega' t) + B \exp(-i\Omega' t))$$

donde  $\Omega' = \sqrt{\frac{\delta^2}{4} + \Omega^2}$  y tanto  $A$  como  $\phi$  son dos constantes que dependen de las condiciones iniciales. Una vez obtenido  $\alpha(t)$  es inmediato calcular  $\beta$  a partir de la ecuación  $\dot{\alpha} = -i\Omega\beta \exp(i\delta t)$ . El resultado es

$$\begin{aligned}\beta(t) &= -\frac{\delta}{2\Omega} \exp(-i\delta t/2)(A \exp(i\Omega' t) + B \exp(-i\Omega' t)) + \\ &\quad - \frac{\Omega'}{\Omega} \exp(-i\delta t/2)(A \exp(i\Omega' t) - B \exp(-i\Omega' t))\end{aligned}$$

Para encontrar la forma completa del operador de evolución temporal (como matriz de  $2 \times 2$  basta con analizar la evolución del estado para una condición inicial particular. En efecto, sabemos que el operador de evolución es tal que

$$\begin{aligned}|\tilde{\psi}(t)\rangle &= \mathcal{U}|\tilde{\psi}(0)\rangle \\ \begin{pmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} U_1 & U_2 \\ -U_2^* & U_1^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha(0) \\ \beta(0) \end{pmatrix},\end{aligned}$$

Donde  $U_1$  y  $U_2$  son dos funciones del tiempo que determinan la evolución (para escribir esto, hemos usado la forma general de una matriz unitaria de  $2 \times 2$  que tiene que ser tal que las filas y columnas sean las componentes de vectores ortonormales, lo que implica también que  $|U_1|^2 + |U_2|^2 = 1$ ). Entonces, el problema se reduce a encontrar estas dos funciones, para lo cual basta con analizar el caso con condiciones iniciales  $\alpha(0) = 0$  y  $\beta(0) = 1$ , ya que de ese modo obtenemos directamente dichas funciones.

Esta condición inicial representa el caso en el cual el estado inicial es  $|\Psi(0)\rangle = |g\rangle$ , para el cual  $\alpha(0) = 0$ . En

ese caso debe cumplirse que  $A + B = 0$ . Además,  $\dot{\alpha}(0) = -i\Omega$  ya que  $\beta(0) = 1$ . Por consiguiente,  $A = -\Omega/2\Omega'$  y entonces

$$\begin{aligned}\alpha(t) &= -i\frac{\Omega}{\Omega'} \exp(i\delta t/2) \sin(\Omega't). \\ \beta(t) &= i\frac{\delta}{2\Omega'} \exp(-i\delta t/2) \sin(\Omega't) + \\ &\quad + \exp(-i\delta t/2) \cos(\Omega't)\end{aligned}$$

Antes de escribir el operador de evolución completo, conviene interpretar el resultado que acabamos de obtener. En efecto, de la expresión anterior surge que la probabilidad de encontrar al átomo en el estado excitado es

$$\text{Prob}(E = E_e) = \frac{1}{1 + \frac{\delta^2}{4\Omega'^2}} \sin^2(\Omega't). \quad (76)$$

La interpretación de este resultado es interesante e importante: La población del nivel excitado oscila con una amplitud cuyo valor es  $\text{Prob}(E_e)|_{max} = 1/(1 + \frac{\delta^2}{4\Omega'^2})$ . Esta amplitud alcanza su máximo valor para el caso resonante, cuando  $\delta = 0$ . En ese caso la amplitud es igual a 1. Por lo tanto, para tiempos  $t_j = j\pi/\Omega'$  el estado del sistema es  $|\tilde{\Psi}(t_j)\rangle = |e\rangle$  (a menos de una fase). Para el caso en el que  $\delta \gg 2\Omega$  las oscilaciones tienen una amplitud muy pequeña y por lo tanto el átomo tiene una probabilidad muy baja de pasar al estado  $|e\rangle$ . En efecto,  $\text{Prob}(E_e, t) \approx 1 - \Omega^2 \sin^2(\Omega't)/4\delta^2$ .

Para tiempos intermedios, el estado  $|\hat{\Psi}\rangle$  es una superposición de  $|e\rangle$  y  $|g\rangle$ . Por ejemplo, para tiempos  $T = \pi/4\Omega'$  las expresiones anteriores se reducen a

$$\begin{aligned}\alpha(T) &= -i\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{e^{i\frac{\delta\pi}{2\Omega'}}}{\sqrt{1 + \frac{\delta^2}{4\Omega'^2}}} \\ \beta(T) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{e^{-i\frac{\delta\pi}{2\Omega'}}}{\sqrt{1 + \frac{\delta^2}{4\Omega'^2}}} \left( i\frac{\delta}{2\Omega} + \frac{\Omega'}{\Omega} \right)\end{aligned} \quad (77)$$

Nuevamente, el caso resonante es particularmente simple ya que se tiene  $\alpha(T) = -i/\sqrt{2}$  y  $\beta(T) = 1/\sqrt{2}$ . Por lo tanto, en esos instantes el estado es una superposición de ambos autoestados de  $H_0$  con igual peso. Las oscilaciones que se observan para el caso resonante se denominan oscilaciones de Rabi y tienen múltiples aplicaciones.

Por último, resulta interesante obtener las expresiones para  $\alpha(t)$  y  $\beta(t)$  en el límite de alta desintonía. En ese caso (al orden mas bajo en el desarrollo en potencias de  $\Omega/\delta$ ) tenemos

$$\begin{aligned}\alpha(t) &\approx 0 \\ \beta(t) &\approx \exp(-i\delta t/2 + i\Omega't) \\ &\approx \exp(i\Omega^2 t/\delta).\end{aligned}$$

Como dijimos mas arriba, de las expresiones anteriores podemos encontrar el operador de evolución completo, que nos permitirá evolucionar el estado en el caso mas

general (para cualquier condición inicial). En efecto, dicho operador tiene una forma matricial  $\mathcal{U} = \begin{pmatrix} U_1 & U_2 \\ -U_2^* & U_1^* \end{pmatrix}$  donde las funciones  $U_1$  y  $U_2$  son

$$\begin{aligned}U_1(t) &= e^{i\frac{\delta t}{2}} \left( \cos \Omega't - i\frac{\Omega}{\Omega'} \sin \Omega't \right) \\ U_2(t) &= -i\frac{\Omega}{\Omega'} e^{i\frac{\delta t}{2}} \sin \Omega't\end{aligned}$$

Es particularmente sencillo el caso resonante. Cuando la desintonía  $\delta$  se anula, tenemos que

$$\mathcal{U}(t) = \begin{pmatrix} \cos \Omega t & -i \sin \Omega t \\ -i \sin \Omega t & \cos \Omega t \end{pmatrix}$$

Esto implica que la evolución es simplemente una rotación alrededor del eje  $\vec{e}_x$  del espacio interno del sistema de dos niveles efectivo. Es fácil demostrar que introduciendo una fase no nula en el campo externo, es posible lograr que la evolución sea una rotación alrededor de cualquier eje del plano  $\vec{e}_x - \vec{e}_y$ .

## H. Oscilaciones de Raman

**Enunciado:** Considere un átomo de tres niveles cuyo Hamiltoniano es

$$H_0 = E_e |e\rangle\langle e| + E_{g_1} |g_1\rangle\langle g_1| + E_{g_2} |g_2\rangle\langle g_2|.$$

El átomo es irradiado por dos láseres de frecuencias  $\omega_1$  y  $\omega_2$ . Uno de los láseres acopla los estados  $|e\rangle$  y  $|g_1\rangle$  mientras que el otro acopla los niveles  $|e\rangle$  y  $|g_2\rangle$ . Los niveles  $|g_1\rangle$  y  $|g_2\rangle$  no están acoplados directamente por ningún láser. El Hamiltoniano de interacción entre el átomo y los láseres puede aproximarse como

$$\begin{aligned}H_{int} &= \hbar\Omega_1 |e\rangle\langle g_1| \exp(-i\omega_1 t) \\ &\quad + \hbar\Omega_2 |e\rangle\langle g_2| \exp(-i\omega_2 t) + h.c.\end{aligned}$$

Los láseres tienen la misma desintonía, es decir, son tales que  $\delta = (E_e - E_{g_1})/\hbar - \omega_1 = (E_e - E_{g_2})/\hbar - \omega_2$ .

1) Resuelva la ecuación de Schrodinger y encuentre el estado del sistema  $|\Psi(t)\rangle$  (sugerencia, use la representación de interacción y, antes de hacer cuentas, reduzca este problema al problema anterior (oscilaciones de Rabi entre dos niveles)). 2) Considere que en  $t = 0$  el estado es  $|\Psi(0)\rangle = |g_1\rangle$ . Calcule la probabilidad de encontrar al sistema en los tres autoestados de  $H_0$  para tiempos posteriores. Analice exhaustivamente el caso en el que ambos láseres tienen igual intensidad ( $\Omega_1 = \Omega_2 = \Omega$ ) y la desintonía  $\delta$  es alta  $\delta \gg \Omega$  (efecto Raman). Demuestre que el sistema oscila coherentemente entre los niveles  $|g_1\rangle$  y  $|g_2\rangle$  tal como lo haría si estos niveles estuvieran acoplados directamente por un láser. Encuentre la frecuencia de oscilación.

**Solución:** Escribimos  $H_{int}$  en la representación de interacción con  $U_0 = \exp(-iH_0t/\hbar)$ . El resultado es:

$$\begin{aligned}\tilde{H}_{int} &= \tilde{H}_{int} = U_0^\dagger H_{int} U_0 \\ &= \hbar\Omega_1|e\rangle\langle g_1| \exp(i\delta t) \\ &\quad + \hbar\Omega_2|e\rangle\langle g_2| \exp(i\delta t) + h.c.\end{aligned}$$

Es evidente que este Hamiltoniano puede escribirse como

$$\tilde{H}_{int} = \hbar\tilde{\Omega}|e\rangle\langle\chi| \exp(i\delta t) + h.c., \quad (78)$$

donde definimos el estado  $|\chi\rangle$  se define como

$$|\chi\rangle = \frac{1}{\tilde{\Omega}}(\Omega_1|g_1\rangle + \Omega_2|g_2\rangle)$$

y  $\tilde{\Omega} = \sqrt{\Omega_1^2 + \Omega_2^2}$ . Esto implica que este problema se reduce al de las oscilaciones de Rabi entre  $|\chi\rangle$  y  $|e\rangle$  (o sea, los dos láseres combinados inducen oscilaciones de Rabi entre los estados  $|e\rangle$  y  $|\chi\rangle$ ). Cabe destacar que el espacio de estados del átomo de tres niveles tiene una base formada por los vectores  $|e\rangle$ ,  $|\chi\rangle$  y  $|\chi_\perp\rangle$  donde  $|\chi_\perp\rangle$  es un estado ortogonal a los dos primeros. Este estado resulta ser:

$$|\chi_\perp\rangle = \frac{1}{\tilde{\Omega}}(\Omega_2|g_1\rangle - \Omega_1|g_2\rangle). \quad (79)$$

Estos estados toman una forma particularmente simple cuando  $\Omega_1 = \Omega_2 = \Omega$  ya que en ese caso se obtiene  $|\chi\rangle = (|g_1\rangle + |g_2\rangle)/\sqrt{2}$  y  $|\chi_\perp\rangle = (|g_1\rangle - |g_2\rangle)/\sqrt{2}$ .

Escribiendo el estado del sistema en la representación de interacción) como

$$|\tilde{\Psi}(t)\rangle = \alpha(t)|e\rangle + \beta(t)|\chi\rangle + \gamma(t)|\chi_\perp\rangle,$$

podemos usar la ecuación de Schroedinger para encontrar ecuaciones diferenciales para  $\alpha(t)$ ,  $\beta(t)$  y  $\gamma(t)$ . Es fácil ver que  $\dot{\gamma}(t) = 0$  y que  $\alpha(t)$  y  $\beta(t)$  satisfacen ecuaciones idénticas a las obtenidas en el caso de las oscilaciones de Rabi (reemplazando  $\Omega$  por  $\tilde{\Omega}$ ). La solución de estas ecuaciones puede copiarse de lo obtenido mas arriba. Por lo tanto, podemos escribir que  $\gamma(t) = \gamma(0)$  y que  $\alpha(t) = C \exp(i\delta t/2) \sin(\tilde{\Omega}'t + \phi)$  donde  $\tilde{\Omega}' = \sqrt{\frac{\delta^2}{4} + \tilde{\Omega}^2}$  (donde tanto  $A$  como  $\phi$  dependen de las condiciones iniciales). Por su parte  $\beta(t) = i\dot{\alpha} \exp(-i\delta t)/\tilde{\Omega}$ .

Analizaremos en caso en el que el estado inicial es  $|\tilde{\Psi}(0)\rangle = |g_1\rangle = (\Omega_1|\chi\rangle + \Omega_2|\chi_\perp\rangle)/\tilde{\Omega}$ , En ese caso las condiciones iniciales son:

$$\alpha(0) = 0, \quad \beta(0) = \Omega_1/\tilde{\Omega}, \quad \gamma(0) = \Omega_2/\tilde{\Omega}.$$

Estas condiciones implican que  $\phi = 0$ , que  $\dot{\alpha}(0) = -i\Omega_1$  y que  $\gamma(0) = \Omega_2/\tilde{\Omega}$ . En consecuencia la constante  $C$  es simplemente  $C = -i\Omega_1/\tilde{\Omega}'$ . Por consiguiente tenemos

que

$$\begin{aligned}\alpha(t) &= -i\frac{\Omega_1}{\tilde{\Omega}'} \exp(i\delta t/2) \sin(\tilde{\Omega}'t) \\ \beta(t) &= \frac{\Omega_1}{\tilde{\Omega}} \exp(-i\delta t/2) \times \\ &\quad \times \left( i\frac{\delta}{2\tilde{\Omega}'} \sin(\tilde{\Omega}'t) + \cos(\tilde{\Omega}'t) \right) \\ \gamma(t) &= \frac{\Omega_2}{\tilde{\Omega}}\end{aligned}$$

En el caso en que  $\Omega_1 = \Omega_2 = \Omega$  esto implica que  $\gamma = \beta(0) = 1/\sqrt{2}$ .

El caso mas interesante para analizar es aquel en el que los láseres estén muy fuera de la resonancia, lo que implica que  $\delta$  es mucho mayor que  $\Omega_1$  y  $\Omega_2$  (recordemos que en ese caso las oscilaciones de Rabi estaban suprimidas). En efecto, en ese caso  $\tilde{\Omega}' \approx \delta/2$ . Entonces, la amplitud de la oscilacion de  $\alpha(t)$  es despreciable (dicha amplitud es  $\Omega_1/\tilde{\Omega}' \approx \Omega_1/\delta \ll 1$ . En consecuencia, la probabilidad de encontrar al átomo en el estado excitado  $|e\rangle$  es siempre despreciable. Este nivel nunca está poblado, aunque juega un rol fundamental en el mecanismo que describimos.

Lo interesante es lo que sucede, en este límite, con los otros niveles. De las ecuaciones anteriores se deduce que

$$\begin{aligned}\beta(t) &\approx \frac{\Omega_1}{\tilde{\Omega}} \exp(i\tilde{\Omega}^2 t/\delta) \\ \gamma(t) &= \frac{\Omega_2}{\tilde{\Omega}}\end{aligned}$$

Por lo tanto, el estado del sistema es  $|\Psi_I(t)\rangle = \beta(t)|\chi\rangle + \gamma(0)|\chi_\perp\rangle$  que, usando los resultados anteriores no es otra cosa que

$$|\Psi_I(t)\rangle = \frac{1}{\tilde{\Omega}}(\Omega_1 e^{-i\tilde{\Omega}^2 t/2\delta} |\chi\rangle + \Omega_2 |\chi_\perp\rangle)$$

Como es obvio, este estado puede escribirse como

$$\begin{aligned}|\Psi_I(t)\rangle &= \frac{1}{\tilde{\Omega}^2}((\Omega_1^2 e^{-i\tilde{\Omega}^2 t/\delta} + \Omega_2^2)|g_1\rangle \\ &\quad - \Omega_1\Omega_2(1 - e^{-i\tilde{\Omega}^2 t/\delta}))\end{aligned}$$

Es decir, el estado cuántico oscila coherentemente entre los niveles  $|g_1\rangle$  y  $|g_2\rangle$  a pesar de que estos niveles no están directamente acoplados por ningún láser. La frecuencia de la oscilación es  $\tilde{\Omega}^2/2\delta$ . En el caso particularmente simple en el que la intensidad de los dos laseres es la misma, tenemos que  $\Omega_1 = \Omega_2 = \Omega$  y  $\tilde{\Omega}^2 = 2\Omega$ . Entonces el estado resulta ser

$$|\Psi_I(t)\rangle = e^{-i\Omega^2 t/\delta} \left( \cos\left(\frac{\Omega^2}{\delta}t\right)|g_1\rangle - i \sin\left(\frac{\Omega^2}{\delta}t\right)|g_2\rangle \right) \quad (80)$$

Tal como mencionamos mas arriba, el estado oscila coherentemente entre  $|g_1\rangle$  y  $|g_2\rangle$  con una frecuencia  $\Omega^2/2\delta$ . El estado  $|e\rangle$  juega un rol interesante: es el intermediario gracias al cual la oscilación entre los dos estados que inicialmente están desacoplados se acoplan efectivamente. Es un estado virtual que nunca está poblado pero sin el cual la oscilación de Raman sería imposible.

### VIII. CLASE 9: EL OSCILADOR ARMÓNICO.

El oscilador armónico es uno de los sistemas favoritos de los físicos por varios motivos. Sin duda, uno de ellos es que este sistema es resoluble analíticamente en el caso clásico y también en el caso cuántico. Además, tiene múltiples aplicaciones: un oscilador armónico mecánico (una partícula en un pozo cuadrático) sirve para describir aproximadamente el movimiento de un sistema cerca de su posición de equilibrio. Pero la naturaleza, sorprendentemente, nos provee de un oscilador armónico ideal: la luz. Como veremos, el campo electromagnético puede ser descrito como una colección de un número infinito de osciladores armónicos (dos para cada vector de onda  $\vec{k}$ ). En este capítulo revisaremos las propiedades del oscilador armónico cuántico. Pero lo haremos introduciendo un método algebraico que nos permitirá encontrar tanto los autovalores como los autovectores del Hamiltoniano de manera directa, sin resolver ninguna ecuación diferencial.

El Hamiltoniano del oscilador armónico es

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2$$

Este Hamiltoniano puede reescribirse de la siguiente manera, haciendo aparecer "artificialmente" la constante de Planck  $\hbar$ . En efecto, con la constante de Planck y las constantes que aparecen en el Hamiltoniano podemos definir una escala de energía  $E_0 = \hbar\omega$ , una escala de longitudes  $\sigma = \sqrt{\hbar/m\omega}$  y una de momentos  $\sigma_p = \hbar/\sigma = \sqrt{\hbar m\omega}$ . En términos de estas variables el Hamiltoniano se puede reescribir de la siguiente manera

$$H = \hbar\omega \frac{1}{2}(\tilde{p}^2 + \tilde{x}^2)$$

donde la posición y momento adimensionales son  $\tilde{x} = x/\sigma$  y  $\tilde{p} = p\sigma/\hbar$ . En el caso cuántico, la posición y el momento son operadores y también lo son las variables adimensionales  $\tilde{x}$  y  $\tilde{p}$ . La relación de conmutación canónica  $[x, p] = i\hbar\mathbb{1}$  se traduce para las variables adimensionales es  $[\tilde{x}, \tilde{p}] = i\mathbb{1}$ .

#### A. Operadores de creación y destrucción

A partir de las variables adimensionales podemos definir nuevos operadores de la siguiente manera

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{x} + i\tilde{p}), \quad (a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{x} - i\tilde{p}))$$

Obviamente estas relaciones pueden invertirse y expresar posición y momento en términos de  $a$  y  $a^\dagger$ :

$$\tilde{x} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger), \quad \tilde{p} = \frac{1}{\sqrt{2}i}(a - a^\dagger). \quad (81)$$

Las relaciones de conmutación canónicas implican que  $a$  y  $a^\dagger$  satisfacen

$$[a, a^\dagger] = a a^\dagger - a^\dagger a = \mathbb{1}.$$

Asimismo, el Hamiltoniano se reescribe en función de estos operadores como

$$H = \hbar\omega \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right).$$

Por cierto, esta ecuación puede deducirse fácilmente notando que

$$\begin{aligned} \tilde{x}^2 &= \frac{1}{2}(a^2 + a^{\dagger 2} + a a^\dagger + a^\dagger a) \\ \tilde{p}^2 &= \frac{1}{2}(-a^2 - a^{\dagger 2} + a a^\dagger + a^\dagger a), \end{aligned}$$

y aplicando la relación  $a a^\dagger + a^\dagger a = 2 a^\dagger a + 1$ , que se deduce directamente de la relación de conmutación  $[a, a^\dagger] = 1$ .

En lo que sigue veremos como encontrar autovalores y autovectores de  $H$ , es decir, resolver es siguiente sistema:

$$H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$$

En particular, mostraremos que  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ , con  $n \geq 0$  y presentaremos un método para construir los autoestados  $|\phi_n\rangle$ .

#### B. Autovalores y autovectores del Hamiltoniano

Como vimos, el Hamiltoniano puede escribirse como

$$H = \hbar\omega \left( \hat{N} + \frac{1}{2} \right), \quad \text{con } \hat{N} = a^\dagger a. \quad (82)$$

En lo que sigue mostraremos que los autovalores del operador  $\hat{N}$  son números enteros  $n \geq 0$ . Para esto va a ser conveniente utilizar las siguientes relaciones de conmutación, cuya validez se deduce fácilmente:

$$[\hat{N}, a] = -a \quad \text{y} \quad [\hat{N}, a^\dagger] = a^\dagger \quad (83)$$

El espectro de  $\hat{N}$  se puede obtener con los siguientes pasos

1. Todos los autovalores de  $\hat{N}$  son reales y no negativos: Esto se deduce del hecho de que para todo estado  $|\phi\rangle$  vale  $\langle\phi|\hat{N}|\phi\rangle \geq 0$  (los elementos diagonales de la matriz de  $\hat{N}$  en cualquier base son siempre no negativos). Esto surge de la siguiente observación:  $\langle\phi|\hat{N}|\phi\rangle = \langle\phi|a^\dagger a|\phi\rangle = \|a|\phi\rangle\|^2 \geq 0$ . O sea, el valor medio de  $\hat{N}$  es siempre la norma al cuadrado de otro estado y por lo tanto es  $\geq 0$ . Por lo tanto, el espectro de  $\hat{N}$  está acotado por debajo (y la cota inferior es cero).
2. Dado un autoestado de  $\hat{N}$   $|\phi_\nu\rangle$  con autovalor  $\nu$ , entonces los estados  $a|\phi_\nu\rangle$  y  $a^\dagger|\phi_\nu\rangle$  son también autoestados del operador  $\hat{N}$  con autovalores  $\nu - 1$  y  $\nu + 1$  respectivamente. Esto se demuestra usando las relaciones de conmutación de  $a$  y  $a^\dagger$  con  $\hat{N}$  que pueden reescribirse como  $\hat{N} a = a(\hat{N} - \mathbb{1})$

y  $\hat{N} a^\dagger = a^\dagger (\hat{N} + \mathbb{1})$ . La demostración es la siguiente: El estado  $|\phi_\nu\rangle$  satisface que  $\hat{N}|\phi_\nu\rangle = \nu|\phi_\nu\rangle$ . Si calculamos la acción de  $\hat{N}$  sobre los estados  $|\phi'_\nu\rangle = a|\phi_\nu\rangle$  y  $|\phi''_\nu\rangle = a^\dagger|\phi_\nu\rangle$  observamos que valen las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned}\hat{N}|\phi'_\nu\rangle &= \hat{N} a|\phi_\nu\rangle \\ &= a(\hat{N} - \mathbb{1})|\phi_\nu\rangle = (\nu - 1)|\phi'_\nu\rangle \\ \hat{N}|\phi''_\nu\rangle &= \hat{N} a^\dagger|\phi_\nu\rangle \\ &= a^\dagger(\hat{N} + \mathbb{1})|\phi_\nu\rangle = (\nu + 1)|\phi''_\nu\rangle\end{aligned}$$

Estas ecuaciones implican precisamente que  $|\phi'\rangle$  y  $|\phi''\rangle$  son, respectivamente, autoestados de  $\hat{N}$  con autovalores  $\nu - 1$  y  $\nu + 1$  respectivamente.

3. Los autovalores de  $\hat{N}$  son números enteros mayores o iguales que cero.

Lo anterior nos muestra que los operadores  $a$  y  $a^\dagger$  nos permiten recorrer el espectro de  $\hat{N}$  en dirección descendente y ascendente respectivamente. Por eso, a estos operadores se los define con nombres "bíblicos" como "operador de creación" ( $a^\dagger$ ) y "operador de destrucción" ( $a$ ). También se los denomina operadores de subida y bajada. Aplicando  $a$  sucesivamente a un autoestado vamos generando una escalera de autoestados con autovalor descendiente. La distancia entre los autovalores de los sucesivos estados es igual a la unidad. Entonces, podemos demostrar el enunciado (o sea, podemos demostrar que  $\nu$  debe ser un entero) de la siguiente manera (por el absurdo). Si fuera posible encontrar un valor de  $\nu$  que fuera no entero entonces podríamos aplicar el operador  $a$  un número de veces igual a la parte entera de  $\nu$  ( $[\nu]$ ) y obtendríamos un autoestado cuyo autovalor es un número real entre 0 y 1. Aplicando  $a$  una vez más, generaríamos un estado con autovalor negativo, lo cual es absurdo (ya que más arriba demostramos que  $\nu \geq 0$ ). El absurdo proviene de suponer que  $\nu$  es no entero. Por lo tanto, los únicos valores posibles de  $\nu$  son enteros.

4. El estado con el autovalor  $\nu = 0$  (el más bajo posible) es tal que  $a|\tilde{\phi}_0\rangle = 0$ . Esto también es consecuencia de lo anterior. Por cierto, la norma de este estado es  $\|a|\phi_0\rangle\|^2 = \langle\phi_0|a^\dagger a|\phi_0\rangle = 0$ . Por lo tanto el estado es nulo (ese es el único estado de norma nula). Por ese mismo motivo, al aplicar el operador  $a$  a  $|\phi_0\rangle$  no seguimos descendiendo en la escalera de autovalores sino que quedamos detenidos en ese, que es el autovalor más bajo posible.
5. Los autoestados con autovalor  $\nu = n$  se obtienen a partir de  $|\phi_0\rangle$  como  $|\phi_n\rangle = (a^\dagger)^n|\phi_0\rangle/\sqrt{n!}$ . Supongamos que los estados  $|\phi_n\rangle$  están normalizados (o sea, su norma es 1). Como vimos,  $a^\dagger|\phi_n\rangle = C_n|\phi_{n+1}\rangle$  donde  $C_n$  es una constante de normalización. Esta constante puede encontrarse

fácilmente calculando la norma de la expresión anterior. Esto es:

$$\begin{aligned}\|a^\dagger|\phi_n\rangle\|^2 &= |C_n|^2 \\ &= \langle\phi_n|aa^\dagger|\phi_n\rangle = \langle\phi_n|(\hat{N} + 1)|\phi_n\rangle \\ &= (n + 1)\end{aligned}$$

Entonces,  $C_n = 1/\sqrt{n+1}$  y por lo tanto  $|\phi_{n+1}\rangle = a^\dagger|\phi_n\rangle/\sqrt{n+1}$ . Iterando esta igualdad hasta llegar a  $n = 0$  obtenemos simplemente que

$$|\phi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}a^{\dagger n}|\phi_0\rangle.$$

En consecuencia, la tarea de encontrar los estados  $|\phi_n\rangle$  se reduce a la de encontrar el estado fundamental  $|\phi_0\rangle$  ya que a partir de él podemos construir toda la escalera ascendente de autoestados aplicando sucesivas veces  $a^\dagger$ .

6. La función de onda del estado fundamental es una función Gaussiana centrada en el origen (con ancho  $\sigma$ ). Para demostrar esto debemos resolver la única ecuación diferencial que veremos en este capítulo, que es la que se obtiene a partir de la ecuación  $a|\phi_0\rangle = 0$ . Escribiendo esta ecuación en representación posición, y recordando que  $a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{x}{\sigma} + i\frac{p}{\hbar})$ , obtenemos

$$\langle x|a|\phi_0\rangle = \frac{\sigma}{\sqrt{2}}(\frac{x}{\sigma^2} + \partial_p)\phi_0(x) = 0$$

Esta ecuación puede resolverse trivialmente y de ese modo obtenemos que  $\phi_0(x) = A_0 \exp(-x^2/2\sigma^2)$ , donde  $A_0$  se fija por la condición de normalización (que no es otra cosa que  $\int dx|\phi_0|^2(x) = 1$ ). El resultado final es simple:

$$\phi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\sigma\sqrt{\pi}}} \exp(-x^2/2\sigma^2).$$

7. La función de onda del estado excitado  $\phi_n(x)$  es el producto de la del estado fundamental por un polinomio de grado  $n$ . Esto surge a partir de la observación de que  $|\phi_n\rangle = a^{\dagger n}|\phi_0\rangle/\sqrt{n!}$ . Escribiendo esta ecuación en representación posición obtenemos

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\sigma\sqrt{\pi}}} \frac{1}{\sqrt{n!2^n}} \left(\frac{x}{\sigma} - \sigma\partial_x\right)^n \exp(-\frac{x^2}{2\sigma^2})$$

Resulta conveniente definir al polinomio  $H_n(u)$  como aquel tal que  $(u - \partial_u)^n \exp(-u^2/2) = H_n(u) \exp(-u^2/2)$ . Entonces, la función de onda del estado  $|\phi_n\rangle$  es

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\sigma\sqrt{\pi}}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\frac{x}{\sigma}\right) \exp(-\frac{x^2}{2\sigma^2})$$

Por completitud presentamos algunos ejemplos de los polinomios  $H_n(x)$  (que son los famosos polinomios de Hermite). En efecto, es fácil comprobar que  $H_0(u) = 1$ ,  $H_1(u) = 2u$ ,  $H_2(u) = 4u^2 - 2$ ,

$H_3(u) = 8u^3 - 12u$ , etc. En todos los casos los polinomios  $H_n(u)$  tienen grado  $n$  y, por lo tanto tienen  $n$  raíces distintas. El punto  $u = 9$  es raíz de todos los polinomios con  $n$  impar. Estos polinomios son ortogonales en la métrica definida como

$$\int du H_n(u) H_m(u) \exp(-u^2) = \sqrt{2\pi} \delta_{n,m}$$

### C. Valores medio de posición y momento

El uso de operadores de creación y destrucción es sumamente conveniente para calcular valores medios de potencias de los operadores posición y momento en los autoestados del Hamiltoniano. En efecto, teniendo en cuenta que  $x = \sigma(a + ia^\dagger)/\sqrt{2}$ , y  $p = -i\hbar(a - ia^\dagger)/\sqrt{2}\sigma$ , los elementos de matriz de estos operadores resultan fáciles de calcular si recordamos que  $a^\dagger|\phi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\phi_{n+1}\rangle$  y  $a|\phi_n\rangle = \sqrt{n}|\phi_{n-1}\rangle$ . Por ejemplo,

$$\begin{aligned} \langle \phi_n | x | \phi_m \rangle &= \frac{\sigma}{\sqrt{2}} (\sqrt{m+1} \delta_{n, m+1} \\ &+ \sqrt{m} \delta_{n, m-1}). \end{aligned}$$

Evidentemente tanto el valor medio de la posición como del momento se anula en los estados  $|\phi_n\rangle$  (o sea,  $\langle \phi_n | x | \phi_n \rangle = 0$  y  $\langle \phi_n | p | \phi_n \rangle = 0$ ). Análogamente podemos calcular muy fácilmente los valores medios de  $x^2$  y  $p^2$  usando que  $x^2 = \sigma^2(a^2 + a^{\dagger 2} + aa^\dagger + a^\dagger a)/2$ . En efecto, se obtiene

$$\langle x^2 \rangle_n = \sigma^2(n + \frac{1}{2}), \quad \langle p^2 \rangle_n = \frac{\hbar^2}{\sigma^2}(n + \frac{1}{2})$$

El uso de las propiedades de los operadores de creación y destrucción permite realizar cálculos de valores medios sin necesidad de realizar integrales de ningún tipo.

### D. Evolución temporal

La evolución temporal en la representación de Schroedinger es bastante sencilla. Dado el estado inicial  $|\Psi(0)\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle$ , el estado a tiempos posteriores es

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n \exp(-i(n + \frac{1}{2})\omega t) |\phi_n\rangle$$

Las frecuencias de Bohr, que aparecen en la evolución de cualquier valor medio son  $\omega_{nm} = (n - m)\omega$ .

La representación de Heisenberg es particularmente sencilla. Como vimos, las ecuaciones de evolución de los operadores posición y momento son idénticas a las clásicas y, por lo tanto, pueden ser resueltas exactamente.

Lo mismo ocurre para la ecuación de evolución del operador  $a$  que resulta

$$i\hbar \dot{a} = [a, \hbar\omega(\hat{N} + \frac{1}{2})] = \hbar\omega a, \quad (84)$$

de donde surge la ecuación  $\dot{a} = -i\omega a$  que se resuelve trivialmente dando lugar a

$$a(t) = a(0) \exp(-i\omega t) \quad (85)$$

donde  $a(0)$  es el operador en la representación de Schroedinger.

### E. Estados coherentes

Como vimos mas arriba, los valores medios de la posición y el momento se anulan en los autoestados del Hamiltoniano. En este caso, estos estados cumplen con las ecuaciones clásicas de evolución, pero es una solución trivial ya que los valores medios son idénticamente nulos para todo tiempo. Para encontrar estados con valor medio no nulo de la posición y el momento conviene notar que  $\langle x \rangle = \sqrt{2}\sigma \text{Re } \alpha$  donde  $\alpha = \langle a \rangle$ . Análogamente,  $\langle p \rangle = \sqrt{2}\hbar \text{Im } \alpha/\sigma$ . Entonces, necesitamos encontrar estados que tengan valor medio no nulo para los operadores de creación y destrucción. Los candidatos naturales para ese fin son los "estados coherentes" que se definen como autoestados del operador de destrucción. Teniendo en cuenta que  $a$  no es hermítico, sus autovalores serán, en general, números complejos. En efecto, el estado coherente  $|\alpha\rangle$  es tal que

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle. \quad (86)$$

En un estado de este tipo los valores medios de los operadores posición y momento evolucionan siguiendo las ecuaciones clásicas de movimiento. Es también interesante notar que la evolución temporal preserva los estados coherentes. Es decir, un estado coherente evoluciona en otro estado coherente. Esto es así porque la ecuación de Heisenberg para el operador de destrucción es  $a(t) = a_0 \exp(-i\omega t)$ . En consecuencia, un autoestado del operador  $a_0$  (el operador de destrucción en la representación de Schroedinger) con autovalor  $\alpha_0$  resulta ser un autoestado del operador  $a(t)$  para todo tiempo con autovalor a tiempo  $t$  es  $\alpha(t) = \alpha_0 \exp(-i\omega t)$ . Como vimos antes, de aquí se concluye que en la representación de Schroedinger, el estado que evoluciona a partir de  $|\alpha_0\rangle$  será autoestado de  $a_S = a(0)$  en el instante  $t$  con autovalor  $\alpha_0 \exp(-i\omega t)$ .

Veremos ahora que los estados coherentes pueden ser contruidos en forma explícita de manera sencilla. Para eso podemos escribirlos como combinación lineal de los autoestados del Hamiltoniano. En efecto, planteando que  $|\alpha\rangle = \sum_n b_n |\phi_n\rangle$ , la ecuación de autovalores para el op-

erador de destrucción puede escribirse como

$$\begin{aligned} a|\alpha\rangle &= a \sum_n b_n |\phi_n\rangle = \sum_n b_n \sqrt{n} |\phi_{n-1}\rangle, \\ &= \alpha \sum_n b_n |\phi_n\rangle. \end{aligned}$$

De esta ecuación se deduce la siguiente relación de recurrencia para los coeficientes  $b_n$ :  $b_{n+1} = \alpha b_n / \sqrt{n+1}$ . Iterando esta relación obtenemos  $b_n = \alpha^n b_0 / \sqrt{n!}$ . En consecuencia,  $|\alpha\rangle = b_0 \sum_n \alpha^n |\phi_n\rangle / \sqrt{n!}$ . La constante de normalización es tal que  $1 = |b_0|^2 \sum_n |\alpha|^{2n} / n!$ . Por lo tanto  $b_0 = \exp(-|\alpha|^2/2)$ . El estado coherente  $|\alpha\rangle$  resulta ser

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |\phi_n\rangle \\ &= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_n \frac{\alpha^n}{n!} a^{\dagger n} |\phi_0\rangle \\ &= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \exp(\alpha a^\dagger) |\phi_0\rangle \\ &= \exp(\alpha a^\dagger - \alpha^* a) |\phi_0\rangle \\ &= D(\alpha) |\phi_0\rangle \end{aligned}$$

Cabe notar que en la última ecuación hemos introducido el operador de desplazamiento en el espacio de las fases  $D(\alpha) = \exp(\alpha a^\dagger - \alpha^* a)$ . Este operador no es otra cosa que  $D(\alpha) = \exp((-ix_\alpha \hat{P} + ip_\alpha \hat{X})/\hbar)$ , donde  $\alpha = (x_\alpha/\sigma + \sigma p_\alpha/\hbar)/\sqrt{2}$ . Evidentemente,  $D(\alpha) = \exp(\alpha a^\dagger) \exp(-\alpha^* a) \exp(-|\alpha|^2)$ , identidad que fue usada en la deducción de las últimas ecuaciones. El operador desplazamiento  $D(\alpha)$  satisface las relaciones

$$\begin{aligned} D(\alpha)D(\beta) &= D(\alpha + \beta) \exp(\alpha\beta^* - \alpha^*\beta), \\ \text{Tr}(D(\alpha)D(\beta)) &= 2\pi\delta(\alpha - \beta) \end{aligned}$$

Como vemos, un estado coherente no es otra cosa que una traslación en el espacio de las fases aplicada al estado fundamental del oscilador armónico. Por consiguiente, la función de onda de dicho estado es una Gaussiana centrada en un punto que sigue la trayectoria clásica que se origina a partir del punto cuya coordenada y momento está dada por  $\alpha_0$ . Por completitud, incluimos aquí la función de onda de un estado coherente, que resulta ser

$$\begin{aligned} \langle x|\alpha\rangle &= \phi_\alpha(x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\sigma\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{(x-x_\alpha)^2}{2\sigma^2}} e^{i\frac{p_\alpha x}{\hbar}} e^{-i\frac{x_\alpha p_\alpha}{2\hbar}} \end{aligned}$$

## F. Propiedades: Incerteza mínima y completitud

Las siguientes son algunas propiedades importantes de los estados coherentes:

1. Los estados coherentes son estados de incerteza mínima. En efecto, es fácil calcular la incerteza en la posición. Para eso podemos demostrar la validez

de las siguientes identidades (que surgen de expresar el operador posición en términos de  $a$  y  $a^\dagger$  y de la definición de los estados coherentes como autoestados del operador de destrucción:

$$\begin{aligned} \langle \alpha|x^2|\alpha\rangle &= \frac{\sigma^2}{2}(\alpha^2 + \alpha^{*2} + 2|\alpha|^2 + 1), \\ \langle x\rangle^2 &= \frac{\sigma^2}{2}(\alpha^2 + \alpha^{*2} + 2|\alpha|^2) \\ \langle \alpha|p^2|\alpha\rangle &= \frac{\hbar^2}{2\sigma^2}(-\alpha^2 - \alpha^{*2} + 2|\alpha|^2 + 1), \\ \langle p\rangle^2 &= \frac{\hbar^2}{2\sigma^2}(-\alpha^2 - \alpha^{*2} + 2|\alpha|^2) \end{aligned}$$

Por lo tanto, las dispersiones son

$$\begin{aligned} \Delta x^2 &= \frac{\sigma^2}{2}, \\ \Delta p^2 &= \frac{\hbar^2}{2\sigma^2}. \end{aligned}$$

Por lo tanto, se satisface la identidad

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

## G. Relación de completitud y producto interno de estados coherentes

Los estados coherentes tienen numerosas propiedades útiles. Una de ellas es que forman una base sobre-completa del espacio de estados. En efecto, se puede demostrar que el operador identidad puede obtenerse como  $I = \frac{1}{\pi} \int d^2\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|$ . Esta identidad puede probarse de la siguiente forma: Podemos introducir la identidad en representación de posición y escribir

$$\begin{aligned} \int \frac{d\alpha}{\pi} |\alpha\rangle\langle\alpha| &= \int \frac{d\alpha}{\pi} \int dx dy |x\rangle\langle x|\alpha\rangle\langle\alpha|y\rangle\langle y| \\ &= \int \frac{dx_\alpha dp_\alpha}{2\pi\hbar} \times \\ &\times \int dx dy |x\rangle\langle y| \phi_\alpha(x) \phi_\alpha^*(y) \end{aligned}$$

Utilizando la forma explícita de la función de onda de un estado coherente podemos demostrar que

$$\begin{aligned} F_\alpha(x, y) &= \int \frac{dx_\alpha dp_\alpha}{2\pi\hbar} \phi_\alpha(x) \phi_\alpha^*(y) \\ &= \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \int dx_\alpha \delta(x - y) e^{-\frac{(x-x_\alpha)^2}{\sigma^2}} \end{aligned}$$

Entonces, introduciendo esto en la expresión anterior obtenemos que

$$\begin{aligned} \int \frac{d\alpha}{\pi} |\alpha\rangle\langle\alpha| &= \int dx |x\rangle\langle x| \times \\ &\times \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \int dx_\alpha e^{-\frac{(x-x_\alpha)^2}{\sigma^2}} \\ &= \int dx |x\rangle\langle x| = I \end{aligned} \quad (87)$$

Por otro lado, estos estados no son ortogonales sino que satisfacen la relación:

$$\begin{aligned} \langle\beta|\alpha\rangle &= e^{-\frac{|\alpha|^2+|\beta|^2}{2}} \sum_n \frac{1}{n!} (\alpha\beta^*)^n \\ &= e^{-\frac{|\alpha|^2+|\beta|^2}{2}} \times e^{\alpha\beta^*}. \end{aligned}$$

Por último, una de las propiedades más importantes de los estados coherentes es la distribución de resultados de una medición de la energía. En efecto, si preparamos el estado coherente  $|\alpha\rangle$  (ver más abajo) y medimos la energía del sistema (o, análogamente el operador  $\hat{N}$ ) obtenemos que los mismos están distribuidos con la siguiente probabilidad:

$$\text{Prob}(n|\alpha) = e^{-|\alpha|^2} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!}.$$

Esta es una distribución Poissoniana con un valor medio  $\bar{n} = \langle\hat{N}\rangle = |\alpha|^2$ . Por lo tanto, la distribución puede reescribirse como

$$\text{Prob}(n|\alpha) = e^{-\bar{n}} \frac{\bar{n}^n}{n!}.$$

Los estados coherentes, como veremos, son estados que caracterizan a la luz generada por un laser y son, en un sentido bien definido, los estados cuánticos más parecidos a los estados clásicos.

## H. Cómo preparar un estado coherente? El oscilador forzado

Veremos ahora como se puede preparar un estado coherente a partir del estado fundamental del oscilador armónico. Para eso consideraremos un oscilador al que se lo acopla con una fuente dependiente del tiempo, descrita por un potencial de interacción de la forma  $V_{fuente} = -xF(t)$  (clásicamente esto implica aplicar una fuerza  $\vec{F} = F(t)\vec{e}_x$  cuyo módulo depende del tiempo). Es decir, el Hamiltoniano es

$$H = \hbar\omega \frac{1}{2} (\hat{p}^2 + \hat{x}^2) - xF(t)$$

Con este Hamiltoniano, la ecuación de Heisenberg para el operador de destrucción es

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{a} &= \hbar\omega a - \frac{\sigma}{\sqrt{2}} F(t) \\ \dot{a} &= -i\omega a + iG(t) \end{aligned}$$

donde  $G(t) = F(t)\sigma/\sqrt{2}\hbar$ . La solución general de la ecuación para  $a(t)$  es simple:

$$a(t) = a(0) e^{-i\omega t} + i \int_0^t dt' e^{-i\omega(t-t')} G(t').$$

El segundo término es proporcional al operador identidad. Por lo tanto podemos concluir que si el estado inicial es  $|\psi(0)\rangle = |0\rangle$  (que es un autoestado del operador  $a(0)$  con autovalor nulo) entonces este estado será siempre autoestado de  $a(t)$  con autovalor  $\alpha(t) = i \int_0^t \exp(-i\omega(t-t')) G(t')$ . En consecuencia, en el instante  $t$ , el estado en la representación de Schroedinger será un autoestado del operador de destrucción  $a = a(0)$  con autovalor  $\alpha(t)$ . En síntesis  $|\psi(t)\rangle = |\alpha(t)\rangle$ . Por lo tanto, el protocolo más sencillo para preparar un estado coherente cualquiera es: a) preparar el oscilador en el estado fundamental, b) prender una fuente (que corresponde a una fuerza independiente de la posición pero dependiente del tiempo) por un tiempo apropiadamente elegido, c) apagar la fuente y de ese modo obtenemos el estado deseado.

Es interesante ver cómo son las funciones  $\alpha(t)$  para algunas fuerzas particulares.

(a)  $G(t) = G_0 = cte$ . En este caso resulta que

$$\begin{aligned} \alpha(t) &= -\frac{G_0}{\omega} (1 - \exp(-i\omega t)) \\ &= -i \frac{2G_0}{\omega} \exp(-i\omega t/2) \sin(\omega t/2) \end{aligned}$$

Esto quiere decir que  $x_\alpha(t) = \frac{F_0}{m\omega^2} (1 - \cos(\omega t))$  con lo cual el sistema oscila alrededor de la posición de equilibrio  $x_{eq} = F_0/k$  siendo  $k$  la constante elástica del resorte. Este es un resultado totalmente natural. El sistema absorbe energía en el momento en que prendemos la fuente y luego conserva la energía.

(b)  $G(t) = G_0 \sin(\Omega t)$ . Con un forzado periódico se observan resultados más interesantes. En ese

caso tenemos

$$\begin{aligned}\alpha(t) &= iG_0 \int_0^t \exp(-i\omega(t-t') \sin \Omega(t')) \\ \alpha(t) &= \frac{G_0}{2} e^{-i\omega t} \int_0^t (e^{i(\omega+\Omega)t'} - e^{i(\omega-\Omega)t'}) \\ &= -i \frac{G_0}{2} e^{-i\omega t} \\ &\times \left( \frac{e^{i(\omega+\Omega)t} - 1}{\omega + \Omega} - \frac{e^{i(\omega-\Omega)t} - 1}{\omega - \Omega} \right) \\ &= -i \frac{G_0}{2} \left( \frac{e^{i\Omega t} - e^{-i\omega t}}{\omega + \Omega} - \frac{e^{-i\Omega t} - e^{-i\omega t}}{\omega - \Omega} \right)\end{aligned}$$

En este caso, la parte real de  $\alpha(t)$  (que no es otra cosa que el valor medio de la posición) es:

$$\begin{aligned}x_\alpha(t) &= \sigma \frac{G_0}{\sqrt{2}} \left( \cos \omega t \left( \frac{\sin(\omega + \Omega)t}{\omega + \Omega} - \frac{\sin(\omega - \Omega)t}{\omega - \Omega} \right) \right. \\ &\left. + \sin \omega t \left( \frac{\cos(\omega + \Omega)t - 1}{\omega + \Omega} - \frac{\cos(\omega - \Omega)t - 1}{\omega - \Omega} \right) \right)\end{aligned}$$

En el caso resonante tenemos que  $\Omega = \omega$  y entonces

$$x_\alpha(t) = \sigma \frac{G_0}{\sqrt{2}} \left( \cos \omega t \left( \frac{\sin 2\omega t}{2\omega} - t \right) - \frac{\sin^3 \omega t}{\omega} \right)$$

En consecuencia, para tiempos largos tenemos que el valor medio de la posición se comporta como

$$x_\alpha(t) \rightarrow -t \sigma \frac{G_0}{\sqrt{2}} \cos \omega t = -t \frac{F_0}{2m\omega} \cos \omega t$$

Como vemos, en este caso la amplitud de la oscilación crece linealmente con el tiempo. El comportamiento de  $x_\alpha(t)$  en todos estos casos es idéntico al de un oscilador con un forzado periódico y este último caso corresponde a la resonancia, en el que para tiempos largos la amplitud diverge (en ausencia de rozamiento).

## 2. Representación en el espacio de fases

La función de Wigner  $W(\alpha)$  es una función definida en el espacio de las fases que permite representar el estado cuántico de una partícula. La relación entre la función de Wigner y el estado de un sistema es, como veremos mas adelante, una biyección y su definición no se restringe al caso de un oscilador armónico sino que puede aplicarse a todo tipo de sistemas. Su inclusión en este capítulo es, por cierto, arbitraria pero justificada en el hecho de que dicha función es particularmente útil para el caso del oscilador armónico. Es un método que permite, al representar al estado cuántico en el mismo escenario de la física clásica, poner en evidencia los efectos cuánticos mas interesantes.

La función  $W(\alpha)$  para el estado  $\rho$  se define como  $W(\alpha) = \text{Tr}(\hat{A}(\alpha)\rho)$ , donde el operador  $\hat{A}(\alpha)$ , habitualmente denominando "operador de punto" se define

como  $\hat{A}(\alpha) = \frac{1}{\pi} \text{Tr}(D(\alpha)RD^\dagger(\alpha)\rho)$ . El conjunto de operadores  $\hat{A}(\alpha)$  tiene propiedades sencillas y útiles. En particular, es importante notar que estos operadores (que son hermíticos) son una base completa del espacio de operadores y cumplen que

$$\begin{aligned}\text{Tr}(\hat{A}(\alpha)\hat{A}(\beta)) &= \frac{1}{2\pi} \delta(\alpha - \beta). \\ \int d\alpha \hat{A}(\alpha) &= \hat{I}\end{aligned}$$

En consecuencia, cualquier operador puede escribirse como combinación lineal de estos operadores. En el caso del estado  $\rho$  podemos escribir que

$$\rho = 2\pi \int d\alpha W(\alpha) \hat{A}(\alpha).$$

Es decir,  $W(\alpha)$  no es otra cosa que el coeficiente del desarrollo del estado  $\rho$  en la base formada por los operadores  $\hat{A}(\alpha)$ .

Las propiedades fundamentales de la función de Wigner surgen de propiedades de los operadores  $\hat{A}(\alpha)$ . Las propiedades mas importantes son:

- (a) a)  $W(\alpha)$  es siempre real (lo que es obvio a partir de su definición como valor medio de un operador hermítico),
- (b) b) La función de Wigner está normalizada a la unidad, es decir que  $\int d\alpha W(\alpha) = 1$ . Esto surge de tomar la traza de la expresión  $\rho = 2\pi \int W(\alpha)\hat{A}(\alpha)$  y de utilizar el hecho de que  $\text{Tr}(\hat{A}(\alpha)) = 1/2\pi$  (que se deduce trivialmente del hecho de que la traza del operador de reflexión es siempre igual a 1/2).
- (c) c) La función  $W(\alpha)$  provee una descripción completa del estado (lo que es obvio teniendo en cuenta que, como vimos, los operadores  $\hat{A}(\alpha)$  forman una base ortonormal y completa del espacio de operadores. Por ese mismo motivo se cumple que para todo par de estados  $\rho_1$  y  $\rho_2$  vale que

$$\text{Tr}(\rho_1\rho_2) = \frac{1}{2\pi} \int d^2\alpha W_1(\alpha)W_2(\alpha)$$

- (d) d) La integral de  $W(\alpha)$  sobre cualquier recta en el espacio de las fases, definida por la ecuación  $ax + bp = c$  es igual a la densidad de probabilidad de que el resultado de la medición del observable  $a\hat{X} + b\hat{P}$  esté en un entorno del punto  $c$ . O sea, la función de Wigner es "casi" una densidad de probabilidad en el espacio de las fases. Esta propiedad surge del hecho de que la integral de  $\hat{A}(\alpha)$  sobre la recta  $ax + bp = c$  es igual al proyector sobre el autoestado de autovalor  $c$  del operador  $a\hat{X} + b\hat{P}$ .

- (e) Las definiciones anteriores de la función de Wigner pueden reescribirse de la siguiente manera, que aparece de manera mas habitual en los libros de texto (pero que es menos práctica a la hora de deducir las propiedades de esta función):

$$W(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int du e^{-ipu/\hbar} \langle x - u/w | \rho | x + u/2 \rangle$$

Sin embargo la función de Wigner no puede ser interpretada, en general, como una densidad de probabilidad ya que puede ser negativa. La negatividad de la función de Wigner es una evidencia de la imposibilidad de reducir las probabilidades de la mecánica cuántica a nuestra ignorancia. La negatividad de la función de Wigner pone de manifiesto los efectos de interferencia cuántica.

Un ejemplo paradigmático de estos efectos se observa al estudiar estados que son superposiciones de estados coherentes. Estos estados son llamados "gatos de Schroedinger" ya que describen a una partícula en una superposición de dos posiciones y momentos bien definidos. La partícula no está "aquí ó allá" sino que esta en ambos lugares a la vez. Vamos a calcular la función de Wigner para un estado tipo gato de Schroedinger de la forma

$$|\Psi_{cat}\rangle = N(|\beta\rangle - |-\beta\rangle),$$

donde  $N$  es una constante de normalización cuyo valor es  $N = (2 - 2\exp(-2|\beta|^2))^{-1/2}$ . Para calcular la función de Wigner del estado "gato" hay que usar que la matriz densidad de ese estado es

$$\begin{aligned} \rho_{cat} &= N^2(|\beta\rangle\langle\beta| + |-\beta\rangle\langle-\beta| \\ &\quad - |\beta\rangle\langle-\beta| - |-\beta\rangle\langle\beta|). \end{aligned}$$

El resultado se obtiene fácilmente si utilizamos las siguientes identidades:

$$\begin{aligned} \langle\beta|D(\alpha)RD^\dagger(\alpha)|\beta\rangle &= \langle\alpha - \beta|\beta - \alpha\rangle \\ &= e^{-2|\alpha - \beta|^2} \\ \langle-\beta|D(\alpha)RD^\dagger(\alpha)|\beta\rangle &= \langle\beta + \alpha|-\alpha + \beta\rangle e^{\alpha^*\beta - \alpha\beta^*} \\ &= e^{-2|\alpha|^2} e^{\alpha\beta^* - \alpha^*\beta} \end{aligned}$$

Usando estas expresiones, se obtiene que la función de Wigner del estado gato es

$$\begin{aligned} W_{cat}(\alpha) &= N^2(e^{-2|\alpha - \beta|^2} + e^{-2|\alpha + \beta|^2} \\ &\quad - 2e^{-2|\alpha|^2} \cos(2\text{Im}(\alpha^*\beta))) \end{aligned}$$

La interpretación de este resultado es sencilla: la función de Wigner del estado gato exhibe dos picos Gaussianos, ubicados en  $\alpha = \pm\beta$ . Esta es la contribución de los términos diagonales  $|\pm\beta\rangle\langle\pm\beta|$ . Los términos no diagonales contribuyen con un término

oscilante modulado por una Gaussiana centrada en el origen, que es el punto medio entre los dos picos Gaussianos diagonales. En el caso particular en que los gatos estén separados en posición, tenemos  $\beta = L/\sigma$  y por lo tanto el factor oscilante se reduce a  $\cos(2p_\alpha L/\hbar)$ . Es decir, las oscilaciones están alineadas en forma paralela al eje  $x$  y tienen una longitud de onda  $\lambda_p = \hbar/L\pi$ , que es inversamente proporcional a  $L$ . Es notable que la función de Wigner evaluada en  $\alpha = 0$  es evidentemente negativa.

## IX. CLASE 10: CUANTIZACIÓN DEL CAMPO ELECTROMAGNÉTICO. FOTONES.

### A. Electromagnetismo clásico. Coordenadas generalizadas.

Las ecuaciones de Maxwell describen completamente al electromagnetismo clásico. Estas son:

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} \cdot \vec{E} &= \frac{\rho}{\epsilon_0} & \vec{\nabla} \times \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} &= 0 \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{B} &= 0 & \vec{\nabla} \times \vec{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} &= \mu_0 \vec{J}\end{aligned}$$

donde  $\rho$  es la densidad de carga,  $\vec{J}$  la densidad de corriente eléctrica y  $c^2 = 1/\epsilon_0\mu_0$ .

Las dos ecuaciones de Maxwell en las que no aparecen las cargas nos brindan mucha información: Teniendo en cuenta que  $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$  entonces el teorema de Stokes implica que siempre existe un campo  $\vec{A}$  tal que  $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ . Reemplazando esta expresión en la ecuación de Faraday podemos transformarla en la siguiente:  $\vec{\nabla} \times (\vec{E} + \partial \vec{A}/\partial t) = 0$ . De esta ecuación se deduce que el campo  $\vec{E} + \partial \vec{A}/\partial t$  es irrotacional y por lo tanto, existe una función escalar  $\Phi$  tal que  $\vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi - \partial \vec{A}/\partial t$ . Obviamente el campo  $\vec{A}$  está definido siempre a menos de un gradiente. O sea, que las ecuaciones de Maxwell son invariantes frente a la transformación  $\vec{A} \rightarrow \vec{A} + \vec{\nabla}\Lambda$  y  $\Phi \rightarrow \Phi - \partial\Lambda/\partial t$ , para toda función  $\Lambda(\vec{r}, t)$  (invariancia de gauge). Teniendo en cuenta esto, podemos elegir  $\Lambda$  de modo tal que siempre valga la ecuación  $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$  (este es el gauge de Coulomb, que usaremos en esta sección).

Todavía no hemos usados las dos ecuaciones de Maxwell en las que aparecen las fuentes. Ellas nos permitirán determinar los campos  $\Phi$  y  $\vec{A}$ . En ausencia de fuentes, la ecuación  $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0$  implica que  $\nabla^2\Phi = 0$  (usando que  $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ ) por lo cual podemos tomar  $\Phi = 0$  siempre. Por último, la ley de Ampere implica que  $\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) + \frac{1}{c^2} \partial^2 \vec{A}/\partial t^2 = 0$ . Usando ahora que  $\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) - \nabla^2 \vec{A}$ , obtenemos finalmente que el potencial vector satisface  $\nabla^2 \vec{A} - (1/c^2) \partial^2 \vec{A}/\partial t^2 = 0$ . Por lo tanto,  $\vec{A}$  evoluciona de acuerdo a la ecuación de ondas (en la que  $c = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$  es la velocidad de propagación).

Resulta conveniente reescribir las ecuaciones de Maxwell en términos de la transformada de Fourier de  $\vec{A}$ . Definiendo

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^{3/2}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_k}} (e^{-i\vec{k}\vec{r}} \vec{A}(\vec{k}, t) + c.c.)$$

donde  $\omega_{\vec{k}} = |\vec{k}|c$  (la inclusión en esta fórmula del factor  $\sqrt{\hbar/2\epsilon_0\omega_k}$  es arbitraria y equivale a definir las unidades de  $\vec{A}(\vec{k}, t)$ ). Para determinar estas unidades puede razonarse de la siguiente manera: Mas abajo veremos que la cantidad  $\epsilon_0 V |\vec{E}|^2$  tiene unidades de energía. En consecuencia, debe valer que  $\int d^3\vec{k} |\vec{A}(\vec{k}, t)|^2$  sea adimensional, lo que implica que las unidades de  $\vec{A}(\vec{k}, t)$  son  $L^{3/2}$ .

Para identificar los grados de libertad físicos del campo es importante notar que para cada vector de onda  $\vec{k}$ , el vector  $\vec{A}(\vec{k})$  tiene solamente dos componentes, las cuales son perpendiculares a  $\vec{k}$  (ya que, como vimos mas arriba la ecuación  $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$  implica que  $\vec{k} \cdot \vec{A}(\vec{k}, t) = 0$ ). Si tomamos dos vectores cualesquiera  $\vec{e}_{\vec{k},\lambda}$ ,  $\lambda = 1, 2$ , en el plano perpendicular a  $\vec{k}$ , el vector potencial  $\vec{A}(\vec{r}, t)$  puede escribirse siempre como

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{\epsilon_0\omega_k}} (\vec{e}_{\vec{k},\lambda} e^{-i\vec{k}\vec{r}} A_{\vec{k},\lambda}(t) + c.c.).$$

Usando esta expresión podemos demostrar fácilmente para que el campo satisfaga la ecuación de onda se debe cumplir que  $\dot{A}_{\vec{k},\lambda}(t) + i\omega_{\vec{k}} A_{\vec{k},\lambda}(t) = 0$  (o que  $\ddot{A}_{\vec{k},\lambda}(t) + \omega_{\vec{k}}^2 A_{\vec{k},\lambda}(t) = 0$ ).

En conclusión: El campo electromagnético (en ausencia de fuentes) no es mas que un conjunto de infinitos osciladores armónicos. Las coordenadas generalizadas del campo son las amplitudes  $A_{\vec{k},\lambda}$ : dos funciones escalares complejas para cada modo. Su rol es totalmente análogo al de las coordenadas complejas  $\alpha = (\tilde{q} + i\tilde{p})/\sqrt{2}$  que pueden usarse para describir al oscilador armónico ordinario.

A partir del potencial vector se pueden calcular trivialmente los campos eléctricos y magnéticos que resultan ser:

$$\begin{aligned}\vec{E}(\vec{r}, t) &= i \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\lambda} \sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2\epsilon_0}} (\vec{e}_{\vec{k},\lambda} e^{-i\vec{k}\vec{r}} A_{\vec{k},\lambda} - c.c.). \\ \vec{B}(\vec{r}, t) &= -i \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_k}} \\ &\quad \times \vec{k} \wedge (\vec{e}_{\vec{k},\lambda} e^{-i\vec{k}\vec{r}} A_{\vec{k},\lambda} - c.c.).\end{aligned}$$

Por último, es importante notar que en la teoría clásica de Maxwell hay ciertas magnitudes conservadas que, naturalmente, se originan en las simetrías de dichas ecuaciones. En particular, la invariancia ante traslaciones temporales y espaciales implican la conservación de la energía y el momento del campo electromagnético, que resultan ser

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3\vec{r} (\vec{E}^2(\vec{r}) + c^2 \vec{B}^2(\vec{r})). \\ \vec{\mathcal{P}} &= \epsilon_0 \int d^3\vec{r} \vec{E}(\vec{r}) \wedge \vec{B}(\vec{r}).\end{aligned}$$

### B. Campo en una cavidad. Modos discretos.

Es importante considerar el caso de campos atrapados en una cavidad de volumen  $V = L^3$  (por ejemplo, un cubo cuyos lados tienen longitud  $L$ ). Si imponemos condiciones de contorno periódicas, las componentes del vector de onda serán  $k_j = 2\pi n_j/L$ . En ese caso todas las integrales se reducen a sumas sobre todas los vectores

$\vec{n}$  cuyas componentes son enteros no negativos. Para obtener las expresiones de los campos en este caso, debemos reemplazar:

$$\int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \rightarrow \frac{1}{V} \sum_{\vec{n}} \quad (88)$$

en las ecuaciones anteriores. Asimismo, la amplitud  $A_{\vec{k},\lambda}$  debe ser reemplazada como

$$A_{\vec{k},\lambda} \rightarrow \frac{V^{1/2}}{(2\pi)^{3/2}} a_{\vec{n},\lambda} \quad (89)$$

donde  $a_{\vec{n},\lambda}$  es adimensional.

En ese caso, el potencial vector y los campos electricos y magnéticos se escriben simplemente como

$$\begin{aligned} \vec{A}(\vec{r}, t) &= \sum_{\vec{n},\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_n V}} (\vec{e}_{\vec{k}_{\vec{n},\lambda}} e^{-i\vec{k}\vec{r}} a_{\vec{k}_{\vec{n},\lambda}}(t) + c.c), \\ \vec{E}(\vec{r}, t) &= i \sum_{\vec{n},\lambda} \sqrt{\frac{\hbar\omega_n}{2\epsilon_0 V}} (\vec{e}_{\vec{k}_{\vec{n},\lambda}} e^{-i\vec{k}\vec{r}} a_{\vec{k}_{\vec{n},\lambda}}(t) - c.c), \\ \vec{B}(\vec{r}, t) &= i \sum_{\vec{n},\lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_n V}} \vec{k} \wedge (\vec{e}_{\vec{k}_{\vec{n},\lambda}} e^{-i\vec{k}\vec{r}} a_{\vec{k}_{\vec{n},\lambda}}(t) - c.c), \end{aligned}$$

### C. Cuantización del campo. Fotones.

Para cuantizar el campo electromagnético tenemos que proceder tal como lo hacemos en cualquier otro caso. Las coordenadas generalizadas del sistema son operadores en un espacio de Hilbert. Es decir, en el caso continuo (volumen infinito) las amplitudes  $A_{\vec{k},\lambda}$  son operadores que deberán satisfacer relaciones de conmutación análogas a las que satisfacen las amplitudes correspondientes de los osciladores armónicos. Es decir:

$$[A_{\vec{k},\lambda}, A_{\vec{k}',\lambda'}^\dagger] = \delta^3(\vec{k} - \vec{k}') \delta_{\lambda,\lambda'}. \quad (90)$$

Tal como ocurre con cualquier sistema cuántico, la evolución temporal puede describirse en la representación de Heisenberg o en la de Schroedinger. La primera, aquella en la que los operadores evolucionan y los estados son invariables, es mas natural en la teoría de campos. En ese caso los operadores  $A_{\vec{k},\lambda}$  son funciones del tiempo que cumplen la ecuación de Heisenberg, que es simplemente:  $\dot{A}_{\vec{k},\lambda} + i\omega_{\vec{k}} A_{\vec{k},\lambda} = 0$ .

En el caso de un campo en una cavidad, los operadores  $a_{\vec{n},\lambda}$  deben satisfacer

$$[a_{\vec{n},\lambda}, a_{\vec{n}',\lambda'}^\dagger] = \delta_{\vec{n},\vec{n}'} \delta_{\lambda,\lambda'}. \quad (91)$$

Entonces, los operadores  $a_{\vec{n},\lambda}$  y  $a_{\vec{n},\lambda}^\dagger$  son operadores de creación y destrucción, tal como los de un oscilador armónico usual. Como tenemos un oscilador para cada modo  $\{\vec{n}, \lambda\}$ , podemos construir una base completa

del conjunto de estados cuánticos del campo electromagnético usando vectores que sean autoestados de todos los operadores de la forma  $N_{\vec{n},\lambda} = a_{\vec{n},\lambda}^\dagger a_{\vec{n},\lambda}$ . Estos estados pueden escribirse como  $\otimes_{\vec{n},\lambda} |m_{\vec{n},\lambda}\rangle$ , para todos los valores de  $m_{\vec{n},\lambda} \geq 0$ . Diremos que este estado tiene  $m_{\vec{n},\lambda}$  fotones en el modo  $\{\vec{n}, \lambda\}$  del campo.

Cuales son las propiedades de los fotones? Para entenderlas, podemos escribir la energía y el momento del campo electromagnético en función de los operadores  $a_{\vec{n},\lambda}$ . Es fácil demostrar que

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_{\vec{n},\lambda} \hbar\omega_{\vec{n}} (a_{\vec{n},\lambda}^\dagger a_{\vec{n},\lambda} + \frac{1}{2}) \\ \vec{P} &= \sum_{\vec{n},\lambda} \hbar\vec{k}_{\vec{n}} a_{\vec{n},\lambda}^\dagger a_{\vec{n},\lambda} \end{aligned}$$

Las propiedades de los fotones son muy sencillas e interesantes. En efecto, el estado con  $m$  fotones en el modo  $\{\vec{n}, \lambda\}$  es un autoestado de la energía del campo con autovalor  $\hbar\omega_{\vec{n}}(m + 1/2)$  y también es un autoestado del momento con autovalor  $m \hbar\vec{k}_{\vec{n}}$ . Por ese motivo, podemos decir que los fotones son excitaciones del campo electromagnético que transportan momento lineal y energía. En ese sentido se comportan como partículas (y pueden ser detectados y producidos de a uno por vez). Puede verse también que los fotones transportan momento angular, pero eso no será tratado en este curso.

### D. El estado de vacío

El estado de vacío es aquel estado en donde no hay fotones. Todos los osciladores del campo están en su estado fundamental. Ese estado será denotado como  $|0\rangle$ . Obviamente, el estado de vacío es un autoestado del operador de momento del campo con autovalor nulo. Sin embargo, es un autoestado de la energía del campo con un autovalor infinito! En efecto, es obvio que  $\mathcal{H}|0\rangle = \sum_{\vec{n},\lambda} \omega_{\vec{n}}/2 |0\rangle$ . En la mayoría de los casos esta energía infinita puede ser dejada de lado ya que es simplemente una constante aditiva (y la energía siempre está definida a menos de una constante). En otras palabras, podemos referir todas las energías a la energía del vacío electromagnético (fijando ahí el cero de las energías). Esto es correcto siempre y cuando esta energía sea verdaderamente constante. Y esto no siempre es así. Por ejemplo, en una cavidad la energía del vacío depende de la forma de la cavidad (ya que los vectores de onda  $\vec{k}$  están cuantizados y toman valores que son múltiplos enteros de  $2\pi/L$ . Por eso, tiene sentido físico preguntarse cómo depende la energía del vacío de la forma de la cavidad. Analizando esta dependencia vemos que, por ejemplo, la energía del vacío en una cavidad formada por dos placas paralelas perfectamente conductoras disminuye con la distancia entre placas (para calcular esto es necesario restar dos magnitudes que son ambas infinitas, para lo cual es necesario utilizar algún método de "regularización"). Esto quiere decir que

para las placas es energéticamente favorable acercarse, lo cual implica que sobre ellas aparecerá una fuerza, llamada fuerza de Casimir, cuyo origen está en la estructura no trivial del vacío del campo electromagnético. Mas adelante veremos algunas otras consecuencias no triviales de la interacción entre átomos y el campo electromagnético y mostraremos que la interacción con el campo tiene consecuencias sobre el átomo aún en ausencia de fotones.

### E. Fotones en una cavidad con un único modo

Por último, es conveniente analizar el caso del campo electromagnético atrapado en una cavidad que puede almacenar un único modo. Supondremos que el vector de onda  $\vec{k}$  apunta en la dirección del eje  $e_z$ . Asimismo, supondremos que hay un único modo relevante, que es el de longitud de onda mas larga  $|\vec{k}| = 2\pi/L$  y que la polarización del campo es lineal. En ese caso, los campos son (en la representación de Heisenberg):

$$\begin{aligned}\vec{A}(\vec{r}, t) &= \frac{E_0}{\omega} e_x (e^{-i2\pi z/L} a(t) - e^{i2\pi z/L} a^\dagger(t)), \\ \vec{E}(\vec{r}, t) &= -iE_0 e_x (e^{-i2\pi z/L} a(t) - e^{i2\pi z/L} a^\dagger(t)), \\ \vec{B}(\vec{r}, t) &= -i\frac{E_0}{c} e_y (e^{-i2\pi z/L} a(t) - e^{i2\pi z/L} a^\dagger(t)), \\ E_0 &= \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0 V}}\end{aligned}$$

donde  $a^\dagger(t) = a^\dagger \exp(i\omega t)$  es el operador de creación de fotones. Si queremos trabajar en la representación de Schroedinger debemos dejar de lado la dependencia temporal de estos operadores.

En el estado de vacío (que es tal que  $a|0\rangle = 0$ ) los valores medios de todos los campos son  $\langle 0|\vec{E}|0\rangle = \langle 0|\vec{B}|0\rangle = 0$ . En cambio, las dispersiones no nula ya que

$$\langle 0|\vec{E}^2(z, t)|0\rangle = E_0^2 = c^2 \langle 0|\vec{B}^2(z, t)|0\rangle.$$

En analogía total con lo que hicimos para los osciladores armónicos, podemos definir estados coherentes del campo electromagnético como aquellos que son autovectores de los operadores de destrucción. En esos estados, los valores medios de los operadores de campo son no nulos y evolucionan en el tiempo tal como lo predicen las ecuaciones de Maxwell.

## X. CLASES 11, 12 Y 13: INTERACCIÓN FOTONES Y ÁTOMOS SENCILLOS: ELECTRODINÁMICA CUÁNTICA EN CAVIDADES.

### A. Interacción de un fotón con un átomo de dos niveles

En este capítulo estudiaremos la interacción entre átomos simples y fotones atrapados en una cavidad. Será necesario tratar a ambos sistemas, los átomos y los fotones, como sistemas cuánticos en interacción. Cabe destacar que hasta ahora vimos situaciones en las que tratamos cuánticamente átomos simples (sistemas de dos niveles, por ejemplo) en interacción con campos externos que fueron tratados clásicamente. Hicimos esto, por ejemplo, cuando analizamos las oscilaciones de Rabi inducidas sobre un sistema de dos niveles por su interacción con un campo externo oscilante. Asimismo, hicimos un tratamiento cuántico para el campo electromagnético y naturalmente podemos concebir la interacción de dicho campo con materia clásica. Por ejemplo, esto sucede cuando modelamos la interacción entre el campo cuántico y espejos o cavidades en los que los efectos cuánticos asociados a los átomos que componen estos objetos son despreciables. A lo largo de este capítulo utilizaremos como herramientas estos sistemas (átomos cuánticos en interacción con campos clásicos y campos cuánticos en interacción con materia clásica). La novedad del capítulo será la descripción de la interacción entre átomos y campos en el régimen en el que los efectos cuánticos en ambos sistemas son importantes.

Este capítulo pretende ser una síntesis de los que vimos hasta ahora en la materia. Para comprenderlo, es necesario utilizar todas las herramientas que introdujimos hasta ahora. En efecto, será necesario combinar los conocimientos que adquirimos sobre la mecánica cuántica de sistemas de dos niveles, la de los sistemas compuestos (ya que trataremos, precisamente, un sistema compuesto por dos partes esenciales: el átomo y el campo), será importante utilizar todo lo aprendido sobre la evolución temporal de sistemas cuánticos así como también la física del oscilador armónico y del campo electromagnético.

Otro de los objetivos de este capítulo es mostrar como en algunos casos es posible imponer a un sistema un determinado tipo de evolución (o, en algún sentido, diseñar el operador de evolución temporal). Veremos como, de este modo, podemos producir y controlar el entrelazamiento entre sistemas distantes (entre átomos y fotones, entre átomos distantes o entre fotones almacenados en cavidades distantes). Veremos como son, en definitiva, los experimentos que han permitido, manipulando sistemas cuánticos individuales, ponen de manifiesto las propiedades más extrañas de la mecánica cuántica.

Para comenzar describiremos por separado los personajes protagónicos de nuestro estudio: átomos de Rydberg y fotones atrapados en cavidades.

### B. Átomos de Rydberg

Vamos a considerar átomos preparados en estados muy especiales. Son los llamados átomos de Rydberg. Para describirlos, utilizaremos los modelos que han visto hasta aquí (en Física IV, por ejemplo). Prepararemos átomos alcalinos (Rb, rubidio, por ejemplo) en estados altamente excitados. En estos estados el número cuántico principal es cercano a  $n = 50$  y por lo tanto están muy cerca del umbral de ionización (recordemos que la energía del nivel  $n$  es  $E_n = -E_0/n^2$ , donde  $E_0 = me^4/2\hbar^2$ , que toma un valor de  $13.6eV$  para el átomo de Hidrógeno)). Nos restringiremos a considerar situaciones experimentales en los que hay un número muy pequeño de niveles que son accesibles al átomo. En realidad, trataremos solamente la situación más simple de todas: nuestro átomo tendrá solamente dos niveles relevantes (ver más abajo). Esos niveles serán denotados simplemente como  $|g\rangle$  y  $|e\rangle$ .

Como mencionamos, los átomos de Rydberg no solamente tienen un alto número cuántico principal (que será  $n = 49$  para  $|g\rangle$  y  $n = 50$  para  $|e\rangle$ ). Además, estos estados son tales que los valores de los números cuánticos asociados al momento angular son los máximos compatibles con el valor de  $n$ . En efecto, en todos los casos tendremos  $l = n - 1$  y  $m = l$ . Varios grupos en el mundo dominan hoy la técnica de preparación de este tipo de estados. El grupo dirigido por Serge Haroche, por ejemplo, los prepara a partir de un haz obtenido de un horno en el que se inyecta un vapor de Rb. Los átomos al salir del horno pasan por varios láseres que los excitan en una escalera ascendente (los átomos tienen que absorber alrededor de  $n = 45$  fotones para pasar de su estado fundamental, que es el estado  $4d$ , con  $n = 4$  y  $l = 2$ , a los estados con  $n = 49$  o  $50$ ). Asimismo, se utilizan campos magnéticos lentamente variables para crear (en forma adiabática) los estados de alto momento angular. Una vez obtenidos, los átomos forman un haz que es colimado y filtrado con un selector de velocidades. Las velocidades típicas de los átomos en el haz son de algunas centenas de  $m/seg$  y el flujo de átomos es suficientemente bajo como para poder asegurar que en cada instante tendremos un único átomo en el dispositivo experimental (que describimos más abajo).

Los estados de alto momento angular describen orbitales "planos" en los que la función de onda del electrón está concentrada en una circunferencia de radio  $r = R_B n^2$ , donde  $R_B = \hbar^2/me^2$  es el radio de Bohr, cuyo valor es  $0.5A$ . Esto puede verse recordando que las funciones de onda de los autoestados comunes de  $H$ ,  $\vec{L}^2$  y  $L_z$ , a menos de una constante de normalización ( $C_n$ ) son;

$$\Psi_{n,n-1,m} = C_n \left(\frac{r}{2R_B}\right)^{n-1} e^{-\frac{r}{nR_B}} (\sin\theta)^l e^{im\phi}$$

El carácter plano de estos orbitales surge de la dependencia con el ángulo  $\theta$ , ya que para altos valores de  $n$ , la función  $\sin^n\theta$  toma valores muy pequeños salvo para ángulos cercanos a  $\theta = \pi/2$ , que define el plano de la órbita. Asimismo, es fácil ver que la función de onda está

localizada para valores de la distancia  $r$  que son tales que el valor medio de dicha distancia es  $\langle r \rangle = n^2 R_B$ . Esto puede verse calculando explícitamente este valor medio pero también apelando a argumentos más intuitivos basados en las reglas de cuantización de Bohr Sommerfeld. En efecto, para estos estados podemos pensar que el electrón en el átomo está descrito por una onda estacionaria de longitud de onda de de Broglie ( $\lambda_{dB} = \hbar/p$ ) que es tal que se cumple la condición de cuantización que impone que en una órbita cerrada entre un número enteros de longitudes de onda. Es decir, debe cumplirse que  $2\pi r = n\lambda_{dB}$ ). La dependencia del radio de la órbita con el número cuántico principal,  $n$ , surge de notar que el momento  $p$  es tal que  $p^2/2m \approx E_0/n^2$  y de reemplazar en la expresión que nos dice que  $r = n\hbar/2\pi p$ . En consecuencia, se obtiene que  $r = n^2\hbar/2\pi(E_0/2m)^{1/2} = n^2 r_B$ .

En los experimentos que analizaremos se preparan estados que son combinaciones lineales de estados de Rydberg con valores de  $n = 49$  y  $n = 50$ . La función de onda de un estado de este tipo,  $|\phi\rangle = (|e\rangle + |g\rangle)/\sqrt{2}$ , es tal que (a menos de una constante de normalización)

$$\begin{aligned} \phi(r, \theta, \phi, t) &= \sin^{49} e^{i49\phi} \left(\frac{r}{49r_B}\right)^{49} e^{-\frac{r}{49r_B}} e^{-iE_g t/\hbar} \\ &+ \sin^{50} e^{i50\phi} \left(\frac{r}{50r_B}\right)^{50} e^{-\frac{r}{50r_B}} e^{-iE_e t/\hbar} \end{aligned}$$

Esta expresión puede simplificarse evaluando la función de onda en el plano  $\theta = \pi/2$  y para valores de  $r$  en los cuales los dos términos de la ecuación son iguales (que son del orden de  $n^2 r_B$ ). En ese caso, es simple analizar la dependencia de la  $\phi(r, \theta, \phi, t)$  como función de  $\phi$  y del tiempo. En efecto, definiendo la frecuencia de Bohr  $\omega_A = (E_e - E_g)/\hbar \approx E_0/n^3$ , resulta que

$$\phi\left(r, \frac{\pi}{2}, \phi, t\right) \propto \cos\left(\frac{\phi - \omega_A t}{2}\right)$$

Esto tiene una interpretación simple: el estado  $\phi$ , superposición de  $|g\rangle$  y  $|e\rangle$  describe a un átomo planetario en el que el electrón está localizado en su órbita y que gira alrededor del núcleo con una frecuencia  $\omega_A$ . Es evidente que en este estado el valor medio del momento dipolar eléctrico es no nulo y con un valor cercano a  $d_0 = er_B n^2$ . El valor medio del momento dipolar es nulo en los estados  $|e\rangle$  y  $|g\rangle$  pero este operador tiene elementos de matriz no nulos entre los estados  $|e\rangle$  y  $|g\rangle$ , tal como describimos mas abajo.

Pero antes, conviene notar que los estados de Rydberg (y sus superposiciones) son muy estables, lo que también puede entenderse cualitativamente apelando a argumentos semiclásicos basados en la cuantización alla Bohr Sommerfeld: Al decaer del nivel  $n$  al  $n-1$  el átomo emite una energía  $\hbar\omega_A = (E_n - E_{n-1})/\hbar$ . Para  $n$  grande ambos estados están cerca del nivel de ionización y entonces la diferencia de energías es muy pequeña: como  $E_n = -E_0/n^2$  entonces  $\omega_{n,n-1} \propto 1/n^3$ . El tiempo de decaimiento  $\tau_n$  del nivel  $n$  al  $n-1$  puede estimarse calculando la potencia disipada en esta transición. Esta

potencia  $pot_n$  es aproximadamente igual a la diferencia de energías dividido el tiempo de vida medio, es decir:  $pot_n = \hbar\omega_{n,n-1}/\tau_n$ . Asimismo, para una carga en movimiento circular la potencia emitida es proporcional a la aceleración al cuadrado. Entonces tenemos  $pot_n \approx \hbar\omega_{n,n-1}/\tau_n \propto (\omega_{n,n-1}^2 r_n)^2$  en consecuencia, la dependencia de  $\tau_n$  con el número cuántico principal surge de la expresión

$$\tau_n \propto \frac{\hbar\omega_{n,n-1}}{(\omega_{n,n-1}^2 r_n)^2} \propto \frac{n^{-3}}{n^{-12} n^4} \propto n^5.$$

### C. Átomos de Rydberg en zonas de Ramsey

La diferencia de energía entre los estados  $|e\rangle$  y  $|g\rangle$  es tal que la frecuencia de Bohr asociada está en el rango de las micro-ondas (típicamente, para el Rb, es  $\omega_A = 51GHz$ ). Una vez preparados los átomos en el estado  $|g\rangle$  podremos preparar superposiciones arbitrarias de este estado y el estado  $|e\rangle$ . Para ello apelaremos a un recurso que ya hemos visto: Irradiaremos el átomo con un campo de radio frecuencias que resuene con la transición entre  $|g\rangle$  y  $|e\rangle$ . Esta interacción tiene lugar cuando el átomo pasa entre dos placas que están conectadas a un generador de RF apropiadamente elegido. Controlando el tiempo de interacción y la intensidad del campo podemos lograr preparar estados arbitrarios. Conviene repasar este fenómeno y generalizar ligeramente el tratamiento que realizamos anteriormente para estudiar las oscilaciones de Rabi.

En la zona de Ramsey el átomo interactúa con un campo clásico. La interacción está descrita por el siguiente Hamiltoniano:

$$H_T = \frac{\hbar\omega_A}{2} (|e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|) + \hbar\tilde{\Omega} (|e\rangle\langle g| + |g\rangle\langle e|) \cos(\omega_r t + \phi).$$

donde  $\phi$  es una fase arbitraria. Pasando a la representación de interacción (con  $H_0 = \hbar\omega_A (|e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|)/2$ ) se obtiene que

$$\tilde{H}_I = \hbar\frac{\tilde{\Omega}}{2} \cos(\omega_r t + \phi) (|e\rangle\langle g| e^{i\omega_A t} + |g\rangle\langle e| e^{-i\omega_A t})$$

Si hacemos la "aproximación de onda rotante" reteniendo los términos que dependen mas lentamente del tiempo obtenemos

$$\tilde{H}_I = \hbar\tilde{\Omega} (|e\rangle\langle g| e^{i(\omega_A - \omega_r)t - i\phi} + |g\rangle\langle e| e^{-i(\omega_A - \omega_r)t + i\phi}).$$

Para el caso resonante tenemos

$$\tilde{H}_I = \hbar\frac{\tilde{\Omega}}{2} (|e\rangle\langle g| e^{-i\phi} + |g\rangle\langle e| e^{i\phi}).$$

Este Hamiltoniano puede escribirse en términos de las matrices de Pauli  $\sigma_x = |e\rangle\langle g| + |g\rangle\langle e|$  y  $\sigma_y = -i|e\rangle\langle g| + i|g\rangle\langle e|$ . En efecto, obtenemos que

$$\tilde{H}_I = \hbar\frac{\tilde{\Omega}}{2} (\cos\phi \sigma_x + \sin\phi \sigma_y).$$

Como vemos, el Hamiltoniano en la representación de interacción es una combinación lineal de operadores de Pauli. Por lo tanto, la evolución temporal es una rotación y el operador de evolución temporal es:

$$U(t) = \cos(\tilde{\Omega}t/2) \mathbb{1} - i \sin(\tilde{\Omega}t/2) \vec{n} \cdot \vec{\sigma}.$$

Donde  $\vec{n} = \cos \phi \vec{e}_x + \sin \phi \vec{e}_y$  define la dirección del eje de rotación.

En definitiva, lo importante es recordar que en las zonas de Ramsey el estado del átomo cambia tal como lo hace un spin en un campo magnético. O sea, se inducen oscilaciones coherentes entre  $|e\rangle$  y  $|g\rangle$ . De este modo, preparando el estado inicial  $|g\rangle$  podemos obtener, luego de un tiempo apropiadamente elegido, una combinación lineal arbitraria entre este estado y el estado  $|e\rangle$ .

Para los átomos de Rydberg, los estados superposición obtenidos por esta vía tienen propiedades muy especiales. Obviamente, no son estados estacionarios y por consiguiente su función de onda cambia con el tiempo. En efecto, en un dado instante, las funciones de onda de estos estados están concentradas en circunferencias que tienen aproximadamente el mismo radio pero no tienen igual número de nodos (ya que para un estado hay 49 nodos y para el otro hay 50). En consecuencia, el estado que es superposición de  $|g\rangle$  y  $|e\rangle$  tiene una función de onda que está concentrada en una de las regiones de la órbita y que al evolucionar rota alrededor de dicha circunferencia. En definitiva, estos estados son estados planetarios: el electrón se mueve en una órbita tal como lo hace un planeta alrededor del sol. Por lo tanto, estos átomos tienen un momento dipolar enorme, que rota con la frecuencia de Bohr (que, como dijimos está en el rango de las radiofrecuencias). Debido al enorme momento dipolar, cuando estos átomos ingresan a la cavidad descrita mas abajo interactúan muy fuertemente con el campo cuántico almacenada en ella.

Por lo tanto si preparamos un estado que es superposición de  $|e\rangle$  y  $|g\rangle$  tendremos interferencia constructiva en una región de la circunferencia e interferencia destructiva en la opuesta. Un estado de este tipo se acopla muy fuertemente al campo eléctrico ya que tiene un momento dipolar enorme: El electrón está localizado en una región de la órbita circular y gira con una velocidad angular (que tiene que ver con la diferencia de energía entre los estados  $|e\rangle$  y  $|g\rangle$  que, como dijimos, está en el rango de las micro ondas). En efecto, la componente relevante del operador momento dipolar eléctrico puede aproximarse como

$$\vec{d} = d_0 e_x (|e\rangle\langle g| + |g\rangle\langle e|)$$

donde  $d_0 \propto e R_B n^2$  siendo  $R_B$  el radio de Bohr y  $n$  el número cuántico principal que, como dijimos, es cercano a  $n \approx 50$ . Denotaremos como  $\omega_A$  a la frecuencia de Bohr entre los niveles del átomo:  $E_e - E_g = \hbar \omega_A$ . Asimismo, usaremos la notación  $\sigma_- = |g\rangle\langle e|$  y  $\sigma_z = |e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|$ .

## D. Fotones en cavidades

) Consideraremos fotones atrapados en una cavidad que resuena en el rango de las microondas (y que, por lo tanto, puede ponerse en resonancia con la transición del átomo). La frecuencia de resonancia de la cavidad puede modificarse ligeramente modificando su tamaño (son cavidades de alrededor de algunos centímetros de diámetro). La relación entre la frecuencia del átomo y la de la cavidad también puede modificarse aplicando campos eléctricos estáticos que producen leves corrimientos en los niveles del átomo debido al efecto Stark. Además de estas cavidades "grandes" (que son fabricadas con espejos superconductores) existen cavidades que resuenan en el rango óptico. Estas cavidades son mucho mas pequeñas y el tiempo de vida medio del fotón en ellas es mucho mas corto que en el caso de las microondas. La ventaja que tienen frente a las cavidades de Haroche es que, como el volumen de interacción es mucho menor, se pueden alcanzar regímenes de muy alto acoplamiento. En este capítulo nos limitaremos a analizar experimentos con cavidades superconductoras. El tiempo de vida medio de las excitaciones del campo puede ser muy largo. En los experimentos de Haroche el factor de calidad de la cavidad es  $Q \geq 10^{12}$  por lo cual un fotón puede vivir en la cavidad sin ser absorbido por algunas décimas de segundo (tiempo suficiente para que la luz recorra una distancia igual a la circunferencia completa de la tierra).

## E. Estados del campo en la cavidad

El campo electromagnético en la cavidad está descrito por un estado cuántico. A tiempos muy largos la cavidad pierde toda su energía y el estado asintótico es el vacío (ya que las paredes de la cavidad están a temperaturas muy bajas, mucho menores que la energía de un fotón). A partir de este estado resulta sencillo preparar un estado coherente del campo en la cavidad. En efecto, la cavidad es capaz de almacenar un único modo del campo electromagnético. Si conectamos la cavidad a una fuente de radiofrecuencias entonces a partir del estado  $|0\rangle$  se puede preparar un estado coherente  $|\alpha(t)\rangle$ , donde  $\alpha(t)$  depende del tiempo de interacción, de la frecuencia de la cavidad y las radiofrecuencias inyectadas y de la intensidad de dicho campo. El mecanismo por el cual esto sucede fue analizado en el capítulo referido al oscilador armónico (Cómo preparar un estado coherente?).

## F. El esquema de un experimento típico

Un experimento típico combina todos los ingredientes que vimos hasta ahora: El átomo es preparado en el estado  $|g\rangle$  ( $n = 49$ ,  $l = m = 49$ ) y luego es filtrado en velocidades. El haz de átomos incide en la cavidad resonante pero antes pasa por una zona de Ramsey en la cual puede prepararse el átomo en un estado arbitrario

(que es superposición de  $|g\rangle$  y  $|e\rangle$ ). En la cavidad interactúa con el campo de una manera que describiremos mas abajo. A la salida de la cavidad pasa por otra zona de Ramsey en la cual puede ejecutarse una rotación arbitraria del estado interno. Finalmente el detector registra si el estado del átomo es  $|e\rangle$ . Teniendo en cuenta que el detector está precedido por una zona de Ramsey, el efecto combinado de estos dos dispositivos es equivalente a un detector que registre si el estado del átomo es algún estado que podemos elegir arbitrariamente.

El diagrama experimental se describe esquemáticamente en la figura. Podemos imaginar dispositivos mas complejos, con varios haces de átomos y varias cavidades. Es posible imaginar experimentos de este tipo. La gran diferencia entre estos experimentos imaginarios y los descritos en esta sección es que estos últimos no son imaginarios sino reales. Todos los experimentos reales han sido realizados, hasta el momento, con dispositivos como el de la figura (pero dispositivos mas complejos, con dos cavidades y varios haces de átomos, están siendo preparados en la actualidad).

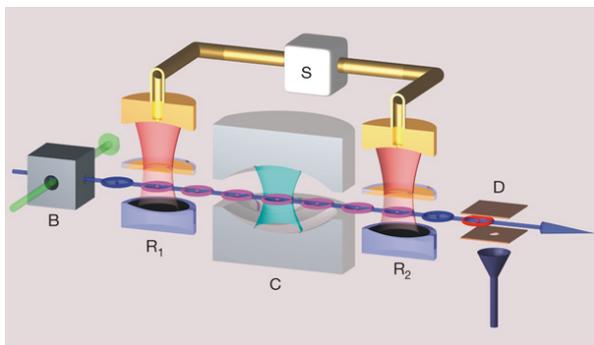


FIG. 14 El dispositivo típico en un experimento en CQED. Los átomos son preparados en estados de Rydberg. Luego atraviesan una region  $R1$  (primera zona de Ramsey), luego atraviesan la cavidad en la que interactúan con el campo, finalmente ingresan en una nueva zona de Ramsey  $R2$  y son detectados en dispositivos que inducen una ionización selectiva (o sea, detectan si el átomo está en el estado  $|e\rangle$  o en  $|g\rangle$ ).

### G. Interacción entre un átomo y el campo electromagnético

Teniendo en cuenta que los átomos de Rydberg planetarios tienen un momento dipolar muy grande, la principal fuente de interacción entre el átomo y el campo es de tipo dipolar eléctrica. En efecto, la interacción dipolar entre el átomo y el campo eléctrico se describe con el Hamiltoniano  $H_{int} = -\vec{p} \cdot \vec{E}(0)$  (donde suponemos que el átomo y el campo interactúan muy cerca de la región vecina a  $\vec{r} = 0$ ). Tal como lo vimos anteriormente, el campo eléctrico es  $\vec{E}(0) = -i\vec{e}_x E_0(a - a^\dagger)$ , donde  $a^\dagger$  y  $a$  son operadores de creación y destrucción de fotones (aquí suponemos que la cavidad está orientada a lo largo

del eje  $z$ , con paredes en  $z = 0$  y  $z = L$ ). La amplitud del campo eléctrico en el vacío es  $E_0 = \sqrt{\hbar\omega/2\epsilon_0 V}$ . Como dijimos mas arriba, el operador momento dipolar eléctrico del átomo tiene elementos de matriz no nulos entre los estados  $|g\rangle$  y  $|e\rangle$ , es decir,

$$d_x = d_0(|e\rangle\langle g| + |g\rangle\langle e|).$$

Entonces el hamiltoniano de interacción puede escribirse como

$$H_{int} = -i\hbar\gamma(\sigma_- + \sigma_+)(a - a^\dagger),$$

donde  $\hbar\gamma = d_0 E_0$ . En otras palabras,  $\gamma$  es una frecuencia característica que aparece en el problema y que está definida como  $\gamma = d_0 \sqrt{\omega/\hbar\epsilon_0 V}$  (recordemos que  $d_0 = eR_B n^2$ ).

En conclusión, el modelo simplificado de un átomo de dos niveles en interacción con un modo del campo electromagnético atrapado en una cavidad se describe mediante el siguiente Hamiltoniano

$$\begin{aligned} H_T &= H_A + H_C + H_{int} \\ H_A + H_C &= \hbar\omega_A \sigma_z + \hbar\omega_C (a^\dagger a + 1/2) \\ H_{int} &= -i\hbar\gamma(\sigma_- + \sigma_+)(a - a^\dagger). \end{aligned}$$

### H. La aproximación y el modelo de Jaynes Cummings.

Para resolver este problema es conveniente realizar una aproximación cuya naturaleza se comprende si trabajar en la representación de interacción tomando  $H_0 = H_A + H_C$  (luego volveremos a la representación de Schroedinger). Haciendo esto (y denotando  $\tilde{H}_{int} = U_0^\dagger H_{int} U_0$ ) obtenemos que

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{int} &= -i\hbar\gamma(\sigma_- e^{-i\omega_A t} + \sigma_+ e^{+i\omega_A t}) \\ &\times (a e^{-i\omega_C t} - a^\dagger e^{i\omega_C t}) \end{aligned}$$

Como vemos, en este Hamiltoniano aparecen términos que oscilan con frecuencias  $(\omega_C \pm \omega_A)$ . Los términos que dominan la evolución del sistema son siempre aquellos que varíen mas lentamente en el tiempo (en efecto, estos términos son los únicos que aparecen si calculamos un Hamiltoniano promediado en el tiempo durante una escala que es larga para los tiempos rápidamente oscilantes pero corta para los que oscilan lentamente). Estos términos son aquellos en los que aparece la diferencia entre ambas frecuencias. Definiremos la desintonía entre el átomo y la cavidad como

$$\Delta = \omega_A - \omega_C.$$

Despreciaremos la contribución de los términos que oscilan rápidamente (esta se conoce como la "aproximación de la onda rotante", RWA). En ese caso el Hamiltoniano en la representación de interacción (en la representación de interacción) resulta ser

$$\tilde{H}_{int} = -i\hbar\gamma(\sigma_+ a e^{i\Delta t} - \sigma_- a^\dagger e^{-i\Delta t}).$$

Si volvemos a la representación de Schroedinger vemos que este Hamiltoniano se origina en el siguiente Hamiltoniano de interacción

$$H_{int} \approx H_{JC} = -i\hbar\gamma(a\sigma_+ - a^\dagger\sigma_-).$$

Este Hamiltoniano define el modelo que usaremos en este capítulo para describir la interacción entre el átomo de dos niveles y los fotones de la cavidad. Su interpretación es sencilla: contiene un término que induce la destrucción de un fotón y la excitación del átomo (el término que contiene el producto  $a \otimes \sigma_+$ ) y otro término que induce la creación de un fotón a expensas de la energía del átomo (el término proporcional a  $a^\dagger \otimes \sigma_-$ ). Es decir, el Hamiltoniano a resolver es

$$\begin{aligned} H_T &= H_A + H_C + H_{JC} \\ H_A + H_C &= \hbar\omega_A\sigma_z + \hbar\omega_C(a^\dagger a + 1/2) \\ H_{JC} &= -i\hbar\gamma(\sigma_+ a - \sigma_- a^\dagger) \end{aligned}$$

El modelo de Jaynes Cummings es suficientemente sencillo como para admitir una solución exacta pero describe un física muy rica y es aplicable a situaciones realistas de interés experimental.

### I. Solución del modelo de Jaynes Cummings

La solución de este modelo es sencilla y puede hacerse en forma exacta. Para eso conviene escribir el Hamiltoniano  $H_T$  en la base del autoestados de  $H_0 = H_A + H_C$ . Esta base es

$$\mathcal{B} = \{|g\rangle \otimes |n\rangle, |e\rangle \otimes |n\rangle, n \geq 0\},$$

(los estados  $|n\rangle$  son estados con  $n$  fotones, o sea, cumplen que  $\hat{N}|n\rangle = a^\dagger a|n\rangle = n|n\rangle$ ). Por simplicidad omitiremos el símbolo del producto tensorial  $\otimes$ : y denotaremos a esta base como  $\mathcal{B} = \{|g, n\rangle, |e, n\rangle, n \geq 0\}$ .

La solución puede hacerse siguiendo los siguientes pasos:

1. Estado fundamental: En primer lugar, es fácil identificar cual es el estado fundamental de  $H_T$ . En efecto,  $H_{JC}$  es tal que

$$H_{JC}|g, 0\rangle = 0,$$

(lo cual se deduce usando que  $a|0\rangle = 0$  y  $\sigma_-|g\rangle = 0$ ). En consecuencia,  $|g, 0\rangle$  es el estado fundamental de  $H_T$  ya que es autoestado de  $H_0$  y también de  $H_{JC}$ . El autovalor asociado a  $|g, 0\rangle$  es obviamente el mismo que el autovalor para  $H_0$ , es decir:  $H_T|g, 0\rangle = E^{(0)}|g, 0\rangle$  con

$$E_{g,0}^{(0)} = -\frac{\hbar\Delta}{2}.$$

(recordemos que  $\Delta$  es la desintonía :  $\Delta = \omega_A - \omega_C$ .

2. Subespacios invariantes. El resto de los vectores de la base  $\mathcal{B}$  son autoestados de  $H_0$  pero no son autoestados de  $H_{JC}$ . Sin embargo, es fácil ver que  $H_{JC}$  es diagonal por bloques de  $2 \times 2$  en la base  $\mathcal{B}$ . Para ver esto, podemos considerar los subconjuntos de  $\mathcal{B}$  formados por los vectores

$$\mathcal{B}_n = \{|e, n\rangle, |g, n+1\rangle\},$$

para cada  $n \geq 0$ .

Evidentemente la base  $\mathcal{B}$  es la unión del estado fundamental  $|g, 0\rangle$  y de todos los conjuntos  $\mathcal{B}_n$ . Es fácil ver que  $H_{JC}$  no mezcla los subespacios generados por cada uno de los conjuntos  $\mathcal{B}_n$ . Es decir, estos subespacios son subespacios invariantes frente a la dinámica del sistema: un estado que sea combinación lineal de los vectores de la base  $\mathcal{B}_n$  evolucionará en otro que también sea combinación lineal de esos vectores.

Para ver que los subespacios generados por los vectores de  $\mathcal{B}_n$  son invariantes basta con notar que al aplicar el Hamiltoniano  $H_{JC}$  al vector  $|e, n\rangle$  obtenemos un vector proporcional a  $|g, n+1\rangle$  (y viceversa). De esto surge que los espacios generados por  $\mathcal{B}_n$  no están conectados entre si. Los elementos de la matriz de  $H_{JC}$  en cada uno de esos subespacios son:

$$H_n = \hbar \begin{pmatrix} (n+1)\omega_C + \Delta/2 & -i\gamma\sqrt{n+1} \\ i\gamma\sqrt{n+1} & (n+1)\omega_C - \Delta/2 \end{pmatrix}.$$

Para demostrar esta última identidad hay que usar que los operadores de creación y destrucción satisfacen  $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$  y  $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ .

3. Los estados excitados. La diagonalización de las matrices de  $H_T$  restringida al subespacio  $\mathcal{B}_n$  es muy sencilla. Para hacerlo no es necesario hacer ninguna cuenta sino utilizar los conocimientos que adquirimos hasta ahora:  $H_n$  es una matriz de  $2 \times 2$  que se puede escribir como combinación lineal de la identidad  $\mathbb{1}$  y de las matrices de Pauli. En efecto:

$$\begin{aligned} H_n &= (n+1)\hbar\omega_C\mathbb{1} + \frac{\hbar\Delta}{2}\sigma_z + \gamma\sqrt{n+1}\sigma_y \\ &= a_n\mathbb{1} + \vec{b}_n \cdot \vec{\sigma}, \end{aligned}$$

donde definimos la constante  $a_n$ , y el vector  $\vec{b}_n$  como

$$\begin{aligned} \vec{b}_n &= \frac{\Delta}{2}\vec{e}_z + \gamma\sqrt{n+1}\vec{e}_y \\ a_n &= (n+1)\omega_C \end{aligned}$$

Es inmediato probar que los autovalores del operador  $H_n$ , y los proyectores asociados a dichos autovalores son

$$\begin{aligned} E_{n,\pm} &= a_n \pm |\vec{b}_n| \\ \mathcal{P}_{n,\pm} &= \frac{1}{2}(\mathbb{1} \pm \frac{\vec{b}}{|\vec{b}|} \cdot \sigma). \end{aligned}$$

Esto surge de lo visto sobre autovalores y autovectores de operadores que se escriben como combinación lineal de matrices de Pauli y surge del hecho de que  $(\vec{b} \cdot \vec{\sigma})^2 = |\vec{b}|^2$ . De manera más explícita, podemos escribir

$$E_{n\pm} = \hbar(n+1)\omega_C \pm \hbar\sqrt{\frac{\Delta^2}{4} + \gamma^2(n+1)},$$

$$\mathcal{P}_{n,\pm} = \frac{1}{2}(\mathbb{1} \pm \frac{1}{\sqrt{\frac{\Delta^2}{4} + \gamma^2(n+1)}}(\frac{\Delta}{2}\sigma_z + \gamma\sqrt{n+1}\sigma_y))$$

Analizaremos en lo que sigue dos casos límites relevantes: a) el caso resonante  $\Delta = 0$  y b) el caso muy fuera de la resonancia  $\Delta \gg g$ .

### J. Interacción resonante entre el átomo y la cavidad

En el caso resonante el átomo y la cavidad tienen la misma frecuencia (o sea  $\Delta = 0$ ). En ese caso los autovalores y autovectores son

$$E_{n\pm} = \hbar(n+1)\omega_C \pm \gamma\sqrt{n+1},$$

$$\mathcal{P}_{n,\pm} = \frac{1}{2}(\mathbb{1} \pm \sigma_y)$$

En consecuencia, los autoestados del  $H_n$  son autoestados de  $\sigma_y$ , que pueden escribirse como:

$$|\phi_{n\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e, n\rangle \pm i|g, n+1\rangle).$$

De lo que acabamos de hacer surge, de manera trivial, un resultado notable: Si el sistema es preparado inicialmente en alguno de los dos vectores de  $\mathcal{B}_n$  la evolución temporal es tal que a tiempos posteriores el estado es una superposición coherente del siguiente tipo:

$$\begin{aligned} |e, n\rangle &\rightarrow e^{-i(n+1)\omega_C t} (\cos \Omega_n t |e, n\rangle + \sin \Omega_n t |g, n+1\rangle) \\ |g, n+1\rangle &\rightarrow e^{-i(n+1)\omega_C t} (-\sin \Omega_n t |e, n\rangle + \cos \Omega_n t |g, n+1\rangle). \end{aligned}$$

La frecuencia de la oscilación coherente es  $\Omega_n = \gamma\sqrt{n+1}$  (notar que esta frecuencia depende del número de fotones por vía del factor  $\sqrt{n+1}$  (en las dos expresiones anteriores omitimos una fase global). Conviene escribir, a partir de las ecuaciones anteriores, la forma general del operador de evolución temporal. Dado que el Hamiltoniano  $H_n$  genera una rotación alrededor del eje  $\vec{e}_y$ , entonces el operador de evolución restringido al subespacio generado por la base  $\mathcal{B}_n$  es

$$U_n(\Omega_n t) = e^{-i(n+1)\omega_C t} (\cos \Omega_n t \mathbb{1} - i\sigma_y \sin \Omega_n t)$$

$$U_n(\Omega_n t) = e^{-i(n+1)\omega_C t} \begin{pmatrix} \cos \Omega_n t & -\sin \Omega_n t \\ \sin \Omega_n t & \cos \Omega_n t \end{pmatrix}.$$

Este operador depende del producto  $\Omega_n t$ . Para distintos valores de este producto, el efecto de la interacción es drásticamente distinto. Es por eso que controlando

el tiempo de interacción podemos lograr que el sistema evolucione de manera muy diferente. Algunos ejemplos particularmente relevantes son los denominados "pulsos- $\frac{\pi}{2}$ " (que corresponde al caso en el que  $\Omega_n t = \pi/4$ ) y el "pulso- $\pi$ " (que se obtiene para  $\Omega_n t = \pi/2$ ). Podemos definir el "pulso- $2\pi$ " (obtenido cuando  $\Omega_n t = \pi$ , pero este resulta trivial, como vemos más abajo). Los operadores de evolución para cada uno de estos "pulsos" (que no son otra cosa que acciones físicas que ejecutamos sobre el sistema, y que implementamos controlando el tiempo de interacción que se modifica cambiando la velocidad de los átomos) son está definido por el siguiente operador de evolución temporal:

$$U_n(\frac{\pi}{2}) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\pi\frac{(n+1)\omega_C}{\Omega_n}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix},$$

$$U_n(\pi) = e^{-i2\pi\frac{(n+1)\omega_C}{\Omega_n}} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$U_n(2\pi) = e^{-i4\pi\frac{(n+1)\omega_C}{\Omega_n}} \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Caba acotar que la notación está inspirada en el hecho de que el operador  $U_n(\phi)$  rota el vector que representa al estado en la esfera de Bloch en un ángulo  $\phi$ . En lo que sigue, omitiremos la fase que aparece frente a los operadores que definen a estos tres pulsos y nos referiremos a ellos como "pulso- $\frac{\pi}{2}$ ", "pulso- $\pi$ ", etc.

Es interesante notar que si preparamos el estado  $|e, n\rangle$  luego de un cierto tiempo obtendremos el estado  $|g, n+1\rangle$  en el cual el átomo a "decaído" al nivel fundamental emitiendo un fotón. Sin embargo, este decaimiento es totalmente reversible. En efecto, la presencia de la cavidad hace que este fotón no pueda escapar e interactúe nuevamente con el átomo. En este proceso, la evolución se revierte y la energía es reabsorbida por el átomo: después de un cierto tiempo, el estado del conjunto volverá a ser  $|e, n\rangle$ . Las oscilaciones son análogas a las oscilaciones de Rabi y tienen importantes implicancias físicas que serán estudiadas en ejercicios posteriores.

### K. Interacción no resonante entre el átomo y la cavidad

Cuando la desintonía entre el átomo y la cavidad es grande, o sea cuando  $|\Delta| \gg g$ . En este caso, usar la expresión anterior para la energía reemplazando  $\sqrt{\frac{\Delta^2}{4} + \gamma^2(n+1)} \approx \frac{\Delta}{2}(1 + 2(n+1)\frac{\gamma^2}{\Delta^2})$ . Entonces, los autovalores de  $H_n$  son

$$E_{n\pm} = (n+1)\hbar\omega_C \pm \hbar\frac{\Delta}{2} \pm (n+1)\hbar\frac{\gamma^2}{\Delta}.$$

Si la desintonía es positiva ( $\Delta = \omega_A - \omega_C \geq 0$ ) entonces  $E_{n,+} \geq E_{n,-}$  y los estados  $|n, \pm\rangle$  coinciden respectivamente con los autoestados de  $H_0$ :  $|n, +\rangle = |e, n\rangle$  y  $|n, -\rangle = |g, n+1\rangle$ . En ese caso, las energías de estos

estados son

$$E_{n,+} = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_C + \hbar\frac{\omega_A}{2} + (n+1)\hbar\frac{\gamma^2}{\Delta}$$

$$E_{n,-} = (n + \frac{3}{2})\hbar\omega_C - \hbar\frac{\omega_A}{2} - (n+1)\hbar\frac{\gamma^2}{\Delta}$$

En cambio, si la desintonía es negativa el orden de las energías se invierte ya que  $E_{n,-} \geq E_{n,+}$  y el estado de mayor energía es  $|g, n+1\rangle$  en lugar de  $|e, n\rangle$ . En ese caso

$$E_{n,+} = (n + \frac{3}{2})\hbar\omega_C - \hbar\frac{\omega_A}{2} - (n+1)\hbar\frac{\gamma^2}{|\Delta|}$$

$$E_{n,-} = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_C + \hbar\frac{\omega_A}{2} + (n+1)\hbar\frac{\gamma^2}{|\Delta|}$$
(92)

La dependencia general de la energía en función de la desintonía puede verse en la figura en la que también se incluyen los autoestados en los casos límites.

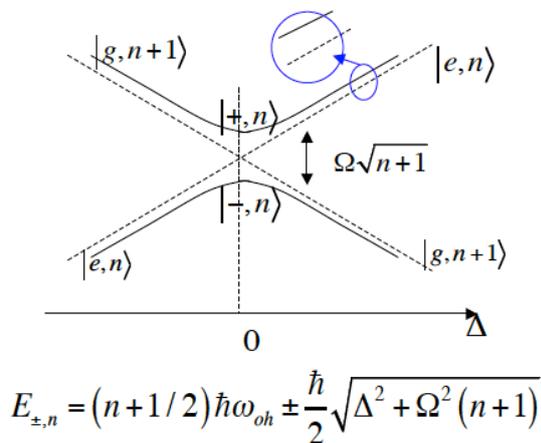


FIG. 15 Los niveles de energía del Hamiltoniano de Jaynes Cummings en función de la desintonía. En el caso resonante los autoestados son combinaciones lineales de  $|e, n\rangle$  y  $|g, n+1\rangle$  mientras que en el caso de alta desintonía los autoestados son estos dos vectores (dependiendo del signo de la desintonía, uno u otro puede ser el de mas baja energía).

Es importante notar que en este límite, la interacción entre el átomo y el campo no modifica los autoestados del Hamiltoniano (que siguen siendo aproximadamente los autoestados de  $H_0$ ). El efecto no-trivial de la interacción es cambiar la energía de estos estados. El cambio en la energía es no trivial ya que depende del número de fotones y del estado del átomo. Para  $\Delta \geq 0$  para cada uno de los estados  $|e, n\rangle$  y  $|g, n+1\rangle$  podemos calcular la diferencia entre el autovalor de  $H_T$  y el autovalor de  $H_0$ . Este es el cambio en la energía de los estados debido a la interacción con el campo. A partir de las expresiones anteriores es fácil ver que

$$\Delta E_{e,n} = E_{+,n} - E_{e,n}^{(0)} = \hbar\frac{\gamma^2}{\Delta}(n+1)$$

$$\Delta E_{g,n} = E_{-,n-1} - E_{g,n}^{(0)} = -\hbar\frac{\gamma^2}{\Delta}n,$$

La última expresión muestra que para  $n=0$  la energía del estado fundamental  $|g, 0\rangle$  no cambia (o sea,  $\Delta E_{g,0} = 0$ ).

### L. El corrimiento de Lamb y el desfase inducido por cada fotón

De este resultado observamos un fenómeno bastante notable: En ausencia de fotones, la energía del estado excitado del átomo cambia: O sea, la energía del estado  $|e, 0\rangle$  no es el autovalor de  $H_0$ . El vacío electromagnético produce un cambio en la energía del nivel  $|e\rangle$ . En efecto, para  $n=0$  vemos que el corrimiento de la energía del estado  $|e\rangle$  es

$$\Delta E_{e,0} = \hbar\frac{\gamma^2}{\Delta}$$

Este cambio de energía debido a la interacción del átomo con el campo en el estado de vacío se denomina corrimiento de Lamb.

Por otra parte, vemos que en presencia de  $n$  fotones, los estados  $|e\rangle$  y  $|g\rangle$  se desfasan a un ritmo que es igual a  $\xi = 2\gamma^2/\Delta$  por cada fotón presente en la cavidad. En efecto,  $\xi$  es el corrimiento de fase por fotón. Este resultado es muy importante desde el punto de vista físico y tiene una gran cantidad de aplicaciones que analizaremos en los siguientes ejercicios.

Para resumir en el caso no resonante (que también se denomina, el caso de interacción dispersiva), podemos escribir la evolución de los vectores de la base  $\mathcal{B}_n$  como

$$|e, n\rangle \rightarrow e^{-i\frac{E_{e,n}^{(0)}}{\hbar}t} |e, n\rangle e^{-i\frac{\gamma^2}{\Delta}(n+1)t}$$

$$|g, n\rangle \rightarrow e^{-i\frac{E_{g,n}^{(0)}}{\hbar}t} |g, n\rangle e^{+i\frac{\gamma^2}{\Delta}nt}.$$
(93)

Podemos reescribir esto de una manera diferente, absorbiendo el corrimiento Lamb en un nuevo Hamiltoniano  $H'_0$  que está definido como  $H'_0 = H_0 + \hbar\frac{\gamma^2}{\Delta}|e\rangle\langle e|$ . En este caso, las expresiones anteriores se reducen a

$$|e, n\rangle \rightarrow e^{-i\frac{E'_{e,n}{}^{(0)}}{\hbar}t} |e, n\rangle e^{-i\frac{\gamma^2}{\Delta}nt}$$

$$|g, n\rangle \rightarrow e^{-i\frac{E'_{g,n}{}^{(0)}}{\hbar}t} |g, n\rangle e^{+i\frac{\gamma^2}{\Delta}nt}.$$
(94)

A partir de estas expresiones, resulta evidente que si pasamos a una representación de interacción con el Hamiltoniano libre  $H'_0$  (es decir, si definimos los estados  $|\tilde{\phi}\rangle = \exp(iH'_0 t/\hbar)|\phi\rangle$ ) los estados en esa representación evolucionan como

$$|\tilde{e}, \tilde{n}\rangle \rightarrow |\tilde{e}, \tilde{n}\rangle e^{-i\frac{\gamma^2}{\Delta}nt}$$

$$|\tilde{g}, \tilde{n}\rangle \rightarrow |\tilde{g}, \tilde{n}\rangle e^{+i\frac{\gamma^2}{\Delta}nt}.$$
(95)

O sea, la interacción con el campo, introduce un desfase entre los estados  $|e, n\rangle$  y  $|g, n\rangle$  que es igual a  $2\gamma^2/\Delta$  por cada fotón presente en la cavidad. En este caso, el operador de evolución en la base formada por los vectores  $\{|g, 0\rangle, |e, 0\rangle, |g, 1\rangle, |e, 1\rangle\}$  es

$$U_{NR}(\phi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\phi} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\phi} \end{pmatrix},$$

$$\phi = \frac{\gamma^2}{\Delta} t$$

En la representación de Schroedinger, la evolución del sistema formado por el átomo y el campo puede obtenerse combinando tres operaciones: dos operaciones "locales" que afectan al átomo y al campo por separado y una interacción que está descrita por el operador  $U_{NR}$ . Es decir:

$$U(t) = (U_{0,A} \otimes \mathbb{1}_C) \times (\mathbb{1}_A \otimes U_{0,C}) \otimes U_{NR}$$

donde  $U_{0,A} = \exp(-iH_0^A t/\hbar)$  y  $U_{0,C} = \exp(-i\omega_C t(n + 1/2))$ .

### M. Evidencia directa de la cuantización del campo electromagnético

La primera evidencia directa de la cuantización del campo electromagnético (la existencia de estados de Fock con un número entero de fotones) fue obtenida en un experimento notable de Serge Haroche y sus colaboradores (ver Phys. Rev. Lett. (1996) y Physics Today (1997)). El experimento puede describirse y comprenderse utilizando los elementos que vimos hasta aquí. Consideramos un átomo de dos niveles que inicialmente es preparado en el estado  $|\phi_A(0)\rangle = |e\rangle$  (este estado puede prepararse a partir del estado  $|g\rangle$  aplicando un pulso apropiado en la zona de Ramsey  $R_1$ ). Por su parte, el estado inicial del campo en la cavidad es un estado coherente  $|\alpha\rangle$  (que puede prepararse a partir del estado de vacío  $|0\rangle$  aplicando un campo de radio frecuencias en la cavidad, tal como se describe mas arriba). En consecuencia el estado del sistema compuesto por el átomo y el campo es

$$|\psi_{AC}(0)\rangle = |e\rangle \otimes |\alpha\rangle$$

El átomo atraviesa la cavidad en la que está almacenado el campo. El átomo y la cavidad están en resonancia (o sea  $\Delta = \omega_A - \omega_C = 0$ ). El tiempo de tránsito del átomo en la cavidad (que denotaremos como  $t$ ) puede ser controlado variando la velocidad del haz de átomos. En lo que sigue veremos que midiendo el estado del átomo a la salida podemos obtener una señal clara de la estadística de los fotones dentro de la cavidad y demostrar que dicha estadística corresponde a la distribución de Poisson que caracteriza univocamente a los estados coherentes. Analizaremos esta situación en las siguientes etapas:

1. Primero calcularemos el estado del sistema formado por el átomo y el campo después de un tiempo de interacción  $t$ . En el instante inicial, el estado del átomo y el campo es  $|\Psi_{AC}(0)\rangle = |e\rangle_A \otimes |\alpha\rangle_C$ . Teniendo en cuenta que

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n \geq 0} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

Este estado puede reescribirse como

$$|\Psi_{AC}(0)\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n \geq 0} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |e, n\rangle.$$

Como vimos mas arriba, un estado inicial  $|e, n\rangle$  evoluciona en una combinación lineal de los estados  $|e, n\rangle$  y  $|g, n+1\rangle$ . La frecuencia de dicha oscilación es  $\Omega_n = \gamma\sqrt{n+1}$ . Por lo tanto, el estado del sistema compuesto resulta ser

$$|\Psi_{AC}(t)\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n \geq 0} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} (\cos(\Omega_n t) |e, n\rangle + \sin(\Omega_n t) |g, n+1\rangle).$$

Por lo tanto, el campo y el átomo están en un estado entrelazado. :

2. Calculemos ahora la probabilidad de detectar al átomo en el estado  $|e\rangle$  (esta medición se realiza en el detector que ioniza selectivamente al átomo y que produce una señal sólo si el átomo está en el estado  $|e\rangle$ ).

Para obtener la probabilidad de detectar al átomo en el estado  $|e\rangle$  debemos calcular el valor medio del proyector  $P_e = |e\rangle\langle e| \otimes \mathbb{1}$  en el estado del conjunto átomo-campo. Esto es:

$$\text{Prob}(|e\rangle, t) = e^{-|\alpha|^2} \sum_{n \geq 0} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \cos^2(\Omega_n t). \quad (96)$$

Esta probabilidad depende de  $\alpha$  y del tiempo de interacción. En particular, para  $\alpha = 0$  el único término que contribuye en la sumatoria es el  $n = 0$ . En efecto, en ese caso tenemos que la probabilidad oscila con una frecuencia  $\Omega_0$ :

$$\text{Prob}(|e\rangle, t)|_{\alpha=0} = \cos^2(\Omega_0 t).$$

Estas oscilaciones son inducidas por la interacción entre el átomo y el vacío electromagnético y se denominan "oscilaciones de Rabi de vacío". Fueron observadas por primera vez en 1996. Para otros valores de  $\alpha$  la probabilidad de detección del átomo en el estado  $|e\rangle$  nos brinda una gran información. En efecto, cada autovalor del operador número en la cavidad contribuye con un término que depende del tiempo con una frecuencia característica  $\Omega_n$  que depende de  $n$  por vía de la relación  $\Omega_n = \gamma\sqrt{n+1}$ .

Para revelar estas contribuciones debemos medir la probabilidad para distintos tiempo y luego calcular la transformada de Fourier de esta señal. De este modo obtenemos directamente la función  $p_n(\alpha)$  definida como aquella tal que  $\text{Prob}(|e\rangle, t) = \sum_{n \geq 0} p_n(\alpha) \cos^2(\Omega_n t)$ . Una vez medida esta función, podemos ver cual es el valor de  $\alpha$  que mejor ajusta la función medida con la que se parametriza de la siguiente manera  $p_n(\alpha) = \exp(-|\alpha|^2) |\alpha|^{2n} / n!$  (la distribución de Poisson). Es interesante graficar esta función para distintos valores de  $\alpha$  (razonablemente chicos) y compararlos con el resultado experimental reportado en el paper de Brune et al (PRL 1996). Los resultados experimentales se muestran en la figura que sigue:

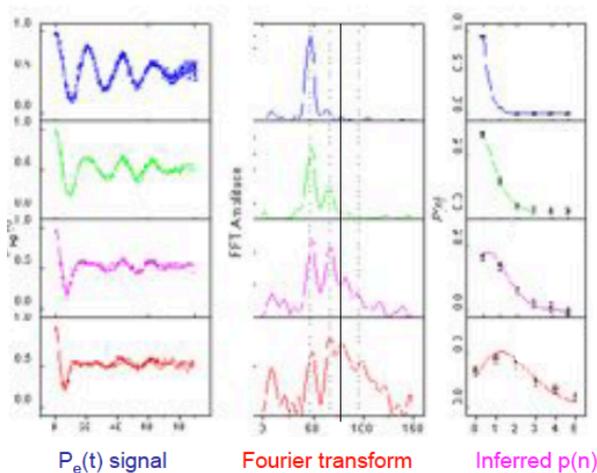


FIG. 16 La probabilidad de detectar al átomo en el estado  $|e\rangle$  luego de un tiempo  $t$  a partir de un estado coherente en la cavidad. El átomo y la cavidad están en resonancia. La probabilidad medida revela directamente la probabilidad de medir  $n$  fotones en un estado coherente. Todos los resultados pueden ser fitados por la distribución de Poisson con un único parámetro libre ( $\alpha$ ). En la figura las distintas filas corresponden a distintos valores de  $\alpha$  que van desde  $\alpha = 0$  (fila superior) hasta  $\alpha = 1.7$  (fila inferior).

#### N. Cómo entrelazar dos átomos distantes?

Consideremos dos átomos  $A_1$  y  $A_2$ . Veremos que usando los dispositivos descriptos mas arriba es posible preparar el siguiente estado entrelazado entre los dos átomos:

$$|\phi_{A_1, A_2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_1, g_2\rangle - |g_1, e_2\rangle).$$

Para hacerlo usaremos un haz de dos átomos que no interactúan directamente entre si. Además usaremos una cavidad ideal que resuena con ambos átomos. Los átomos atraviesan la cavidad de a uno e interactúan con el campo electromagnético almacenado en la misma cavidad.

Supondremos que el estado del campo electromagnético dentro de la cavidad es inicialmente el vacío:  $|\Psi_C(0)\rangle = |0\rangle$ . En primer lugar preparamos al primer átomo en un estado  $|\Psi_1(0)\rangle = |e_1\rangle$  (tal como explicamos mas arriba, podemos preparar este estado a partir de  $|g\rangle$  usando una zona de Ramsey con el campo apropiadamente elegido). Este átomo pasa por la cavidad durante un tiempo tal que la interacción genera un operador de evolución  $U_n(\pi/2)$  (un pulso  $-\pi/2$ ). Teniendo en cuenta que el estado del campo es el vacío, el operador de evolución es  $U_0(\frac{\pi}{2})$  definido mas arriba. Al finalizar la interacción el estado del sistema formado por el primer átomo y la cavidad es:

$$|\Psi_{A_1, C}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_1, 0\rangle + |g_1, 1\rangle).$$

Una vez producido este estado, se hace incidir al segundo átomo en la cavidad. Este átomo se prepara en el estado  $|g_2\rangle$ . En ese caso se elige el tiempo de interacción tal que el operador de evolución temporal es  $U_0(\pi)$  (un pulso  $\pi$ ). En ese caso el estado del conjunto formado por los dos átomos y la cavidad evolucionará de la siguiente manera

$$\begin{aligned} |\Psi_{A_2, A_1, C}\rangle &= |g_2\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_1, 0\rangle + |g_1, 1\rangle) \\ &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|g_2, e_1, 0\rangle - |e_2, g_1, 0\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|g_2, e_1\rangle - |e_2, g_1\rangle) \otimes |0\rangle_C \end{aligned}$$

En este esquema, el estado final del campo en la cavidad es el estado de vacío (o sea, el estado final del campo es igual al estado inicial). En efecto, el único rol del campo es actuar de intermediario entre los dos átomos. Los átomos se entrelazan pese a que no interactúan directamente entre si. Su interacción está mediada por el campo en la cavidad.

#### O. Cómo entrelazar el campo electromagnético entre dos cavidades distantes

Este experimento, a diferencia de los anteriores, es un experimento imaginario ya que todavía no ha sido posible construir un dispositivo con dos cavidades que funcione apropiadamente (manteniendo la coherencia cuántica por un tiempo razonablemente largo). Suponiendo que tenemos dos cavidades a nuestra disposición veremos como podemos preparar un estado del campo electromagnético que sea

$$|\Psi_{C_1, C_2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_1, 1_2\rangle + |1_1, 0_2\rangle).$$

Para preparar este estado vamos a utilizar un único átomo, que atraviesa las dos cavidades. Nuevamente, no hay interacciones directas entre los fotones en ambas cavidades pero hay interacciones de ambos con el

átomo. De este modo, el átomo actúa como mediador de la interacción entre los campos almacenados en ambas cavidades.

Supondremos que las dos cavidades son idénticas y ambas resuenan con el átomo. El estado inicial del campo electromagnético dentro de ambas cavidades es vacío:

$$|\Psi_{C_1, C_2}\rangle = |0_1, 0_2\rangle.$$

En primer lugar preparamos al átomo en el estado  $|\phi_A\rangle = |e\rangle$  (que se obtiene a partir de  $|g\rangle$  usando la zona de Ramsey). Luego el átomo pasa por la primera cavidad durante un tiempo tal que la interacción entre ambos genera un operador de evolución temporal  $U_0(\frac{\pi}{2})$  (un pulso  $\pi/2$ ). Al finalizar la interacción entre el átomo y la primera cavidad, el estado del sistema formado por el átomo y las dos cavidades es:

$$|\Psi_{A, C_1, C_2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e, 0_1, 0_2\rangle + |g, 1_1, 0_2\rangle).$$

Seguidamente enviamos el mismo átomo por la segunda cavidad de modo tal que la interacción entre ambos es un pulso  $\pi$ , o sea, el operador de evolución temporal es  $U_0(\pi)$  definido mas arriba. El estado del sistema compuesto por el átomo y las dos cavidades se transforma en:

$$\begin{aligned} |\Psi_{A, C_1, C_2}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|g, 0_1, 1_2\rangle + |g, 1_1, 0_2\rangle) \\ &= \frac{i}{\sqrt{2}}|g\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_1, 1_2\rangle + |1_1, 0_2\rangle) \end{aligned} \quad (97)$$

Es decir, el estado final del átomo es  $|g\rangle$  lo cual implica que el átomo entrega su energía para producir un fotón. Pero ese fotón no está en una cavidad o en la otra sino en ambas a la vez. El estado es, en algún sentido, el estado análogo a uno en el cual la luz está encendida "aquí y allá".

#### P. Cómo transferir el estado de un átomo a la cavidad (y viceversa)

Supongamos que tenemos un átomo en un estado arbitrario y una cavidad vacía. Es decir, el estado inicial del sistema conjunto es

$$|\psi_{AC}(0)\rangle = (\alpha|e\rangle + \beta|g\rangle) \otimes |0\rangle$$

Es fácil ver que si el átomo atraviesa la cavidad de modo tal que la evolución es un pulso  $\pi$ , que está descrito por el operador  $U_0(\pi)$ , el estado final resulta ser

$$|\psi_{AC}(t)\rangle = |g\rangle \otimes (\alpha|1\rangle + \beta|0\rangle).$$

Es decir, esta operación "transfiere" el estado del átomo a la cavidad. El estado final del átomo es  $|g\rangle$  y el de la cavidad está definido por los coeficientes arbitrarios  $\alpha$  y  $\beta$ .

La operación inversa es también obviamente válida. Si tenemos un estado inicial de la forma

$$|\psi'_{AC}(0)\rangle = |g\rangle \otimes (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle),$$

entonces la aplicación de un pulso  $\pi$  dará lugar al estado

$$|\psi'_{AC}(t)\rangle = (\alpha|g\rangle - \beta|e\rangle) \otimes |0\rangle.$$

El signo negativo en el segundo término de la ecuación anterior no es un problema: si en lugar de un pulso  $\pi$  aplicamos un pulso  $3\pi$  tendremos que el signo se transforma y el estado del átomo resulta ser  $\alpha|g\rangle + \beta|e\rangle$ .

#### Q. Cómo detectar un fotón sin absorberlo?

Usando los ingredientes introducidos hasta ahora podemos desarrollar un método novedoso para detectar fotones. En efecto, las técnicas que se utilizan habitualmente para detectar fotones se basan en que la energía transportada por estos es absorbida y genera una corriente eléctrica (esto ocurre en un fotodetector). Pero, naturalmente, el fotón desaparece al ser detectado ya que es absorbido. Hasta el surgimiento de las técnicas descritas en este capítulo no existían métodos que permitieran detectar la presencia de un fotón sin absorberlo. Veremos aquí cómo es posible hacer esto. Este avance representa no solamente un adelanto tecnológico sino también un avance conceptual.

Considere una cavidad ideal tal que el estado inicial del campo electromagnético tiene un número de fotones bien definido (por ejemplo, un único fotón, pero el método se aplica a estados de  $n$  fotones). Veremos que después de la detección, el estado del campo sigue teniendo el mismo número de fotones.

La medición no destructiva del número de fotones en la cavidad puede realizarse utilizando un átomo de dos niveles. El átomo es preparado inicialmente en un estado

$$|\Psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|g\rangle + |e\rangle).$$

Este estado, como siempre, puede ser preparado a partir del estado  $|g\rangle$  mediante la aplicación de un campo apropiadamente elegido en una zona de Ramsey. El estado del átomo y la cavidad es

$$|\Psi_{A, C}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|g\rangle + |e\rangle) \otimes |n\rangle.$$

Supongamos que la desintonía entre la cavidad y el átomo es alta (es decir, que la frecuencia del átomo es muy diferente de la de la cavidad,  $\Delta \gg \max(|\omega_A|, |\omega_C|)$ ). Como vimos, en este caso los estados  $|e, n\rangle$  y  $|g, n\rangle$  son autoestados del Hamiltoniano total pero tienen una fase diferente, que depende de  $n$  de manera no trivial. Por lo tanto, el estado completo del átomo y la cavidad, luego de un tiempo  $t$  es (a menos de una fase global)

$$\begin{aligned} |\Psi_{A, C}(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-i\frac{\omega_A}{2}t - i(n+1)\frac{\Delta}{2}t}|e\rangle \\ &+ e^{i\frac{\omega_A}{2}t + in\frac{\Delta}{2}t}|g\rangle) \otimes |n\rangle \end{aligned}$$

Después de atravesar la cavidad, el átomo ingresa en una nueva zona de Ramsey en la cual se induce un operador de evolución temporal (mediante la aplicación de un pulso de radiofrecuencias) que transforma los estados atómicos  $|e\rangle$  y  $|g\rangle$  en  $(|e\rangle \pm |g\rangle)/\sqrt{2}$  respectivamente). El estado luego de esta operación (que se hace sobre el átomo una vez que este sale de la cavidad) es:

$$|\Psi_{A,C}(t')\rangle = e^{-i\frac{\gamma^2}{2\Delta}t} \left( \cos\left(\frac{\omega_A}{2}t + \frac{\gamma^2}{\Delta}\left(n + \frac{1}{2}\right)t\right)|e\rangle + i \sin\left(\frac{\omega_A}{2}t + \frac{\gamma^2}{\Delta}\left(n + \frac{1}{2}\right)t\right)|g\rangle \right) \otimes |n\rangle$$

Por lo tanto, la probabilidad de detectar al átomo en el estado  $|e\rangle$  es

$$\text{Prob}(|e\rangle, t) = \cos^2\left(\frac{\omega_A}{2}t + \frac{\gamma^2}{\Delta}\left(n + \frac{1}{2}\right)t\right). \quad (98)$$

Entonces, midiendo esta probabilidad como función del tiempo  $t$ , podemos extraer directamente la información sobre el número de fotones  $n$ . Para hacer esto debemos enviar átomos idénticamente preparados que atraviesan la cavidad de a uno a la vez. En todos los casos, el número de fotones dentro de la cavidad permanece constante. Por ese motivo, este procedimiento constituye una medición no destructiva del número de fotones (que no demuele al estado).

### R. Cómo criar un gato de Schroedinger dentro de una cavidad?

Otra de las proezas del grupo de Haroche en la Ecole Normale Supérieure de Paris fue la preparación de estados tipo "gato de Schroedinger" del campo electromagnético dentro de una cavidad. Veremos cómo es posible hacer esto y presentaremos el método para preparar estados de la forma

$$|\Psi_{cat}\rangle = N(|\alpha\rangle + |\alpha'\rangle)$$

donde  $|\alpha\rangle$  y  $|\alpha'\rangle$  son estados coherentes, que representan estados semiclásicos del campo electromagnético en los que los valores medios de los campos son no nulos y oscilan de acuerdo a lo establecido por las ecuaciones de Maxwell. El procedimiento puede resumirse en los siguientes pasos:

1. Se prepara un estado coherente  $|\alpha\rangle$  del campo en la cavidad (lo cual se hace acoplado la cavidad con una fuente de radio frecuencias clásica). Asimismo, se prepara un átomo en el estado  $|\phi_A\rangle = (|e\rangle + |g\rangle)/\sqrt{2}$ , lo cual se logra aplicando un campo convenientemente elegido en la primera zona de Ramsey ubicada a la entrada de la cavidad. Es decir, el estado inicial del sistema formado por el átomo y el campo en la cavidad es:

$$|\Psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e\rangle + |g\rangle) \otimes |\alpha\rangle$$

2. El átomo y el campo interactúan de manera dispersiva (o sea, la desintonía entre el átomo y la cavidad es alta). En ese caso los autoestados del sistema compuesto son  $|e, n\rangle$  y  $|g, n\rangle$  cuya evolución es tal que

$$\begin{aligned} |e, n\rangle &\rightarrow |e, n\rangle e^{-i\omega_C t(n+\frac{1}{2})} e^{-i\frac{\omega_A}{2}t} e^{-i\delta t(n+1)} \\ |g, n\rangle &\rightarrow |g, n\rangle e^{-i\omega_C t(n+\frac{1}{2})} e^{i\frac{\omega_A}{2}t} e^{-i\delta t n} \\ \delta &= \frac{\Omega_0^2}{\Delta} \end{aligned}$$

Como consecuencia de esta interacción, el estado del átomo y la cavidad en el instante  $t$  es (a menos de una fase global)

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \frac{e^{-|\alpha|^2}}{\sqrt{2}} \left( |e\rangle e^{-i\frac{\omega_A}{2}t} \sum_n \frac{(\alpha e^{-i\omega_C t} e^{-i\delta t})^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \right. \\ &\quad \left. + |g\rangle e^{i\frac{\omega_A}{2}t} \sum_n \frac{(\alpha e^{-i\omega_C t} e^{i\delta t})^2}{\sqrt{n!}} |n\rangle \right) \end{aligned}$$

Es decir, el estado del átomo y el campo está entrelazado: el átomo en el estado  $|e\rangle$  se correlaciona con un estado coherente del campo mientras que el átomo en el estado  $|g\rangle$  se correlaciona con otro diferente. Es decir: si definimos los estados coherentes

$$|\alpha_{\pm}(t)\rangle = e^{-\frac{|\alpha_{\pm}(t)|^2}{2}} \sum_n \frac{\alpha_{\pm}(t)^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

con

$$\alpha_{\pm}(t) = \alpha e^{-i\omega_C t} e^{\mp i\delta t}$$

el estado del sistema átomo-campo resulta ser

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( e^{-i\frac{\omega_A}{2}t} |e\rangle \otimes |\alpha_+(t)\rangle + e^{+i\frac{\omega_A}{2}t} |g\rangle \otimes |\alpha_-(t)\rangle \right)$$

Este estado puede reescribirse de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \frac{|e\rangle + |g\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \left( e^{-i\frac{\omega_A}{2}t} |\alpha_+(t)\rangle + e^{+i\frac{\omega_A}{2}t} |\alpha_-(t)\rangle \right) \\ &\quad + \frac{|e\rangle - |g\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \left( e^{-i\frac{\omega_A}{2}t} |\alpha_+(t)\rangle - e^{+i\frac{\omega_A}{2}t} |\alpha_-(t)\rangle \right) \end{aligned}$$

Esta última expresión resulta conveniente para emprender el último paso en la preparación del gato de Schroedinger.

3. Se hace pasar al átomo por una segunda zona de Ramsey en la que los estados  $|e\rangle$  y  $|g\rangle$  evolucionan transformándose en  $(|e\rangle \pm |g\rangle)/\sqrt{2}$  respectivamente. Al salir de la zona de Ramsey el estado del conjunto formado por el átomo y la cavidad es:

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= |e\rangle \otimes \left( e^{-i\frac{\omega_A}{2}t} |\alpha_+(t)\rangle + e^{+i\frac{\omega_A}{2}t} |\alpha_-(t)\rangle \right) \\ &\quad + |g\rangle \otimes \left( e^{-i\frac{\omega_A}{2}t} |\alpha_+(t)\rangle - e^{+i\frac{\omega_A}{2}t} |\alpha_-(t)\rangle \right) \end{aligned}$$

4. Finalmente se detecta el estado del átomo y se determina si el mismo es  $|e\rangle$  o  $|g\rangle$ . Después de esta medición, el estado del campo queda preparado en una superposición de dos estados coherentes, que describe a un gato de Schroedinger.

## XI. CLASE 14: TELEPORTACIÓN: CIENCIA FICCIÓN O FÍSICA?

En este capítulo analizaremos en detalle las características de uno de los procesos más notables que permite la mecánica cuántica: la teleportación (o teletransportación). En su versión "mágica" este proceso es descrito como uno por el cual un objeto (un ser humano) ingresa a un laboratorio en algún lugar del espacio (Laboratorio A) y tras desvanecerse se reconstruye en otro laboratorio distante (Laboratorio B). Esta versión mágica puede verse, por ejemplo, en la serie "Star Trek". En apariencia, el objeto se materializa nuevamente en B, donde aparentemente reaparece "de la nada". Esta versión mágica es obviamente incompatible con las leyes de la física: la materia no puede aparecer de la nada. Veremos que, para que haya teletransportación en primer lugar debe haber transporte de materia entre A y B. Este transporte debe involucrar materia en un estado especial: un estado entrelazado. Este es el sostén material requerido por la teleportación. Una vez que se establece este "canal", formado por materia entrelazada (distribuida entre A y B, sin que se rompa el entrelazamiento en el proceso de distribución) el mismo puede ser usado para teletransportar. En resumen: el entrelazamiento permite la teleportación. El procedimiento es simple y puede ser descrito en palabras del siguiente modo (veremos el detalle del procedimiento más adelante): a) Se establece un canal de materia entrelazada, distribuida entre A y B; b) En el laboratorio A ingresa un objeto a teleportar, que está preparado en un estado cuántico desconocido (obviamente hay una sola copia del objeto, asique el estado no puede ser determinado experimentalmente ya que para eso necesitaríamos un gran número de copias de objetos preparados de manera idéntica). c) En el laboratorio A se realiza una medición proyectiva que determina alguna propiedad conjunta de la materia presente en dicho laboratorio (en el que conviven el objeto a teleportar y la materia entrelazada con aquella que se encuentra en B). En el caso de la teleportación de un spin, es necesario distribuir un par de spins en algún estado de Bell y luego realizar una medición proyectiva sobre la base de Bell de los spins presentes en A. d) El resultado de la medición realizada es enviado de manera clásica (por vía de una comunicación telefónica, por ejemplo) entre A y B, e) Una vez que B recibe la información sobre el resultado,  $r$  de la medición, realiza un aoperación unitaria  $U_r$  en su laboratorio de modo tal que una vez aplicada dicha operación, la materia presente en ese laboratorio queda preparada en el mismo estado cuántico en el que se encontraba el objeto que ingresó al laboratorio A.

En síntesis, para teleportar hace falta materia entrelazada distribuida entre dos sitios distantes (la estación de partida y la de llegada). Y lo que se teleporta no es la materia sino el estado cuántico en el que ella se encuentra. Este procedimiento fue propuesto originalmente por un quinteto de físicos muy originales en 1993 (Bennett,

Brassard, Josza, Peres y Wootters) y fue demostrado en experimentos notables en varios dispositivos físicos. A diferencia de la versión mágica en la que la materia parece aparecer de la nada, en esta versión "física" de la teleportación la materia está en el laboratorio B (y en A) antes de la llegada del objeto a teleportar. O sea, nada se origina de la nada. El procedimiento, notablemente, reorganiza la materia en B de modo tal que adquiere la identidad deseada, sin que en el proceso aprendamos nada sobre cuál es esa identidad. Uno de los creadores de esta idea, Asher Peres, dictó una conferencia en la Universidad de California en Santa Barbara durante uno de los workshops que más contribuyeron al desarrollo de la "Información cuántica". Tuve la oportunidad de asistir a esa conferencia, que estaba orientada al público general. A la hora de las preguntas, un señor le preguntó a Asher, provocativamente: "Usted piensa que alguna vez llegaremos a teleportar el alma?". Asher Peres, que era un hombre de un sentido del humor comparable a su enorme inteligencia, le contestó: "Sólo teleportamos el alma!". Esa metáfora captura parte de la esencia de la teleportación, que es un proceso en el cual la materia pre-existente adquiere la identidad (el estado cuántico, que sin duda es el "alma" de la mecánica cuántica) del objeto deseado.

En este capítulo, describiremos en detalle como deberíamos proceder para teleportar un átomo entre dos cavidades distantes. Si bien este experimento todavía no fue hecho, la propuesta presentada en 1996 por Davidovich, Haroche y otros, no solamente es realista sino que utiliza la misma física que la que describimos en el capítulo anterior.

### A. La evolución temporal representada como un circuito. Operaciones elementales.

Introduciremos una notación gráfica que es muy conveniente a la hora de describir la evolución temporal de un sistema sobre el cual se ejecutan diversas acciones. Estas acciones externas obligan al sistema a evolucionar de una determinada manera durante un cierto tiempo. Típicamente estas acciones corresponden a prender o apagar campos externos tales como aquellos que generan oscilaciones de Rabi sobre un sistema de dos niveles. También pueden corresponder a prender o apagar interacciones entre dos sistemas físicos. El ejemplo típico es el que vimos en el capítulo anterior: un átomo que atraviesa una cavidad e interactúa con el campo electromagnético atrapado en ella. En ese caso la interacción solamente tiene lugar durante un cierto tiempo, que es aquel durante el cual el átomo está en la zona central de la cavidad. Para todos estos sistemas es útil pensar al operador de evolución como el producto (la composición) de operadores que corresponden a la evolución durante una etapa elemental en la cual la dinámica es de un cierto tipo. El operador de evolución total será entonces el producto de operadores elementales, durante los cuales el

sistema evoluciona de manera relativamente simple. En estos casos es útil representar la dinámica mediante un circuito tal como el que aparece en la figura. En esos circuitos cada cable representa un sistema elemental, uno de los componentes del sistema completo. Por ejemplo, para un sistema compuesto por la colección de  $n$  sistemas de espín  $1/2$  tendremos  $n$  cables. En el circuito el tiempo fluye de izquierda a derecha y la evolución se obtiene aplicando secuencialmente los operadores que aparecen de izquierda a derecha al estado inicial  $|\psi_{in}\rangle$  que figura a la izquierda del circuito. Se tenemos  $k$  operaciones elementales  $U_1, \dots, U_k$  entonces  $U_T = U_1 \times \dots \times U_k$  y el estado final será  $|\psi_{out}\rangle = U_T |\psi_{in}\rangle$

En lo que sigue, usaremos dos operaciones "elementales": a) La transformación de Hadamard  $U_H$  (o simplemente  $H$ , que no debe confundirse con un Hamiltoniano!) y b) La transformación no-controlada o  $U_{CN}$  que describiremos mas abajo.

La transformación de Hadamard se define como  $U_H = -i\sigma_x e^{-i\frac{\pi}{4}\sigma_y}$ . Las propiedades de las matrices de Pauli implican que este operador es simplemente  $U_H = -i(\sigma_z + \sigma_x)/\sqrt{2}$ . Es decir, que en forma matricial tenemos

$$U_H = \frac{-i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Esta transformación se puede inducir fácilmente sobre un sistema de spin  $1/2$  con dos pulsos sucesivos que induzcan, respectivamente, una rotación en  $\pi/2$  alrededor del eje  $\vec{e}_y$  y luego otra en  $\pi$  alrededor del eje  $\vec{e}_x$ . Para el caso de un átomo que atraviesa una zona de Ramsey este procedimiento es análogo al anterior. En consecuencia, la operación  $U_H$  es una operación físicamente realizable de manera sencilla.

La siguiente operación que usaremos es  $U_{CN}$  que es un operador unitario definido mediante la siguiente tabla (definición por extensión):

$$\begin{aligned} U_{CN}|0,0\rangle &= |0,0\rangle & U_{CN}|0,1\rangle &= |0,1\rangle \\ U_{CN}|1,0\rangle &= |1,1\rangle & U_{CN}|1,1\rangle &= |1,0\rangle \end{aligned}$$

La acción de este operador pone en evidencia el motivo para su nombre: El estado del segundo sistema cambia (o es "negado" o invertido) si el primer sistema está en el estado  $|1\rangle$  mientras que permanece invariante si el primer sistema (el control) está en el estado  $|0\rangle$ . Es una operación de negación sobre el segundo qubit (el blanco), que está controlada por el primer qubit. Es fácil ver que el operador  $U_{CN}$  no es otra cosa que

$$U_{CN} = |0\rangle\langle 0| \otimes \mathbb{1} + |1\rangle\langle 1| \otimes \sigma_x.$$

Un operador íntimamente relacionado con este último es uno en el cual dependiendo del estado del sistema de control, se aplica el operador  $(-i\sigma_x)$  al sistema blanco. Esto es:

$$\begin{aligned} U_{CN'} &= |0\rangle\langle 0| \otimes \mathbb{1} - i|1\rangle\langle 1| \otimes \sigma_x. \\ U_{CN'} &= \exp(-i\frac{\pi}{2} |1\rangle\langle 1| \otimes \sigma_x) \end{aligned} \quad (99)$$

La expresión anterior nos muestra cómo es posible obtener el operador  $U_{CN'}$  a partir de un Hamiltoniano: Si el Hamiltoniano es  $H_{CN'} = \gamma|1\rangle\langle 1| \otimes \sigma_x = \frac{\gamma}{2}(\mathbb{1} - \sigma_z) \otimes \sigma_x$  y el tiempo de aplicación es tal que  $\gamma t = \pi/2$  entonces la evolución está descrita por  $U_{CN'}$ .

Otra manera de obtener una compuerta  $U_{CN}$  es utilizar otra compuerta elemental que podemos llamar  $U_{CZ}$  que aplica el operador  $\sigma_z$  al blanco si el estado del control es  $|1\rangle$ . Es decir,

$$U_{CZ'} = |0\rangle\langle 0| \otimes \mathbb{1} + |1\rangle\langle 1| \otimes \sigma_z.$$

Es simple demostrar que  $U_{CN}$  se obtiene aplicando  $U_{CZ}$  y operadores de Hadamard:

$$U_{CN} = (\mathbb{1} \otimes H) \times U_{CZ} \times (\mathbb{1} \otimes H)$$

(lo cual surge simplemente de observar que  $H\sigma_z H = \sigma_x$ , y  $H^2 = \mathbb{1}$ ).

Así como podemos obtener  $U_{CN}$  a partir de  $U_{CZ}$ , podríamos obtener  $U_{CN'}$  a partir de  $U_{CZ'}$ , que es aquella compuerta que aplica el operador  $(i\sigma_z)$  si el sistema de control está en el estado  $|1\rangle$ . Es decir

$$U_{CZ''} = |0\rangle\langle 0| \otimes \mathbb{1} + i|1\rangle\langle 1| \otimes \sigma_z.$$

Evidentemente  $U_{CZ'}$  puede obtenerse a partir de un Hamiltoniano de la forma  $H_{CZ'} = \frac{\gamma}{2}(\mathbb{1} - \sigma_z) \otimes \sigma_z$ . A partir de ella obtenemos  $U_{CN'}$  como

$$U_{CN'} = (\mathbb{1} \otimes H) \times U_{CZ'} \times (\mathbb{1} \otimes H)$$

Cabe aclarar que el uso de operaciones  $U_{CN}$  y  $U_H$  está muy extendido en la literatura y resultan muy convenientes a la hora de diseñar secuencias de operaciones para cumplir algún fin (como el que veremos mas abajo: medir en la base de Bell). Sin embargo, vale la pena notar que estas operaciones no pueden obtenerse a partir de un Hamiltoniano ya que son operadores unitarios cuyo determinante es igual a  $-1$ . En cambio,  $U_{CN'}$  y  $U_{CZ''}$  son operadores físicamente realizables ya que su determinante es igual a la unidad (y por lo tanto están conectadas continuamente con el operador identidad y corresponden a una evolución temporal generada por un Hamiltoniano).

Veremos mas abajo cómo construir estas compuertas (o sea, estos operadores de evolución temporal) en un sustrato físico simple en el que los sistemas de dos niveles están representados en átomos y en el estado del campo en una cavidad. Pero antes de eso, veamos que a partir de estas operaciones es simple construir dispositivos que preparen cualquier de los estados de Bell así como también aparatos para medir en esa base.

## B. Preparación y medición de estados de Bell

La preparación de estados de Bell es una operación relativamente sencilla. Puede obtenerse componiendo simplemente las operaciones elementales  $U_H$  y  $U_{CN}$  tal como

indica la figura. El proceso por el cual creamos estados de Bell es uno por el cual obtenemos los estados  $|\beta\rangle_{m_1, m_2}$  (que son autoestados comunes de los operadores  $M_1 = \sigma_x \otimes \sigma_x$  y  $M_2 = \sigma_z \otimes \sigma_z$  con autovalores  $m_1$  y  $m_2$ ) a partir de los estados  $|i, j\rangle$  donde  $i, j = 0, 1$ . Es decir, la preparación de los estados de Bell se realiza aplicando el operador unitario que cambia de base y lleva de la base de autoestados comunes de  $\sigma_z \otimes \mathbb{1}$  y  $\mathbb{1} \otimes \sigma_z$  a la base de autoestados comunes de  $M_1$  y  $M_2$ . Llamaremos  $U_{Bell}$  a este operador de cambio de base.

En lo que sigue demostraremos que el operador  $U_{Bell}$  se obtiene componiendo  $U_H \otimes \mathbb{1}$  y  $U_{CN}$ , es decir:  $U_{Bell} = U_{CN} \times (U_H \otimes \mathbb{1})$ . Para ver esto, analicemos como actúa este operador sobre cualquier estado  $|i, j\rangle$ . En la primera etapa tenemos que

$$\begin{aligned} |\phi_{i,j}\rangle &= (U_H \otimes \mathbb{1})|i, j\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + (-1)^i|1\rangle) \otimes |j\rangle \end{aligned}$$

Finalmente, cuando aplicamos el operador  $U_{CN}$  (en el que el primer espín actúa como control y el segundo como blanco) obtenemos

$$\begin{aligned} |\beta_{i,j}\rangle &= U_{CN} \times (U_H \otimes \mathbb{1})|i, j\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |j\rangle + (-1)^i|1\rangle \otimes |1 \oplus j\rangle), \end{aligned}$$

donde el símbolo  $\oplus$  indica la suma de enteros módulo 2. Es evidente que estos estados son los estados de Bell. En efecto, para el estado  $|\beta_{i,j}\rangle$  los autovalores de  $M_1$  y  $M_2$  son  $m_1 = (-1)^i$  y  $m_2 = (-1)^j$ . Por consiguiente, recordando la notación usada en capítulos anteriores, tenemos que  $|\beta_{0,0}\rangle = |\Phi_+\rangle$ ,  $|\beta_{1,1}\rangle = |\Psi_-\rangle$ ,  $|\beta_{1,0}\rangle = |\Phi_-\rangle$  y  $|\beta_{0,1}\rangle = |\Psi_+\rangle$ .

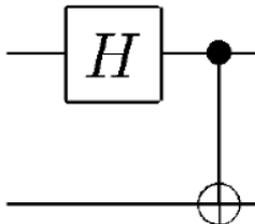


FIG. 17 Esquema para preparar estados de Bell usando dos operaciones "elementales"

En consecuencia, para preparar los estados de Bell hay que lograr que los dos sistemas de espín 1/2 interactúen de forma tal que el operador es  $U_{Bell}$ .

Para medir simultáneamente los observables  $M_1$  y  $M_2$  hay que realizar el proceso inverso al que seguimos para preparar los estados de Bell. En efecto, si tenemos un estado de Bell  $|\beta_{i,j}\rangle$  y aplicamos el operador  $U_{Bell}^{-1}$  entonces obtendremos el estado  $|i, j\rangle$ . Por lo tanto, este operador (el inverso de  $U_{Bell}$  hace el cambio de base inverso al anterior. Por consiguiente, si aplicamos  $U_{Bell}^{-1}$  y luego medimos la componente  $\vec{e}_z$  de cada espín, obtenemos la

información sobre cual de los cuatro estados de Bell ingresó al aparato. Un medidor en la base de Bell no es otra cosa que dos detectores de Stern Gerlach con el imán orientado en la dirección  $\vec{e}_z$  precedido por la aplicación de  $U_{Bell}^{-1}$ . Este operador hace las veces de un "transductor" que transforma la señal que deseamos medir ( $M_1$  y  $M_2$ ) en aquella que podemos medir con dos aparatos de Stern Gerlach ordinarios (que miden  $\sigma_z \otimes \mathbb{1}$  y  $\mathbb{1} \otimes \sigma_z$ ). El esquema de detección se representa en la figura que aparece mas abajo.

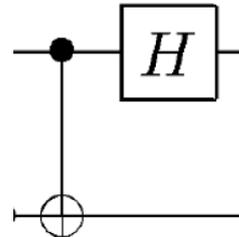


FIG. 18 Para medir en base de Bell (medir los operadores  $M_1$  y  $M_2$  definidos mas arriba. Se pueden usar las mismas operaciones necesarias para crear estados de Bell en orden inverso.

### C. La teleportación

El procedimiento que se conoce con el nombre de teleportación fue ideado en 1993 por Bennett, Brassard, Josza, Peres y Wootters (BBJPW) y consiste en lo siguiente. El objetivo es lograr que si en un laboratorio ingresa un objeto (un espín 1/2) preparado en un estado arbitrario, después de un cierto tiempo (compatible con todos los requisitos de causalidad) aparezca un objeto idéntico en otro laboratorio distante (o sea, un espín 1/2 preparado en el mismo estado que el original). En el camino, el estado permanece desconocido.

Sean A y B dos laboratorios distantes. En primer lugar supondremos que se prepara un par de spines en un estado entrelazado, que puede ser alguno de los estados de Bell. Para fijar ideas usaremos el estado  $|\Psi_-\rangle = |\beta_{1,1}\rangle = (|0, 1\rangle - |1, 0\rangle)/\sqrt{2}$ . Cada uno de los miembros del par entrelazado es enviado a un laboratorio (o sea, en el laboratorio A está uno de los miembros del par y en el laboratorio B está el otro). Este recurso, un par de partículas en un estado entrelazado, es absolutamente necesario para ejecutar el procedimiento que permite teleportar. Las partículas entrelazadas serán etiquetadas con los índices 1 (la del laboratorio A) y 2 (aquella que está en B). Como dijimos, este recurso (el par de partículas entrelazadas) es imprescindible para la teleportación.

En el laboratorio A ingresa una tercera partícula (que llamaremos partícula 3) en un estado desconocido  $|\phi_3\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ . Es decir el estado inicial del sistema formado



cavidades. Inicialmente las cavidades están vacías y el átomo es preparado en el estado  $|e\rangle$ . En la primera cavidad interactúa con el campo mediante un pulso  $\pi/2$  y en la segunda mediante un pulso  $3\pi$ . Luego de estas operaciones el estado del campo en las cavidades es

$$|\psi_{C_1, C_2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, 1\rangle - |1, 0\rangle)$$

- El átomo a teleportar ingresa en la cavidad  $C_1$  en un estado desconocido  $|\phi_A\rangle = \alpha|e\rangle + \beta|g\rangle$ . Antes y después de atravesar la cavidad, el átomo atraviesa sendas zonas de Ramsey en las cuales se implementa una serie de pulsos tales que el operador de evolución es  $U_H$ . El átomo en la cavidad interactúa en forma no resonante (con alta desintonía a de modo tal que el tiempo de interacción es tal que se produce un desfase en  $\pi$  entre los estados  $|e, 1\rangle$  y  $|g, 1\rangle$ ). Esto sucede cuando  $\frac{\gamma^2}{\Delta}t = \frac{\pi}{2}$ . En síntesis, el operador de evolución del sistema átomo-campo que resulta de la interacción es  $U_{CZ'} = \text{diag}(1, 1, i, -i)$ . El operador combinado obtenido por la composición de las operaciones de las zonas de Ramsey y la interacción en la cavidad es  $U_{RCR}$  que se obtiene como

$$U_{RCR} = U_H \otimes \mathbb{1} \times U_{CZ'} \times U_H \otimes \mathbb{1}$$

Es fácil ver que la acción de este operador es, secuencialmente, la siguiente:

$$\begin{aligned} |e, 0\rangle &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|e, 0\rangle + |g, 0\rangle) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|e, 0\rangle + |g, 0\rangle) \\ &\rightarrow |e, 0\rangle \\ |g, 0\rangle &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|e, 0\rangle - |g, 0\rangle) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|e, 0\rangle - |g, 0\rangle) \\ &\rightarrow |g, 0\rangle \\ |e, 1\rangle &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|e, 1\rangle + |g, 1\rangle) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(i|e, 1\rangle - i|g, 1\rangle) \\ &\rightarrow i|g, 1\rangle \\ |g, 1\rangle &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|e, 0\rangle - |g, 0\rangle) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(i|e, 0\rangle + i|g, 0\rangle) \\ &\rightarrow i|e, 1\rangle \end{aligned}$$

En consecuencia, esta secuencia de operaciones es una operación  $U_{CN'}$  en la cual el campo actúa como control y el átomo como blanco. Podemos ver que esta secuencia de operaciones es el primer ingrediente necesario para hacer una medición en la base de Bell del sistema formado por el átomo y el campo en la primera cavidad. En efecto, podemos ver que

$$\begin{aligned} U_{RCR} \frac{1}{\sqrt{2}}(|e, 0\rangle \pm |g, 1\rangle) &= |e\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \pm i|1\rangle) \\ U_{RCR} \frac{1}{\sqrt{2}}(|e, 1\rangle \pm |g, 0\rangle) &= |g\rangle \otimes \frac{(\pm 1)}{\sqrt{2}}(|0\rangle \pm i|1\rangle) \end{aligned}$$

En consecuencia, el estado final del átomo revela si el estado pertenece a los estados tipo  $|\Phi_{\pm}\rangle$  o  $|\Psi_{\pm}\rangle$ . O sea, el estado final del átomo es  $|e\rangle$  siempre y cuando el estado inicial es alguno de los estados  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|e, 0\rangle \pm |g, 1\rangle)$ . Por el contrario, el estado final del átomo es  $|g\rangle$  si el estado inicial es  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|e, 1\rangle \pm |g, 0\rangle)$ .

En definitiva, la medición del estado final del átomo revela el autovalor del operador  $M_2 = \sigma_z \otimes \sigma_z$ . La información sobre el valor de  $M_1 = \sigma_x \otimes \sigma_x$  queda almacenado en la cavidad ya que el estado del campo en su interior es siempre  $|\phi_C\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \pm i|1\rangle)$ .

- Para detectar el autovalor de  $M_1$  debemos medir el estado del campo dentro de la cavidad. Para ese fin usamos otro átomo preparado en el estado  $|g\rangle$ . El átomo atraviesa la cavidad e interactúa con el campo mediante un pulso  $\pi$ . Tal como describimos en el capítulo anterior el efecto de esta interacción es transferir el estado del campo en la cavidad al estado del átomo. Luego de la interacción la cavidad queda en el estado de vacío  $|0\rangle$  y el estado del átomo es  $|\phi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e\rangle \pm i|g\rangle)$ . Si este átomo ingresa a una zona de Ramsey que induce una rotación alrededor del eje  $\vec{e}_y$  que transforma los estados  $|e\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|e\rangle + i|g\rangle)$  y  $|g\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|g\rangle + i|e\rangle)$ . En ese caso el estado final del átomo será  $|e\rangle$  ó  $|g\rangle$  según el signo de la superposición sea  $\pm 1$ .

Esto completa el proceso de medición en la base de Bell. El procedimiento revela el valor de  $M_1$  y  $M_2$  para el sistema formado por el átomo a teleportar y el fotón en la primera cavidad.

- El proceso de teleportación se completa enviando otro átomo preparado en el estado  $|g\rangle$  que interactúa con la segunda cavidad mediante un pulso  $\pi$ . Esto simplemente logra que el estado de la cavidad sea transferido a ese átomo. Finalmente, en una zona de Ramsey se puede realizar la operación unitaria requerida (ver arriba)  $U_{m_1, m_2}$  para lograr que el estado final de ese átomo sea idéntico al estado inicial del átomo a teleportar (que nunca pasó ni estuvo cerca de la cavidad  $C_2$ ). Esto completa el proceso de teleportación.

El experimento descrito fue propuesto en esta forma (a menos de pequeñas variantes por Davidovich, Zagury, Brune, Raymond y Haroche (Phys Rev A 50, R895 (1994)) pero todavía no ha sido implementado en la práctica (aunque se espera que en el próximo lustro sea posible realizar experimentos con dos cavidades).

## XII. CLASE 15: ALTERNATIVAS A LA MECÁNICA CUÁNTICA. EL ORIGEN DEL AZAR.

En este capítulo intentaremos resumir los intentos más importantes por buscar argumentos que permitan generar una descripción del mundo basada en principios "obvios" que son contradichos por la mecánica cuántica. Por ejemplo, hemos dicho varias veces que la mecánica cuántica afirma que las probabilidades no provienen de nuestra ignorancia. Eso es evidentemente cierto: en el formalismo de la mecánica cuántica no hay nada que diga que ese, la ignorancia, es el origen del azar. Pero: ¿Cómo podemos estar seguros de que no hay descripciones alternativas que den lugar a las mismas predicciones cuantitativas que aquellas que realiza la mecánica cuántica? Tal vez, si eso fuera posible, exista otra descripción más profunda de la naturaleza en la que el azar surja como consecuencia de nuestra ignorancia y no como algo inexplicable. Algo a cuya existencia debemos resignarnos.

Presentaremos la demostración de que las predicciones de la mecánica cuántica son cuantitativamente contrapuestas a aquellas que surgen de una gran clase de modelos que aceptan hipótesis compatibles con nuestro sentido común. Estos modelos se conocen con el nombre de modelos "realistas y locales", un nombre con una carga filosófica tal vez demasiado pesada. Describiremos en detalle las hipótesis en las que se basan esos modelos y presentaremos las predicciones que dan lugar a contradicciones experimentalmente verificables con la mecánica cuántica.

### A. Un poco de historia...

Una de las figuras icónicas de la lucha en contra de la mecánica cuántica fue, paradójicamente, uno de sus creadores: Albert Einstein. Sin duda, Einstein fue uno de los más grandes científicos de la historia. Sus ideas revolucionaron el pensamiento humano mostrando que, por ejemplo, conceptos tan básicos como el tamaño de los objetos y la duración de los intervalos de tiempo no tienen un carácter absoluto. Por el contrario, dependen del observador. La Teoría de la Relatividad nos obligó a repensar conceptos básicos que están anclados en nuestro sentido común, ese conjunto de ideas que consideramos como obvias y que se forjan en nuestras experiencias cotidianas. Hoy, a más de cien años del nacimiento de la Relatividad hay miles de científicos que la comprenden y aplican a la perfección. Mas aún, a lo largo de estos cien años ha sido posible reconciliar algunas de sus ideas más extrañas con nuestro sentido común. Para ello muchas veces solemos apelar a metáforas: La vida en un espacio curvo puede imaginarse pensando en lo que le ocurriría a un ser plano condenado a existir sobre la superficie de una esfera; la materia curva el espacio-tiempo de manera análoga a como una cama elástica se deforma al apoyar sobre ella un objeto masivo, etc. Estas analogías tienen

sus defectos y no siempre resultan precisas, pero al menos es posible imaginarlas.<sup>1</sup>

La teoría de la relatividad se desarrolló en sus comienzos como una empresa familiar: Einstein la concibió trabajando en soledad. Es bien conocida la anécdota que cuenta que cerca de 1920 Sir Arthur Eddington fue reportado por un periodista que le mencionó el rumor que por ese entonces afirmaba que en el mundo solamente había tres personas que comprendían la teoría de la relatividad. Eddington (bromeando?) preguntó: "¿Y quién es el tercero?" Por esos años había otra rama de la física en pleno desarrollo: la física cuántica. Contrariamente a lo que sucedía con la relatividad, eran decenas los físicos que trabajaban activamente en su desarrollo. La mecánica cuántica fue una creación colectiva que surgió luego de un esfuerzo material e intelectual impresionante. En este artículo nos referiremos a ese capítulo de la física, a la física cuántica. Y en particular nos referiremos a los cuestionamientos de Albert Einstein hacia la mecánica cuántica.

Einstein, con su trabajo sobre el efecto fotoeléctrico, contribuyó sustancialmente al desarrollo de la mecánica cuántica. Sin embargo jamás fue capaz de aceptar sus consecuencias y siempre la aborreció. Para citar solamente alguna de sus opiniones escritas basta mencionar las siguientes: En 1912 en una carta a Heinrich Zangger afirmaba, de manera algo irreverente: "*Cuanto más éxitos logra, más tonta me parece*". Mas adelante, en 1930 en una carta dirigida a Max Born decía: "*Todavía no me resigno a creer que los métodos estadísticos de la mecánica cuántica sean la última palabra, pero por el momento soy el único que sostiene esa opinión*". En otra carta dirigida a Max Born, Einstein acuñó, en 1944, su famosa frase: "*Usted cree que Dios juega a los dados, mientras que yo creo en la existencia de leyes y de orden en un mundo al que, de una manera brutalmente especulativa, estoy tratando de comprender*". En 1950, hacia el final de su vida y en una época de gloria de la física cuántica, Einstein se atrevió a afirmar que "*...a pesar de sus notables avances parciales, el problema está lejos de tener una solución satisfactoria*".

¿Qué era lo que más le molestaba a Einstein de la física cuántica? La respuesta es sencilla: Su insatisfacción se originaba en el indeterminismo. La mecánica cuántica es una teoría no-determinista. Afirma que es posible realizar muchas veces el mismo experimento y obtener siempre resultados diferentes. Para colmo de males, la mecánica cuántica afirma que el indeterminismo es de naturaleza fundamental y que no se origina en ninguna limitación de nuestro instrumental. Es decir, de acuerdo a ella, la razón por la cual al repetir un experimento

<sup>1</sup> La influencia de Einstein en el pensamiento científico moderno se pone en evidencia mencionando algunas frases llamativas que no tendrían sentido sin su contribución: "el tiempo se dilata", "las longitudes se contraen", "vivimos en un espacio-tiempo curvo", "la luz modifica su trayectoria al pasar cerca del sol", etc.

obtenemos resultados diferentes no es la falta de precisión en los artefactos que utilizamos para preparar el objeto antes de efectuar la medición, ni tampoco la falta de control en los aparatos de medición. Por último, y esto resultaba intolerable para Einstein, la mecánica cuántica afirma que el indeterminismo tampoco puede atribuirse a nuestra ignorancia sobre los detalles del objeto estudiado. Einstein hubiera aceptado de buena gana una teoría que, con modestia, se limitara a predecir probabilidades. En cambio, le resultaba intolerable la mecánica cuántica que de manera contundente, afirma que las probabilidades no surgen de nuestra ignorancia ni de nuestra incapacidad de controlar todas las variables experimentales sino que tienen un origen fundamental e inexplicable.

Estas características de la física cuántica no solamente molestaban a Einstein, sino que todavía molestan a casi todos los físicos cuánticos, que se cuentan por decenas de miles. Paradójicamente, siendo la física cuántica la teoría científica mejor testada de la historia, todavía no se han acallado los debates sobre su interpretación. Estos debates comenzaron desde la concepción de la teoría y Einstein tuvo un notable protagonismo en muchos de ellos. Las predicciones de la física cuántica son múltiples y sumamente precisas. Por ejemplo, puede predecir que cada vez que iluminemos un átomo de Helio se emitirá un electrón siempre que la longitud de onda de la luz sea menor que  $50.425931 \pm 0.000002$  nanómetros. Por otra parte, esta predicción teórica es contrastada con el resultado de los experimentos donde se comprueba que los electrones son emitidos para longitudes de onda menores que  $50.4259299 \pm 0.0000004$  nanómetros. El acuerdo entre la teoría y el experimento es notable: una precisión comparable a la que tendríamos si fuéramos capaces de predecir la distancia entre Ushuaia y La Quiaca con un error menor que diez centímetros! <sup>2</sup> Predecir propiedades de los átomos con precisión asombrosa puede ser impresionante pero alejado de la vida cotidiana. Sin embargo, a partir de este tipo de logros es que la física cuántica ha permitido el desarrollo de tecnologías que cambiaron el mundo y nuestra forma de vida: Sin ella no se hubiera desarrollado la energía nuclear, ni la microelectrónica, ni el laser, ni ninguna de las tecnologías optoelectrónicas que revolucionaron las comunicaciones, ni las técnicas modernas de diagnóstico médico por imágenes, etc. Casi todas las tecnologías relevantes del siglo XX se basan en la mecánica cuántica!

Sin embargo, pese a sus asombrosas predicciones ninguno de las decenas de miles de científicos cuánticos es capaz de “comprender” esta teoría. No es capaz de tornarla compatible con el sentido común. Richard Feynman, uno de los científicos más brillantes de la segunda mitad del siglo XX afirmaba, en forma provocadora, que

“nadie entiende la mecánica cuántica”. Y lo hacía en el contexto de una reflexión profunda: Para Feynman, nadie es capaz de hacerse una imagen correcta del mundo microscópico usando los conceptos que generamos para describir el mundo macroscópico. Al hacer eso, caemos inevitablemente en preguntarnos: Cómo es posible que la naturaleza se comporte de este modo? Nadie lo entiende. Pero los hechos confirman que la naturaleza se comporta tal como lo predice la mecánica cuántica.

## B. Einstein contra la mecánica cuántica. EPR

En 1935 Einstein Podolsky y Rosen (EPR) publicaron en el *Physical Review* un artículo con un título provocativo en el que preguntaban: “Puede considerarse que la descripción cuántica de la realidad física es completa?”. En el trabajo argumentaban que la respuesta a esta pregunta es negativa: Einstein creía haber encontrado un argumento que permitía demostrar que en la mecánica cuántica anidaba el germen de su propia destrucción. El trabajo de EPR tuvo inmediata repercusión en los medios (apareció en la primera plana del diario New York Times) pero fue rápidamente contestado por Bohr, que mostró que EPR no estaban poniendo en evidencia una contradicción en la teoría sino simplemente su rareza, su naturaleza contraria al sentido común. La profecía de Einstein, como veremos, su profecía demostró ser incorrecta (hoy sabemos con certeza que si el germen que destruirá a la mecánica cuántica existe, no es aquel encontrado por Einstein en 1935).

El trabajo de EPR forma parte de un debate que dio lugar a muchos trabajos: Es posible construir teorías alternativas a la mecánica cuántica en las que el origen del azar sea nuestra ignorancia? Einstein creyó que en 1935 había demostrado que la propia mecánica cuántica reclamaba esas teorías, que era evidente que no proveía una descripción completa de la naturaleza. Veamos su argumento:

En su célebre trabajo EPR establecen en primer lugar una serie de requisitos que toda teoría que aspire a describir la realidad física debe cumplir. De acuerdo a los autores, las teorías físicas tienen que tener a los “elementos de la realidad” como sus principales protagonistas. EPR proveen una definición operacional para distinguir aquellas propiedades de la naturaleza que deben ser considerados “elementos de la realidad”. Esta definición es la siguiente: *Si somos capaces de predecir con certeza el valor de alguna propiedad de un objeto sin perturbarlo en modo alguno, entonces esa propiedad debe ser considerada un “elemento de la realidad”*. La idea es simple: si nuestra predicción no afecta en modo alguno al sistema, la propiedad en cuestión tiene que tener un sustituto real, su valor debe de estar “escrito” en el objeto en cuestión. Estos criterios propuestos por EPR para toda teoría física pueden ser discutidos en el plano epistemológico o filosófico, pero suenan aceptables para la mayoría de las personas. El objetivo del trabajo de EPR

<sup>2</sup> Por el contrario, la física “clásica” predice que para cualquier longitud de onda algunos electrones serán emitidos por los átomos de Helio, lo cual entra en abierta contradicción con los resultados de los experimentos.

es demostrar que la mecánica cuántica no cumple con estos principios y que, por lo tanto, no puede ser considerada una descripción completa de la realidad física.

La clave del trabajo de EPR consiste en analizar las propiedades de los estados entrelazados. El nudo del argumento EPR (en la versión desarrollada más tarde por David Bohm) es el siguiente: Consideremos un sistema compuesto por dos partículas de espín  $1/2$  que es preparado de modo tal que sus propiedades  $M_1 = \sigma_x \otimes \sigma_x$  y  $M_2 = \sigma_z \otimes \sigma_z$  toman los valores  $M_1 = -1$  y  $M_2 = -1$  (o sea, el estado es el estado de Bell  $|\Psi_-\rangle$ ). Consideremos además que las partículas 1 y 2 pueden ser separadas y llevadas a laboratorios distantes que llamaremos Labo-1 y Labo-2. Utilizaremos laboratorios tan separados como para que ninguna perturbación material generada durante las mediciones realizadas en el Labo-1 tenga tiempo suficiente para propagarse hasta el Labo-2 (y viceversa). Tal como discutimos más arriba, si en el Labo-1 medimos la propiedad  $\sigma_x$  sobre la primera partícula podemos predecir el resultado que obtendríamos si midiéramos  $\sigma_x$  en el Labo-2. En efecto, sabemos que si obtenemos  $\sigma_{x,1} = +1$  entonces con certeza podemos predecir que si midiéramos  $\sigma_{x,2}$  deberíamos obtener el resultado  $\sigma_{x,2} = -1$ . Análogamente, si obtenemos  $\sigma_{x,1} = -1$  entonces predecimos con certeza que si decidiéramos medir  $\sigma_{x,2}$  obtendremos el valor  $\sigma_{x,2} = +1$ . Por lo tanto el valor de la propiedad  $\sigma_{x,2}$  siempre puede ser predicha con certeza a partir de los resultados de experiencias realizadas en el Labo-1, que es un laboratorio tan distante que ninguno de los eventos que ocurren en su interior puede alterar el estado de cosas para la partícula 2.

En consecuencia, estamos obligados a concluir que  $\sigma_{x,2}$  debe ser un “elemento de la realidad”. Lo mismo debe pasar con  $\sigma_{z,2}$  ya que podríamos predecir con certeza su valor a partir de experimentos del mismo tipo, que involucran medir la propiedad  $\sigma_{z,1}$  sobre la primera partícula. La conclusión a la que nos conduce este razonamiento es que tanto  $\sigma_{x,2}$  como  $\sigma_{z,2}$  son “elementos de la realidad” y por lo tanto tienen que tener un lugar dentro de una teoría física completa. Sin embargo, para la mecánica cuántica estas propiedades son complementarias y sus valores no pueden ser definidos simultáneamente. En consecuencia, concluyen EPR: la mecánica cuántica no puede proveer una descripción completa de la realidad física.

El trabajo de EPR recibió una rápida (y breve) respuesta de Niels Bohr quien hizo notar que el argumento de EPR no expone en realidad ninguna contradicción interna de la mecánica cuántica. Por otra parte Bohr destacó que el argumento de EPR utiliza un razonamiento “contra-fáctico” ya que mezcla resultados de experimentos reales con resultados de experimentos imaginarios. En efecto: en el primer laboratorio tenemos que decidir que propiedad mediremos para la partícula 1. Podríamos elegir medir  $\sigma_{x,1}$  o bien podríamos elegir medir  $\sigma_{z,1}$ . Pero no podemos hacer las dos cosas a la vez. El argumento EPR mezcla sutilmente los resultados de ambas mediciones ya que en definitiva ambas

son necesarias si pretendemos otorgar el status de “elementos de realidad” tanto a la propiedad  $\sigma_{x,2}$  como a  $\sigma_{z,2}$ . Efectivamente, aquí hay un razonamiento contra-fáctico. Pero es un razonamiento que cualquier persona sensata estaría dispuesta a hacer: Si la partícula 2 se encuentra en el Labo-2, nada puede saber sobre cuál es la propiedad que el experimentador decidirá medir en el Labo-1. En consecuencia, deberíamos estar dispuestos a aceptar que, pese a que no podemos realizar los dos experimentos sino que debemos elegir uno de ellos, tanto las propiedades  $\sigma_{x,2}$  como  $\sigma_{z,2}$  deben estar escritas en la segunda partícula (o sea, deben ser “elementos de la realidad”). En cambio, la mecánica cuántica no nos permite razonar de esta forma. Asher Peres acuñó la frase que mencionamos varias veces y que describe la actitud que debería tener un físico pragmático ante la posibilidad de caer en razonamientos contra-fácticos. No debería olvidar nunca que *los experimentos que no se realizan no tienen resultados*.

### C. Teorías realistas locales. Variables ocultas.

Queda claro que el argumento de EPR no demuestra una inconsistencia interna de la mecánica cuántica sino que pone en evidencia que esta teoría no satisface ciertos criterios de muy razonable apariencia. Naturalmente debemos preguntarnos si es posible que exista una alternativa compatible con los resultados de los experimentos (que hasta el día de hoy coinciden con las predicciones de la mecánica cuántica) y que además sea compatible con el sentido común, o, más precisamente, con los postulados de EPR. Una teoría de estas características fue mencionada más arriba. Podríamos imaginar que existen en la naturaleza grados de libertad microscópicos que todavía no hemos sido capaces de descubrir. Estos grados de libertad son usualmente denominados “variables ocultas”. Si existieran variables ocultas, podríamos concebir la posibilidad de que nuestra ignorancia sobre su comportamiento y su naturaleza es la responsable de la aleatoriedad que observamos en los resultados de ciertos experimentos. Es decir, podríamos concebir la posibilidad de que al repetir muchas veces el mismo experimento sin controlar el comportamiento de las variables ocultas estuviéramos generando sistemas que en realidad no son idénticos entre sí. En cada realización experimental, en cada evento, los resultados de los experimentos estarían completamente determinados por los valores ocultos. Pero al repetir muchas veces el mismo experimento podríamos obtener resultado distintos distribuidos de manera aparentemente aleatoria. Esta aleatoriedad sería simplemente una consecuencia de nuestra ignorancia.

El trabajo de EPR tuvo la virtud de exponer de manera sistemática cuales son las propiedades que nuestro sentido común le reclama a las teorías físicas. Las teorías compatibles con el sentido común son aquellas que se engloban con el nombre de *teorías realistas locales*. Diremos

que una teoría es “realista” (una palabra que tal vez tiene connotaciones demasiado fuertes como para ser utilizada aquí) si acepta el hecho de que todas las propiedades observables (los elementos de realidad) de los sistemas físicos tienen valores precisos que en última instancia determinan los resultados de las mediciones que efectuemos sobre ellas. Estas teorías incluyen a las que aceptan la existencia de variables ocultas. De acuerdo a ellas la realidad física se describe en su nivel más profundo mediante un modelo en el que los resultados de todos los posibles experimentos están escritos de algún modo en los objetos. Es decir, en este contexto el realismo es sinónimo de determinismo. Toda aleatoriedad debe originarse en nuestra limitada capacidad de control o de conocimiento. Diremos que una teoría es “local” si no admite la posibilidad de que exista acción a distancia o propagación instantánea de cualquier tipo de señal o perturbación. En estas teorías, separando suficientemente dos partes de un sistema (llevándolas a laboratorios muy distantes) garantizamos que las acciones que realicemos en un laboratorio no tendrán ninguna influencia sobre lo que suceda en el otro laboratorio.

#### D. Cómo sabemos si no existen teorías de variables ocultas cuyas predicciones coincidan con las de la mecánica cuántica?

La posibilidad de que exista alguna teoría más fundamental que la mecánica cuántica basada en variables ocultas fue considerada por numerosos autores. La discusión sobre este asunto se aplacó luego de que John von Neumann publicara un teorema en el que se demostraba que no era posible construir una teoría de este tipo que diera lugar a las mismas predicciones que la mecánica cuántica. Su teorema fue publicado en el célebre libro en el que el genial von Neumann presenta su axiomatización de la mecánica cuántica. Sin embargo a principios de los años 60, John Bell puntualizó que el teorema de von Neumann contenía un error, una hipótesis demasiado restrictiva que hacía que sus consecuencias no fueran trascendentes. El propio Bell, comenzó a explorar entonces la posibilidad de construir teorías de variables ocultas dando lugar a una serie de trabajos de consecuencias notables.

Bell intentaba demostrar que Einstein tenía razón y que no podía descartarse la existencia de teorías más fundamentales que la mecánica cuántica en las que el azar se originara en la ignorancia. Esa era su opinión, el prejuicio ideológico con el que comenzó sus trabajos. Y para comenzar, Bell construyó un ejemplo sencillo: Demostró que es posible construir una teoría de variables ocultas que prediga los mismos resultados que la mecánica cuántica para un sistema formado por una única partícula de spin  $1/2$ . De este modo Bell no solamente demostraba que la conclusión de von Neumann era incorrecta sino que, pensaba, abría el camino para el estudio de este tipo de teorías que, tal vez, algún día

podrían reemplazar a la mecánica cuántica. Pero el final de la historia fue muy diferente a como lo imaginaba John Bell. Demostró exactamente lo opuesto a lo que pretendía...

Es muy ilustrativo recorrer la historia de los trabajos de Bell. En su primer trabajo célebre sobre el tema (publicado en 1966) Bell presenta una teoría de variables ocultas para una partícula de spin  $1/2$ . La teoría da lugar exactamente a las mismas predicciones que la mecánica cuántica (una gran virtud). En esta teoría Bell admite que el estado de un sistema debe describirse de manera más completa que como lo hace la mecánica cuántica. En efecto, admite que a la descripción del estado que hace la mecánica cuántica mediante un vector  $|\psi\rangle$  podría agregarse un conjunto de variables desconocidas, a las que genéricamente denotamos como  $\lambda$ . La gran virtud de esta teoría es que admite que conociendo  $|\psi\rangle$  y  $\lambda$  podríamos predecir con certeza los resultados de todas las mediciones sobre el espín. Nuestra ignorancia sobre  $\lambda$  es la responsable del lamentable hecho de que nos veamos obligados a predecir solamente probabilidades.

Por supuesto que esta teoría de Bell no tiene ningún sentido físico sino que está destinada a demostrar que no podemos descartar la existencia de modelos en los que el azar proviene de la ignorancia. El modelo es suficientemente sencillo como para describirlo sintéticamente. Como dijimos, el estado del sistema está descrito por el par  $(|\psi\rangle, \lambda)$ , donde la variable oculta  $\lambda$  es un número real tal que  $-1 \leq \lambda \leq 1$ . Supongamos que aceptamos la siguiente regla para predecir el resultado que se obtiene en la medición de alguna propiedad observable (que está representada por el operador  $\hat{A} = \vec{n} \cdot \sigma$  (cuyos valores son siempre iguales a  $\pm 1$ , lo cual es un dato experimental):

1. a Si  $-1 \leq \lambda \leq \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$  entonces  $A(|\psi\rangle, \lambda) = +1$
2. b Si  $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle < \lambda \leq 1$  entonces  $A(|\psi\rangle, \lambda) = -1$ .

Si admitimos que  $\lambda$  es una variable con una distribución uniforme (o sea, en cada realización del experimento se sortea un valor de  $\lambda$  al azar elegido en todo el intervalo) entonces el valor medio de los resultados es

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \int d\lambda p(\lambda) A(|\psi\rangle, \lambda) \\ \langle \hat{A} \rangle &= \frac{1}{2}((-1)(1 - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle) + (+1)(\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle + 1)) \\ &= \frac{1}{2} \times 2 \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \end{aligned}$$

En consecuencia, el valor medio de cualquier observable obtenido promediando los valores obtenidos para cada  $\lambda$  (y para cada  $|\psi\rangle$ ) es idéntico al predicho por la mecánica cuántica. Una teoría como esta es indistinguible de la mecánica cuántica en cuanto a sus predicciones pero está basada en una imagen del mundo mucho más compatible con nuestro sentido común. Vale la pena comentar una propiedad del modelo de Bell, que está relacionada con aspectos fundamentales del espín que discutimos en la primera clase. Consideremos las tres

propiedades  $\hat{A}_i = \vec{n}_i \cdot \sigma$  donde los versores  $\vec{n}_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) forman ángulos de 120 grados entre si. El modelo de Bell le asigna valores a estas tres propiedades de acuerdo al esquema presentado mas arriba. Es decir, para un dado valor de  $\lambda$  y para un dado estado  $|\psi\rangle$  los valores  $A_i(|\psi\rangle, \lambda)$  están determinados. Sin embargo, estos valores no satisfacen la relación de consistencia funcional  $\sum A_i = 0$ . Esta relación se cumple para los valores medios pero no para los valores individuales.

Luego de formular este modelo, Bell analizó la pregunta obvia: Será posible construir modelos de este tipo para cualquier sistema cuántico? En ese mismo trabajo Bell dió el primer paso en esa dirección analizando un sistema de dos partículas de espín 1/2. Nuevamente fue capaz de construir una teoría de variables ocultas cuyas predicciones coincidían con la mecánica cuántica. Sin embargo, el modelo de Bell para dos espines era no local: Para estados entrelazados se verificaba que las variables ocultas que determinan los valores de las propiedades de cada subsistema son globales y no pueden separarse en variables que afecten localmente a cada parte. Bell se pregunta en su trabajo si esta propiedad era simplemente un defecto de su modelo o si, por el contrario sería una propiedad general de cualquier modelo de variables ocultas cuyas predicciones coincidieran con las de la mecánica cuántica. En una nota al pie de página, que fue incluido en las pruebas de galera del trabajo, figura una aclaración: "Desde la escritura de este trabajo, he encontrado una prueba de que esta es una propiedad general". Esa prueba fue publicada en otro trabajo, escrito con posterioridad al anterior pero publicado, por un problema editorial, antes. Es decir, el primer trabajo de Bell fue publicado en 1966 mientras que el primero lo fue en 1964. En este trabajo figura la demostración mencionada, junto con notables reflexiones sobre sus implicancias.

En efecto, Bell demuestra que cualquier teoría que acepte la existencia de variables ocultas que determinan los valores de todas las propiedades de un sistema (realismo) y al mismo tiempo aceptan el principio de localidad, conducen a predicciones cuantitativamente diferentes que la mecánica cuántica.

### E. Desigualdades de Bell: Mecánica cuántica contra teorías realistas-locales

Los trabajos de John Bell permitieron que la discusión sobre la existencia de teorías de variables ocultas pasara del terreno de la filosofía al de la física, en el cual la validez de los modelos es sometidos al juicio de los experimentos. Es interesante notar que la intención de John Bell al comenzar sus investigaciones era encontrar argumentos a favor del punto de vista de Einstein. Bell expuso su posición ideológica con elocuencia: "*Yo pensaba que la superioridad intelectual de Einstein sobre Bohr en este punto era enorme: una distancia gigante entre un hombre que veía claramente lo que se necesitaba (Einstein) y un oscurantista (Bohr)*". Paradojalmente, con

sus trabajos Bell logró exactamente lo contrario de lo que se proponía: descubrió la forma en la cual el punto de vista de Einstein podía demostrarse falso a partir de los resultados de experimentos reales.

La trascendencia de los trabajos de Bell no puede subestimarse. Los mismos han tenido un impacto enorme en las últimas décadas. En breves palabras, Bell demostró que todas las teorías realistas locales conducen a predicciones cuantitativas sobre resultados experimentales concretos. Asimismo, demostró que estas predicciones pueden entrar en contradicción con las de la mecánica cuántica. En consecuencia, la validez de uno u otro modelo (el cuántico o aquel basado en nuestro sentido común) puede ser sometida al juicio de la ciencia experimental.

A primera vista resulta sorprendente que sea posible derivar predicciones para todas las teorías realistas locales. Estas predicciones toman la forma de desigualdades matemáticas que restringen los valores que pueden tomar las probabilidades de eventos registrados en laboratorios distantes cuando se realizan experimentos sobre las partes de un sistema compuesto. Estas relaciones matemáticas se conocen con el nombre de "desigualdades de Bell". En lo que sigue presentaremos una deducción sencilla de una de estas desigualdades (que no fue presentada por Bell sino por David Mermin en 1981).

### F. Descripción de un experimento sencillo realizado en dos laboratorios.

Consideremos ahora una situación como la analizada en el trabajo de EPR (en la versión desarrollada por David Bohm): Tomamos un sistema compuesto por dos partículas de espín 1/2. Determinamos simultáneamente los valores de las propiedades  $M_1 = -1$  y  $M_2 = -1$ , creando de este modo un estado entrelazado cuyas propiedades discutimos mas arriba. Luego llevamos a cada partícula a un laboratorio distinto (Labo-1 y Labo-2). Ambos laboratorios están espacialmente separados y la distancia entre ellos es tal que no hay posibilidad de propagación de ninguna señal de un laboratorio a otro durante el tiempo en que transcurren nuestros experimentos. En cada laboratorio un experimentador medirá la componente del espín de su partícula a lo largo de alguna de las tres direcciones que indicamos como  $\hat{a}, \hat{b}$  o  $\hat{c}$  en la Figura 3 (las tres direcciones forman un ángulo de 120 grados entre si). Los experimentadores que actúan en cada uno de sus laboratorios eligen al azar en cual de las tres direcciones miden el espín. Podemos pensar que cada experimentador tiene a su disposición un aparato como el que aparece en la Figura 3. Dicho aparato tiene un selector con tres posiciones. Cuando el selector apunta hacia la izquierda el aparato mide la componente  $\hat{a}$  del espín, si el selector apunta hacia arriba el aparato mide la componente  $\hat{b}$  y si apunta hacia la derecha mide la componente  $\hat{c}$ . Cualquiera de esas mediciones da lugar solamente a dos resultados: +1 o -1. El experimento

se repite muchas veces y en cada repetición el sistema se prepara de manera idéntica, ambas partículas se separan y cada experimentador elige al azar (y de manera totalmente independiente) la posición del selector de su aparato y registra el valor que obtiene en su medición.

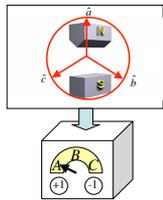


FIG. 21 Para poner a prueba la versión más sencilla de las desigualdades de Bell es necesario un aparato que mide el valor de la componente  $\hat{a}$ ,  $\hat{b}$  o  $\hat{c}$  de una partícula de espín  $1/2$ .

Como cada experimentador puede elegir medir una de tres propiedades ( $A$ ,  $B$ , ó  $C$ ) las mediciones realizadas en los dos laboratorios se pueden agrupar en nueve configuraciones. Sin mucho esfuerzo podemos hacer una lista de todas ellas. Colocando en primer lugar la propiedad medida en el Labo-1 y en segundo lugar la que se mide en el Labo-2, las nueve configuraciones son:  $A_1 - A_2$ ,  $B_1 - B_2$ ,  $C_1 - C_2$ ,  $A_1 - B_2$ ,  $B_1 - A_2$ ,  $A_1 - C_2$ ,  $C_1 - A_2$ ,  $B_1 - C_2$  y  $C_1 - B_2$ .

Qué tipo de resultado podríamos obtener en un experimento de este tipo? Por ahora solamente vamos a aceptar un hecho, que surge de los experimentos. Cada vez que en ambos laboratorios medimos la misma propiedad, obtenemos resultados opuestos. Es decir, los resultados de los experimentos en ambos laboratorios están fuertemente anti correlacionados.

### G. El experimento según las teorías realistas locales.

Pensemos de que manera describiría esta situación experimental una teoría realista local. En primer lugar, cualquier teoría de este tipo debe aceptar que antes de que el experimentador que trabaja en el Labo-1 decida que propiedad medirá, el resultado de dicha medición debe tener existencia real en la partícula 1. Esto es así porque las tres propiedades que el experimentador puede medir (que denotamos como  $A$ ,  $B$  o  $C$ ) son “elementos de la realidad”. En efecto, el argumento EPR debería ser suficiente para convencernos de esto: los valores de estas propiedades podrían ser predichos con certeza si hicieramos el experimento adecuado en el Labo-2. Entonces, todas las teorías realistas locales deben aceptar

que cada partícula viaja hacia su detector llevando un conjunto de instrucciones consigo que indican el resultado de cualquier medición. Es tentador utilizar una metáfora biológica: Cada partícula lleva consigo *genes* que determinan los valores de las propiedades  $A$ ,  $B$ ,  $C$ . Podríamos denotar a estas instrucciones con una terna de números  $(A, B, C)$  que indican los valores que se obtendrían si se midiera el valor de alguna de estas tres propiedades. Por ejemplo si la partícula lleva un gen del tipo  $(+1, -1, +1)$  quiere decir que si el experimentador decidiera medir  $A$  ó  $C$  obtendría en ambos casos el valor  $+1$  mientras que si midiera  $B$  el resultado sería  $-1$ . Es evidente que, como solamente hay dos resultados posibles para la medición de cada una de las tres propiedades, tan solo hay ocho genes posibles para cada partícula. En la siguiente Tabla presentamos la lista exhaustiva de todos ellos:

GENES POSIBLES	
Partícula 1	Partícula 2
$(+1,+1,+1)$	$(-1,-1,-1)$
$(+1,+1,-1)$	$(-1,-1,+1)$
$(+1,-1,+1)$	$(-1,+1,-1)$
$(+1,-1,-1)$	$(-1,+1,+1)$
$(-1,+1,+1)$	$(+1,-1,-1)$
$(-1,+1,-1)$	$(+1,-1,+1)$
$(-1,-1,+1)$	$(+1,+1,-1)$
$(-1,-1,-1)$	$(+1,+1,+1)$

Por otra parte, toda teoría realista local debe aceptar que los genes que lleva la partícula 1 tienen que estar correlacionados con los que lleva la partícula 2. En efecto, esto debe ser así porque si los dos experimentadores decidieran medir la misma propiedad verificarían que obtienen resultados opuestos. Por lo tanto, el gen que lleva la primera partícula determina completamente al gen de la segunda. Por ejemplo, si la primera partícula lleva un gen del tipo  $(+1, -1, +1)$  la segunda debe llevar un gen complementario, del tipo  $(-1, +1, -1)$ .

### H. La desigualdad de Bell más sencilla.

El descubrimiento fundamental de Bell es que todas las teorías que aceptan la existencia de genes deben satisfacer ciertas restricciones, que toman la forma de desigualdades matemáticas. Presentaremos aquí la versión más sencilla de estas desigualdades. Invitamos al lector a realizar un intento por seguir el siguiente razonamiento, que resultará crucial para el resto de nuestro argumento.

Supongamos que la primera partícula lleva el gen  $(+1, +1, +1)$ . En ese caso la segunda llevará el gen  $(-1, -1, -1)$ . Entonces, aunque los dos experimentadores midan propiedades distintas los resultados que obtendrán serán siempre opuestos: en el Labo-1 siempre se obtendrá el resultado  $+1$  mientras que en el Labo-2 siempre se obtendrá el resultado  $-1$ . Una situación idéntica tiene lugar si el gen que lleva la primera partícula es

$(-1, -1, -1)$  ya que en ese caso también los resultados serán siempre opuestos. Si las partículas fueran generadas únicamente con estos dos tipos de genes entonces deberíamos concluir que los resultados obtenidos en ambos laboratorios serían siempre opuestos. Por supuesto, esta no es una hipótesis razonable ya que no sabemos nada sobre el mecanismo subyacente que produce genes diferentes (esas son, precisamente, las variables ocultas).

Pero, aunque parezca mentira, es posible deducir una propiedad muy sencilla que se debe cumplir para todos los otros genes (o sea, aquellos en los que hay una instrucción que es distinta de las otras dos como es el caso de los genes  $(+1, +1, -1)$  y  $(+1, -1, +1)$ ). Es fácil mostrar que para todos esos genes *habrá cinco configuraciones para las cuales los resultados obtenidos en Labo-1 y Labo-2 serán distintos y cuatro configuraciones para las cuales estos resultados serán iguales*. Para ver que esto es cierto es suficiente con hacer un análisis exhaustivo de lo que sucede con cada uno de los genes. Por ejemplo, si el gen que lleva la primera partícula es  $(+1, +1, -1)$ , tal como está indicado en la Figura 4, los resultados de los experimentos serán opuestos siempre que el primero y segundo experimentador midan respectivamente las propiedades  $A_1 - A_2$ ,  $A_1 - B_2$ ,  $B_1 - B_2$ ,  $B_1 - A_2$  y  $C_1 - C_2$ . En cambio, los resultados serán idénticos siempre que los experimentadores realicen las mediciones de las propiedades  $A_1 - C_2$ ,  $B_1 - C_2$ ,  $C_1 - A_2$  y  $C_1 - B_2$ . El lector puede comprobar que para todos los genes en los que las tres instrucciones no sean idénticas se verifica este mismo resultado: *Siempre hay cinco configuraciones de los detectores para los que los resultados obtenidos en ambos laboratorios son opuestos y hay cuatro para las cuales los resultados son idénticos* (recordemos que si las instrucciones son idénticas entonces los resultados siempre serán distintos). Si los experimentadores eligen al azar las configuraciones de sus detectores entonces podemos concluir que por lo menos en 5 de cada 9 experimentos los resultados serán opuestos!

Esta predicción es totalmente independiente de la naturaleza de las variables ocultas. Esta conclusión es tan importante que merece ser repetida. Para toda teoría realista local predécimos que la probabilidad  $P_{R-L}$  de que se obtengan resultados diferentes debe cumplir la siguiente desigualdad:

$$P_{R-L}(\text{Labo-1} \neq \text{Labo-2}) \geq 5/9 = 0.555\dots \quad (100)$$

### I. El experimento según la mecánica cuántica.

La mecánica cuántica también realiza una predicción para el valor de la probabilidad de que se obtengan resultados diferentes en ambos laboratorios. Esta predicción es drásticamente diferente de la de las teorías realistas locales. En efecto, de acuerdo a la mecánica cuántica la probabilidad de obtener resultados distintos es:

$$P_{Cuant}(\text{Labo-1} \neq \text{Labo-2}) = 1/2 = 0.5. \quad (101)$$

GEN DE LA PARTICULA 1: (+1,+1,-1)			
Cinco experimentos con resultados distintos		Cuatro experimentos con resultados iguales	
Labo-1	Labo-2	Labo-1	Labo-2
A	A	A	C
B	B	C	A
C	C	B	C
A	B	C	B
B	A		

FIG. 22 Para el gen  $(+1, +1, -1)$  hay cinco configuraciones de los detectores que dan lugar a que el resultado registrado en el Labo-1 sea diferente que el registrado en el Labo-2 mientras que hay cuatro configuraciones para las cuales los resultados son idénticos. Esto se repite para todos los genes en los que las tres instrucciones no son iguales.

Para llegar a esta conclusión es necesario utilizar el formalismo matemático de la mecánica cuántica. Sin embargo podemos hacer un intento por explicar su origen de manera sencilla (el lector no interesado está invitado a omitir la lectura de este párrafo). Si realizamos mediciones sucesivas de componentes de un spín de una partícula en direcciones perpendiculares sabemos que, como las proyecciones perpendiculares del spín definen magnitudes complementarias, los resultados de la segunda medición estarán distribuidos al azar con una probabilidad del 50% para cada uno de los dos valores posibles. En cambio, si realizamos mediciones sucesivas en dos direcciones  $\hat{a}$  y  $\hat{b}$ , que forman un ángulo  $\theta_{\hat{a}\hat{b}}$ , la mecánica cuántica establece que la probabilidad de que los resultados de ambas mediciones serán iguales es

$$P(B = A) = \cos^2(\theta_{\hat{a}\hat{b}}/2). \quad (102)$$

Si las direcciones  $\hat{a}$  y  $\hat{b}$  forman un ángulo de 120 grados, como en el caso de la Figura 4, la probabilidad de que los resultados de dos mediciones sucesivas sean iguales es 1/4 (o sea, en el 25% de los casos obtendremos resultados iguales y en el 75% obtendremos resultados distintos<sup>3</sup>). Con este ingrediente estamos en condiciones de deducir cual es la predicción que la mecánica cuántica realiza para el experimento analizado en las secciones anteriore. Para calcular la probabilidad de que los resultados del Labo-1 sean diferentes de los del Labo-2 tenemos que analizar todos los casos posibles. Presentaremos aquí el estudio de uno de ellos y dejaremos para el lector interesado el examen del resto, que se realiza con un razonamiento similar. Supongamos que en el Labo-1 se midió la propiedad  $A$  y se obtuvo el valor  $+1$ . En ese caso sabemos que si

<sup>3</sup> esto se debe a que el coseno de un ángulo de 60 grados es igual a 1/2

midieramos la propiedad  $A$  en el Labo-2 obtendríamos con certeza el valor  $-1$ . En consecuencia podemos afirmar que la partícula que se encuentra en el Labo-2 está en el estado de espín  $-1$  en la dirección  $\hat{a}$ . Nos interesa calcular en ese caso cual es la probabilidad de obtener el valor  $-1$  para la medición de las componentes  $\hat{a}$ ,  $\hat{b}$  ó  $\hat{c}$ . Para eso podemos analizar todos los casos posibles: Si medimos  $A$  (lo que ocurre en la tercera parte de los casos) obtendremos el resultado  $-1$  con probabilidad 1. En cambio, si medimos  $B$  ó  $C$  (lo que ocurre en las restantes dos terceras partes de los casos) podemos apelar al resultado que mencionamos más arriba y afirmar que obtendremos el valor  $-1$  con probabilidad  $1/4$ . En conclusión si en el Labo-1 se mide  $A = +1$  la probabilidad de que los resultados de las mediciones realizadas en el Labo-2 sean distintas resulta ser  $\frac{1}{3}(1 + 1/4 + 1/4) = 1/2$ , que es justamente el resultado que mencionamos mas arriba. Razonando de igual modo para los restantes resultados posibles para las mediciones realizadas en el Labo-1 llegamos a la misma conclusión y de ese modo demostramos la validez de la predicción cuantica expresada mas arriba.

El contraste entre la predicción cuántica y la predicción de cualquier teoría realista-local es drástico: De acuerdo a la mecánica cuántica en la mitad de los experimentos obtendremos resultados diferentes y en la otra mitad los resultados serán idénticos. Esto es incompatible con la predicción de cualquier teoría realista local ya que de acuerdo a todas ellas los resultados deben ser diferentes por lo menos en el 55.5% de los experimentos. Quién tiene razón: la mecánica cuántica o las teorías realistas locales? Para dirimir este debate, debemos realizar el experimento y comprobar cual de las dos predicciones es la correcta.

## J. Otras desigualdades de Bell: CHSH

La desigualdad de Bell que discutimos mas arriba no fue la que Bell expuso en su trabajo sino que es un argumento debido a Mermin, que tiene la virtud de ser extremadamente simple. Sin embargo, no hay ningún experimento que haya detectado la violación de esta desigualdad. Por el contrario, los experimentos realizados han buscado violaciones de otras desigualdades. En particular, una de las mas estudiadas fue introducida pocos años después del trabajo de Bell por cuatro físicos: Clauser, Horn, Shimony y Holt, y se conoce con la sigla CHSH. Es interesante revisar el argumento en que se basa esta desigualdad. Como antes, consideraremos experimentos realizados en laboratorios distantes. En cada laboratorio hay una parte de un sistema compuesto. Es decir: en algún lugar del espacio se genera un par de partículas en un estado tal que las correlaciones entre ellas son fuertes (son aquellas predichas por estados máximamente entrelazados). Cada una de ellas viaja a un laboratorio y en cada uno de ellos se mide uno de dos observables: En el laboratorio 1 se mide la componente del espín a lo largo de la dirección  $\vec{a}$  o de la dirección  $\vec{vecb}$ .

En el laboratorio 2 se mide la componente del espín a lo largo de las direcciones  $\vec{c}$  o  $\vec{d}$ . Cada experimentador elige al azar la dirección en que va a medir y la distancia entre los laboratorios (y entre ellos y la fuente donde se producen los pares) es muy grande, de modo tal que no hay posibilidad de conexión causal entre los eventos registrados en los laboratorios 1 y 2.

El mismo argumento que expusimos mas arriba nos lleva a la conclusión de que los resultados de los experimentos realizados en el laboratorio 1 deben existir en ese laboratorio ya que su valor puede ser predicho con certeza si midieramos la misma dirección en el otro laboratorio. Cualquier teoría realista local debe admitir que los valores de estas propiedades están determinados por variables ocultas  $\lambda$ . Por ejemplo, el valor de la proyección del espín en la dirección  $\vec{a}$ , al que llamaremos  $a_\lambda = \pm 1$ , debe ser independiente de lo que mida el observador presente en el laboratorio 2 (de otro modo, deberíamos escribir  $a_\lambda(\vec{c})$  o  $a_\lambda(\vec{d})$ ). Como todos estos valores son  $\pm 1$ , se verifica siempre la igualdad

$$a_\lambda(c_\lambda + d_\lambda) + b_\lambda(c_\lambda - d_\lambda) = \pm 2.$$

Tomando el módulo de esta expresión podemos escribir

$$|a_\lambda c_\lambda + a_\lambda d_\lambda + b_\lambda c_\lambda - b_\lambda d_\lambda| = 2.$$

Si multiplicamos por la probabilidad  $p(\lambda)$ , que caracteriza la distribución de variables ocultas  $\lambda$ , integramos sobre  $\lambda$  y usamos la desigualdad triangular (que establece que  $|x + y| \leq |x| + |y|$ ) podemos obtener la desigualdad

$$|K(\vec{a}, \vec{c}) + K(\vec{a}, \vec{d}) + K(\vec{b}, \vec{c}) - K(\vec{b}, \vec{d})| \leq 2,$$

donde las funciones de correlación se definen como el valor medio del producto de los resultados de cada par de experimentos:  $K(\vec{a}, \vec{c}) = \langle \vec{a} \cdot \sigma; \vec{c} \cdot \vec{\sigma} \rangle$  (que en una teoría de variables ocultas resultan ser  $K(\vec{a}, \vec{c}) = \int d\lambda a_\lambda c_\lambda$ ). Esta es la famosa desigualdad CHSH, que debe satisfacerse para toda teoría realista local, puede violarse de acuerdo a la mecánica cuántica.

En efecto, de acuerdo a la mecánica cuántica, la función de correlación resulta ser  $K(\vec{a}, \vec{c}) = -\vec{a} \cdot \vec{c}$ . Podemos ver que es posible violar esta desigualdad si elegimos los vectores  $\vec{a}$ ,  $\vec{c}$ ,  $\vec{b}$  y  $\vec{d}$  formando un ángulo  $\theta$  entre ellos (en ese orden). Entonces, la combinación de funciones de correlación que aparece resulta ser

$$|K(\vec{a}, \vec{c}) + K(\vec{a}, \vec{d}) + K(\vec{b}, \vec{c}) - K(\vec{b}, \vec{d})| = |big|3 \cos \theta - \cos 3\theta|.$$

Eligiendo  $\theta = \pi/4$  entonces resulta ser

$$|K(\vec{a}, \vec{c}) + K(\vec{a}, \vec{d}) + K(\vec{b}, \vec{c}) - K(\vec{b}, \vec{d})| = 2\sqrt{2},$$

que claramente es mayor que 2. Es posible demostrar que esta es la máxima violación admitida por la mecánica cuántica (esta es la "cota de Cirelson").

## K. La violación de las desigualdades de Bell

Después de los trabajos de Bell varios grupos se lanzaron a realizar experimentos como los descritos en la sección anterior. Cabe aclarar que ninguno de estos grupos lo hizo con la esperanza de detectar violaciones a las predicciones cuánticas. Por el contrario, a esa altura del siglo XX nadie dudaba que la mecánica cuántica saldría airoso en su confrontación contra las teorías de variables ocultas. Para poder realizar estos experimentos fue necesario superar varios obstáculos tecnológicos y los primeros resultados en los que se detectaron claras violaciones a las desigualdades de Bell fueron obtenidos recién en 1982 por Alain Aspect en París.

El experimento de Aspect fue un verdadero *tour de force* por el que debería hacerse acreedor al premio Nobel de física. Fue realizado utilizando pares de fotones entrelazados generados a partir del decaimiento de átomos de Calcio. Cuando este tipo de átomo decae en una cascada  $S-P-S$  emite dos fotones que tienen casi la misma frecuencia y que están entrelazados en su polarización. Este grado de libertad de los fotones se comporta de manera muy similar al espín de una partícula de espín  $1/2$ . Para realizar su experimento Aspect no solamente tuvo que perfeccionar su fuente de pares de fotones entrelazados (que para esa época eran toda una novedad). Una vez producidos cada uno de los fotones se dirigía hacia un extremo distinto del laboratorio donde se habían montado dos estaciones de trabajo idénticas que jugaban el rol del Labo-1 y el Labo-2 que mencionamos mas arriba. Estas estaciones constaban de un detector que cumplía el papel del instrumento de medición que ilustramos en la Figura 3. En el experimento, en cada estación de trabajo los fotones se encontraban con un espejo que cambiaba de orientación de manera azarosa. Para cada una de estas direcciones los fotones eran enviados a detectores diferentes en los que se medía la polarización en alguna dirección (las que juegan un papel equivalente a las direcciones  $\hat{a}$ ,  $\hat{b}$  o  $\hat{c}$  de la Figura 3). Aspect invirtió un esfuerzo considerable para asegurarse de que los espejos variaran su orientación suficientemente rápido y que los detectores estuvieran suficientemente separados como para poder garantizar que no existía conexión causal posible entre los registros tomados en ambos extremos del laboratorio. La longitud del laboratorio era de alrededor de 10 metros y los espejos cambiaban de posición en tiempos del orden de varios nano-segundos (hay que recordar que la luz recorre una distancia de casi treinta centímetros en un nano-segundo).

Los resultados de los experimentos de Aspect fueron concluyentes para la mayoría de los físicos, que por otra parte no dudaban sobre la validez de la mecánica cuántica. Sin embargo, un núcleo de escépticos continuó intentando producir experimentos todavía mas concluyentes. Para ellos, los resultados de Aspect podían ser criticados desde distintos ángulos. Por cierto, teniendo en cuenta las implicancias fundamentales del resultado del experimento, se justifica tener una actitud que en otro

contexto podría ser calificada de exageradamente conservadora. Los problemas del experimento de Aspect eran fundamentalmente dos: Por un lado los ángulos de los espejos no variaban de manera totalmente aleatoria y por lo tanto era posible imaginar algún mecanismo (inverosímil pero imaginable) por el cual los fotones pudieran “conspirar” para que el experimento pareciera favorecer a la mecánica cuántica aún cuando la teoría subyacente fuera realista local. Por otra parte el tiempo de respuesta de los detectores era demasiado largo lo cual traía aparejadas limitaciones en la sincronización de eventos (el tiempo de respuesta y el tiempo característico de la emisión en cascada era comparable). Por otra parte, la baja eficiencia de los detectores originaba otro problema potencial: No todos los eventos son registrados y no hay manera de garantizar que el subconjunto de eventos que dan lugar a la señal medida sea una muestra no-sezgada del total. Si bien parece completamente razonable aceptar que esto es cierto, en el contexto de este experimento aún este tipo de suposiciones “razonables” son puestas en discusión. Debido a esta, y a muchos otros cuestionamientos mas técnicos, durante las últimas dos décadas del siglo XX se realizaron muchos otros experimentos para testear la violación de las desigualdades de Bell.

En la actualidad las técnicas disponibles para generar pares de fotones entrelazados han avanzado notablemente. Los métodos mas modernos utilizan un fenómeno que se conoce como *conversión paramétrica inversa*. Este fenómeno se observa cuando ciertos cristales son iluminados con un laser intenso. Para ciertos cristales no-lineales se produce el proceso de conversión de un fotón del laser en un par de fotones que tienen frecuencias cercanas (en este proceso se conserva la energía y por lo tanto la suma de las frecuencias de los fotones emitidos es igual a la frecuencia del laser incidente). El par de fotones resulta estar entrelazado en su polarización. Los fotones generados de este modo han sido utilizados para realizar un gran número de experimentos en los que se demuestra la violación de desigualdades de Bell. Los experimentos actuales involucran distancias mucho mayores que las usadas en el experimento de Aspect. En 2001 el grupo dirigido por Anton Zeilinger en Innsbruck presentó resultados de un notable experimento donde se detectaban violaciones a desigualdades de Bell con fotones que recorrían varios centenares de metros antes de ser detectados). Poco después, Nicolas Gisin detectó señales claras de violaciones a las desigualdades de Bell en experimentos donde los fotones viajaban decenas de kilómetros (desplazándose por fibras ópticas que corren bajo la superficie del lago de Ginebra). En la actualidad, la existencia de violaciones a las desigualdades de Bell es un hecho que goza de un abrumador consenso a partir de la acumulación de una enorme cantidad de resultados experimentales.

## L. El entrelazamiento como un recurso físico

El entrelazamiento es una propiedad de la mecánica cuántica que fue reconocida desde sus primeros años. Por ejemplo, es bien sabido que para construir un modelo razonable del átomo de Helio es necesario aceptar que los spines de sus dos electrones están entrelazados. En efecto, los estados entrelazados en sistemas de dos spines surgen muy naturalmente y juegan un rol muy importante en muchos fenómenos de la física atómica y molecular. Ningún físico medianamente informado consideraría al entrelazamiento como una propiedad exótica de la física cuántica. Sin embargo, el tipo de entrelazamiento al que la mayoría de los físicos está acostumbrado es aquel que se produce entre las partes de sistemas microscópicos. En ese contexto los consecuencias paradójicas de este fenómeno no se ponen de manifiesto. Pero es evidente que, tal como fue analizado en el trabajo de EPR, cuando el entrelazamiento está presente a escala macroscópica es responsable de buena parte de los misterios de la física cuántica.

Desde hace mucho tiempo que somos concientes de la utilidad de almacenar energía, por ejemplo en una batería. Una vez almacenada es posible utilizarla para prender una lámpara, mover un motor, etc. En definitiva, sabemos que la energía almacenada es útil para realizar trabajo. Sólo recientemente se llegó a la conclusión de que es posible concebir al entrelazamiento como un recurso físico. La pregunta que surge en este contexto es *cuál es el tipo de tareas que necesitan del entrelazamiento para su ejecución?* Sólo recientemente se comenzó a abordar esta pregunta y se demostró claramente que, al igual que la energía, podríamos almacenar este recurso y utilizarlo para realizar tareas vinculadas con el procesamiento y la transmisión de la información. La exploración de las posibilidades que abre el uso del entrelazamiento como recurso físico es un campo relativamente nuevo y la demora en su desarrollo se debe a que sólo recientemente se comprobó que es posible generar, preservar y manipular pares de objetos entrelazados sobre distancias macroscópicas.

## M. Comentarios y metáforas finales

Cuál es la imagen del Universo que nos provee la mecánica cuántica? No responderemos completamente esta pregunta aquí sino que solo resumiremos los ingredientes de esta visión a los que nos hemos referido en este trabajo. La mecánica cuántica postula la existencia de propiedades observables de un objeto que son incompatibles entre sí. Esto es algo novedoso y profundo. Para asimilarlo es necesario cambiar radicalmente nuestra visión de la realidad física. En primer término deberíamos admitir que al hablar de las *propiedades de un objeto* podemos generar cierta confusión. Esta terminología nos induce a pensar en algo que es propio del objeto, que le pertenece solamente a él. Por el con-

trario, la mecánica cuántica establece que aquello a lo que llamamos propiedades (o que más técnicamente denominamos como una “magnitud física observable”) es en realidad un canal mediante el cual el objeto interactúa con el mundo que lo rodea. El legado del principio de complementariedad es que los objetos tienen distintas ventanas con las que se conectan con el resto del Universo y que existen ventanas que no son compatibles entre sí. Aquello que llamamos “posición” o “momento” son en realidad idealizaciones que lo único que expresan son distintos mecanismos de interacción (canales) por los cuales los objetos de la naturaleza pueden afectarse mutuamente. Lo que la mecánica cuántica nos enseña es que hay ciertos mecanismos de interacción que son compatibles entre sí y que, por el contrario, hay otros que no lo son. Cuando un objeto interactúa con el mundo que lo rodea mediante el “canal de posición”, no puede hacerlo mediante el “canal de momento” y viceversa. En definitiva, la mecánica cuántica nos enseña que los objetos tienen distintas caras y que no todas ellas pueden ser vistas al mismo tiempo. La esencia del principio de complementariedad es esa y ese es un hecho fundamental.

Otra de las enseñanzas de la física cuántica es que el acto de medición no es un hecho pasivo. Probablemente este sea uno de los aspectos más controvertidos de la mecánica cuántica. En efecto, la mecánica cuántica coloca al observador en un lugar diferente del que tradicionalmente le otorgaba la física. Anteriormente se pensaba que las perturbaciones inherentes a la observación podían ser minimizadas. Se pensaba que era posible concebir al acto de observar como una acción asimilable a la de *revelar algo que está escrito en el objeto estudiado*. La mecánica cuántica derribó ese paradigma y lo reemplazó por otro en el que el acto de observar es siempre una interacción. Muchas veces se presenta este hecho como una ventana por la cual puede colarse el subjetivismo. Pero la física cuántica no dice eso sino que establece que el proceso de medición no puede dejar de objetivarse. No puede dejar de describirse como una interacción física. Pero claro, la forma en la que la física cuántica combina esto con la existencia de propiedades incompatibles no puede dejar de sorprendernos. En efecto, si interactuamos con un objeto mediante un cierto canal, determinamos el valor de una de sus propiedades y creamos un estado en el los valores de sus caras complementarias están completamente indefinidos. Lo sorprendente y anti-intuitivo es que no es posible concebir a este como un estado de *ignorancia* sobre los valores de las caras complementarias. Por el contrario, debe ser tratado como una superposición de todas ellas. Probablemente la lección cuántica que nos resulte más difícil de digerir siga siendo aquella que sintetiza la frase de Asher Peres: *los experimentos que no se realizan no tienen resultados*.

Por último, las predicciones cuánticas para los sistemas compuestos son ciertamente sorprendentes pero a la luz de lo dicho anteriormente no deberían parecerlo tanto. La mecánica cuántica nos dice que podemos encontrar un conjunto de propiedades globales de un sistema com-

puesto que sean complementarias a todas las propiedades de cualquiera de sus partes. Cuando medimos ese conjunto de propiedades colectiva de un sistema compuesto preparamos al objeto en un estado en el que todas las alternativas de sus facetas complementarias están presentes. Ese es un estado entrelazado en el cual los valores de las propiedades de las partes, que son complementarias con las propiedades medidas, están completamente indefinidos. Es importante destacar que para que este estado mantenga sus propiedades más notables (el entrelazamiento) es vital que permanezca aislado de todo tipo de interacciones con el medio (que típicamente tienen lugar a través de canales locales). Si el objeto permanece aislado y no es afectado por ningún mecanismo que induzca su *decoherencia* entonces seguirá comportándose como un todo. Será un objeto extendido, una unidad no-local, pese a que sus partes se hayan desplazado a lugares distantes. Las manifestaciones del comportamiento cuántico de objetos compuestos cuyas partes entrelazadas están separados por distancias macroscópicas son realmente sorprendentes. El siglo XXI será, sin duda, el siglo donde el estudio, la ingeniería y el aprovechamiento de este tipo de estados dará lugar al desarrollo de novedosas tecnologías cuánticas que, tal vez, contribuyan a que alguna vez la afirmación de Richard Feynman “*nadie entiende la mecánica cuántica*” deje de ser cierta.

### **XIII. CLASES 16 Y 17: INFORMACIÓN Y COMPUTACIÓN CUÁNTICA**

#### **ESTA SECCION ESTA EN PREPARACION**

Una introducción. Feynman, simulaciones, etc. Historia.

#### **A. El qubit**

La superposición cuántica. Recursos necesarios para simular un sistema cuántico en una computadora clásica.

#### **B. Evolución temporal. Circuitos**

Lógica reversible. Física e información. Conjetura de Landauer. Compuertas cuánticas universales. Control-not y rotaciones.

#### **C. Compuertas universales**

Teorema general (enunciado, comentarios)

#### **D. Qué es una computadora cuántica**

Criterios de Di Vincenzo.

#### **E. Algoritmos cuánticos**

El algoritmo de Deutsch Josza. Breve historia de los algoritmos (entre 1986 y 1994). Simon, etc.

#### **F. Búsqueda de períodos**

Usar el paralelismo cuántico para algo útil... es posible? Comentarios sobre el algoritmo de Shor. Implicancias.

#### **G. Estimación de fase**

Una subrutina omnipresente. El poder de la transformada de Fourier cuántica.

#### **H. Algoritmo de scattering**

Un algoritmo con inspiración física. Tomografía y espectroscopía son formas duales de un cómutador cuántico.

## XIV. CLASES 19: MOMENTO ANGULAR

### A. Rotaciones y momento angular

### B. Diagonalización simultánea de $\vec{J}^2$ y $J_z$

Podemos definir operadores de subida y bajada, que cumplen un rol muy similar a los operadores de creación y destrucción para un oscilador armónico. Estos son:

$$J_{\pm} = J_x \pm iJ_y, \quad J_- = J_+^{\dagger}.$$

Estos operadores obviamente conmutan con  $\vec{J}^2$  y satisfacen la siguiente relación de conmutación con  $J_z$ :

$$[J_z, J_{\pm}] = \pm \hbar J_{\pm}$$

De esta igualdad surge que si el vector  $|a, b\rangle$  es autoestado de  $\vec{J}^2$  y de  $J_z$  con autovalores  $a\hbar^2$  y  $b\hbar$  respectivamente, entonces  $J_{\pm}|a, b\rangle$  es autoestado de  $\vec{J}^2$  y de  $J_z$  con autovalores  $a\hbar^2$  y  $(b \pm 1)\hbar$  respectivamente. Esto surge trivialmente de las identidades

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 J_{\pm}|a, b\rangle &= J_{\pm} \vec{J}^2|a, b\rangle = a\hbar^2 J_{\pm}|a, b\rangle \\ J_z J_{\pm}|a, b\rangle &= (J_{\pm} J_z \pm \hbar J_{\pm})|a, b\rangle = (b \pm 1)\hbar J_{\pm}|a, b\rangle \end{aligned}$$

Con estos ingredientes es relativamente simple encontrar el espectro de  $\vec{J}^2$  y  $J_z$ . Para eso procedemos de la siguiente manera.

1.  $a \geq 0$ . Esto surge de que el operador  $\vec{J}^2$  es definido positivo. En efecto, para cualquier estado  $|\psi\rangle$  se verifica que

$$\langle \psi | \vec{J}^2 | \psi \rangle = \sum_{a=x,y,z} \|J_a |\psi\rangle\|^2 \geq 0$$

En consecuencia, como  $\vec{J}^2$  es semidefinido positivo, sus autovalores son números reales mayores o iguales que cero.

2. Para cada valor de  $a$ , el autovalor  $b$  está acotado, Es decir, para todo  $a$ , existe  $j \geq 0$  tal que  $-j \leq b \leq j$ . Esto surge a partir de la observación de que los operadores  $J_- J_+$  y  $J_+ J_-$  también son semi definidos positivos. En efecto, para ambos operadores se cumple que para todo estado  $|\psi\rangle$

$$\langle \psi | J_{\mp} J_{\pm} | \psi \rangle = \|J_{\pm} |\psi\rangle\|^2 \geq 0$$

Por otra parte, es fácil demostrar que

$$J_{\mp} J_{\pm} = \vec{J}^2 - J_z^2 \mp \hbar J_z$$

Entonces, si tomamos el valor medio de los operadores  $J_{\mp} J_{\pm}$  en los autoestados  $|a, b\rangle$  tenemos

$$\begin{aligned} \langle a, b | J_{\mp} J_{\pm} | a, b \rangle &= \hbar^2 (a - b^2 \mp b) \geq 0 \\ \text{entonces } a &\geq b^2 \pm b. \end{aligned}$$

De la ecuación  $a \geq b^2 \pm b$  surge que si  $b \geq 0$  entonces debe cumplirse que  $a \geq b(b \pm 1) \geq b(b+1)$ , mientras que si  $b$  es negativo se verifica que  $a \geq |b|(|b| \mp |b|) \geq |b|(|b| + 1)$ . En todo caso,  $b$  está acotado y debe tomar valores entre un valor máximo  $b_{max} = j \geq 0$  y un valor mínimo  $b_{min} = -j$ . Por otra parte se cumple que  $a = j(j+1)$ . Teniendo en cuenta esto, a partir de ahora cambiaremos de notación y a los autoestados comunes de  $\vec{J}^2$  y  $J_z$  los denominaremos  $|j, m\rangle$ . O sea

$$|j, m\rangle = |a, b\rangle$$

con  $a = j(j+1)$  y  $b = m$ .

3.  $j$  es entero o semientero. Mas arriba demostramos que los operadores  $J_{\pm}$  nos permiten movernos hacia arriba o hacia abajo del espectro de  $J_z$ . O sea, el estado  $J_{\pm}|j, m\rangle$  es autoestado de  $J_z$  con autovalor  $(m \pm 1)\hbar$ . Es decir:

$$J_{\pm}|j, m\rangle = C_{\pm}(j, m)|j, m \pm 1\rangle$$

donde las constantes  $C_{\pm}(j, m)$  se obtienen imponiendo la normalización de los estados  $|j, m\rangle$  y resultan ser

$$\begin{aligned} |C_{\pm}|^2 &= \langle j, m | J_{\mp} J_{\pm} | j, m \rangle = \langle j, m | \vec{J}^2 - J_z^2 \mp \hbar J_z | j, m \rangle \\ &= \hbar^2 (j(j+1) - m(m \pm 1)) = \hbar^2 ((j \mp m)(j + 1 \pm m)) \end{aligned}$$

En consecuencia, podemos escribir que

$$\begin{aligned} J_{\pm}|j, m\rangle &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle \\ &= \hbar \sqrt{(j \mp m)(j + 1 \pm m)} |j, m \pm 1\rangle \end{aligned}$$

o bien

$$\begin{aligned} |j, m \pm 1\rangle &= \frac{1}{\hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}} J_{\pm} |j, m\rangle \\ |j, m \pm 1\rangle &= \frac{1}{\hbar \sqrt{(j \mp m)(j + 1 \pm m)}} J_{\pm} |j, m\rangle \end{aligned}$$

Ahora bien, sabemos que el espectro de  $J_z$  está acotado ya que debe valer que  $-j \leq m \leq j$ . Esto se pone en evidencia notando que el estado  $|j, j\rangle$  es tal que

$$\begin{aligned} J_+ |j, j\rangle &= 0 \\ J_- |j, -j\rangle &= 0 \end{aligned}$$

El argumento para demostrar que  $j$  es entero o semientero ahora es idéntico al usado para encontrar el espectro del oscilador armónico: Supongamos que partimos del estado  $|j, j\rangle$  y aplicamos sucesivas veces el operador  $J_-$ . Luego de  $k$  pasos, llegaremos al estado  $|j, j-k\rangle$ . Si  $j$  no fuera entero o semientero entonces podríamos repetir este procedimiento un número de veces suficiente como

para encontrar un valor de  $m \leq -j$  lo cual es absurdo. Solamente cuando  $j$  es entero o semientero podemos asegurar que partiendo del estado  $|j, j\rangle$  llegaremos al estado  $|j, -j\rangle$  en un número entero de pasos. La cantidad de pasos es siempre  $(2j + 1)$ .

4. Los espacios generados por los vectores  $\{|j, m\rangle, -j \leq m \leq j\}$  son invariantes frente a las rotaciones. Esto es fácil de demostrar ya que cualquier rotación es de la forma  $\mathcal{D}(R_{\vec{n}}(\phi)) = \exp(-i\phi\vec{J} \cdot \vec{n})$ . En consecuencia el operador  $\mathcal{D}(R_{\vec{n}}(\phi))$  conmuta con  $\vec{J}^2$  y por lo tanto transforma un autoestado de este operador en otro autoestado. O sea, las rotaciones no mezclan vectores con diferente valor del número cuántico  $j$ .

5. Para uso futuro, conviene recolectar aquí algunas identidades importantes. Aplicando  $J_-$  sucesivas veces al estado  $|j, m\rangle$  obtenemos

$$\begin{aligned} J_-|j, m\rangle &= \hbar\sqrt{(j+m)(j+1-m)}|j, m-1\rangle \\ J_-^k|j, m\rangle &= \hbar^k\sqrt{\frac{(j+m)!(j+k-m)!}{(j+m-k)!(j-m)!}}|j, m-k\rangle \\ J_-^k|j, j\rangle &= \hbar^k\sqrt{\frac{2j!k!}{(2j-k)!}}|j, j-k\rangle \end{aligned}$$

De las expresiones anteriores se deduce la fórmula para obtener el estado  $|j, m\rangle$  a partir de  $|j, j\rangle$ . Esto es, tenemos que aplicar la fórmula anterior para  $J_-$  con  $k = j - m$ . Esto es:

$$J_-^{j-m}|j, j\rangle = \hbar^{j-m}\sqrt{\frac{2j!(j-m)!}{(j+m)!}}|j, m\rangle$$

o bien

$$|j, m\rangle = \frac{1}{\hbar^{j-m}}\sqrt{\frac{(j+m)!}{2j!(j-m)!}}J_-^{j-m}|j, j\rangle$$

### C. Matrices de $J_x$ y $J_y$ . Ejemplos: spin 1/2 y 1

Podemos obtener fácilmente las matrices de los operadores  $J_x$  y  $J_y$  en la base de autoestados de  $\vec{J}^2$  y  $J_z$ . Para eso tenemos que recordar que

$$J_x = \frac{1}{2}(J_+ + J_-), \quad J_y = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-).$$

En consecuencia, usando que

$$J_{\pm}|j, m\rangle = \hbar\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}|j, m \pm 1\rangle$$

deducimos que la matrices de  $J_x$  y  $J_y$  son tales que

$$\begin{aligned} \langle j, m'|J_x|j, m\rangle &= \frac{\hbar}{2}(\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\delta_{m',m+1} + \\ &\quad + \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\delta_{m',m-1}) \\ \langle j, m'|J_y|j, m\rangle &= \frac{\hbar}{2i}(\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\delta_{m',m+1} \\ &\quad - \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\delta_{m',m-1}) \end{aligned}$$

Podemos calcular explícitamente estas matrices para los casos  $j = 1/2$  y  $j = 1$ .

1.  $j = 1/2$ . En ese caso tenemos  $m = 1/2, -1/2$  (ordenamos los vectores de la base siguiendo el orden decreciente del número  $m$ ). En este caso, las ecuaciones anteriores implican que cuando  $m = 1/2$ , el único elemento de matriz no nulo de  $J_x$  y  $J_y$  es

$$\begin{aligned} \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}|J_x|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= \frac{1}{2}, \\ \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}|J_y|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= \frac{\hbar}{2i}. \end{aligned}$$

En consecuencia, las matrices de

$$\begin{aligned} J_x &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ J_y &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ J_z &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (103)$$

Evidentemente, en este caso obtenemos un viejo resultado (pero lo hacemos de manera constructiva):  $J_k = \frac{\hbar}{2}\sigma_k$ .

2.  $j = 1$ . En este caso  $m = -1, 0, 1$ . Cuando  $m = 1$  los únicos elementos de matriz no nulos son

$$\begin{aligned} \langle 1, 1|J_x|1, 0\rangle &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} = \langle 1, 0|J_x|1, 1\rangle, \\ \langle 1, 0|J_x|1, -1\rangle &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} = \langle 1, -1|J_x|1, 0\rangle \\ \langle 1, 1|J_y|1, 0\rangle &= -i\frac{\hbar}{\sqrt{2}} = -\langle 1, 0|J_y|1, 1\rangle, \\ \langle 1, 0|J_y|1, -1\rangle &= -i\frac{\hbar}{\sqrt{2}} = -\langle 1, -1|J_y|1, 0\rangle \end{aligned}$$

En consecuencia las matrices son

$$\begin{aligned} J_x &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ J_y &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \\ J_z &= \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (104)$$

#### D. Momento angular orbital

El momento angular orbital es

$$\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$$

Las componentes de este operador

$$L_x = yp_z - zp_y, \quad L_y = zp_x - xp_z, \quad L_z = xp_y - yp_x$$

son tales que se satisfacen las relaciones de conmutación  $[L_j, L_k] = i\epsilon_{jkl}L_m$ . Usando el hecho de que en la representación posición el operador momento es  $p_j = \frac{\hbar}{i}\partial_j$ , las componentes del momento angular son

$$\begin{aligned} L_x &= -i\hbar(y\partial_z - z\partial_y) \\ L_y &= -i\hbar(z\partial_x - x\partial_z) \\ L_z &= -i\hbar(x\partial_y - y\partial_x) \end{aligned}$$

Es útil escribir estos operadores en coordenadas esféricas. Las coordenadas podemos escribir las componentes del vector posición son

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi \\ y &= r \sin \theta \sin \phi \\ z &= r \cos \theta \end{aligned}$$

La inversa de estas ecuaciones puede escribirse como

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ \cos \theta &= \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \\ \tan \phi &= \frac{y}{x} \end{aligned}$$

Por lo tanto las derivadas cruzadas son

$$\begin{aligned} \partial_x r &= \frac{x}{r}, \quad \partial_y r = \frac{y}{r}, \quad \partial_z r = \frac{z}{r} \\ \partial_x \cos \theta &= -\frac{zx}{r^3}, \quad \partial_y \cos \theta = -\frac{zy}{r^3}, \quad \partial_z \cos \theta = \frac{1}{r} - \frac{z^2}{r^3}, \\ \partial_x \tan \phi &= -\frac{y}{x^2}, \quad \partial_y \tan \phi = \frac{1}{x} \end{aligned}$$

Por lo tanto las derivadas

$$\begin{aligned} \partial_x &= \sin \theta \cos \phi \partial_r - \frac{\sin \theta \cos \theta \cos \phi}{r} \partial_{\cos \theta} \\ &\quad - \frac{\sin \phi}{r \sin \theta \cos^2 \phi} \partial_{\tan \phi} \\ \partial_y &= \sin \theta \sin \phi \partial_r - \frac{\sin \theta \cos \theta \sin \phi}{r} \partial_{\cos \theta} \\ &\quad + \frac{1}{r \sin \theta \cos \phi} \partial_{\tan \phi} \\ \partial_z &= \cos \theta \partial_r + \frac{\sin^2 \theta}{r} \partial_{\cos \theta} \end{aligned}$$

O, lo que es lo mismo:

$$\begin{aligned} \partial_x &= \sin \theta \cos \phi \partial_r + \frac{\cos \theta \cos \phi}{r} \partial_\theta - \frac{\sin \phi}{r \sin \theta} \partial_\phi \\ \partial_y &= \sin \theta \sin \phi \partial_r + \frac{\cos \theta \sin \phi}{r} \partial_\theta + \frac{\cos \phi}{r \sin \theta} \partial_\phi \\ \partial_z &= \cos \theta \partial_r - \frac{\sin \theta}{r} \partial_\theta \end{aligned}$$

De aquí surge que las coordenadas del momento angular se pueden escribir como

$$\begin{aligned} L_z &= -i\hbar \partial_\phi \\ L_x &= i\hbar (\sin \phi \partial_\theta + \cot \theta \cos \phi \partial_\phi) \\ L_y &= -i\hbar (\cos \phi \partial_\theta - \cot \theta \sin \phi \partial_\phi) \\ L_\pm &= i\hbar e^{\pm i\phi} (\mp i \partial_\theta + \cot \theta \partial_\phi) \end{aligned}$$

A partir de estas expresiones podemos obtener la forma explícita de las funciones de onda de los autoestados de  $\vec{L}^2$  y  $L_z$ . Llamaremos a estas autofunciones  $\Psi_{nlm}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | n, l, m \rangle$ . En estas expresiones  $l$  y  $m$  son los autovalores de  $\vec{L}^2$  y  $L_z$  mientras que  $n$  es el autovalor de algún otro operador que commute con ellos y que forme un CCOC junto con ellos.

La condición de que el estado sea autoestado de  $L_z$  implica que

$$\begin{aligned} L_z \Psi_{n,l,m}(\vec{r}) &= -i\hbar \partial_\phi \Psi_{n,l,m}(\vec{r}) = m\hbar \Psi_{n,l,m}(\vec{r}) \\ \Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) &= e^{im\phi} f_{n,l,m}(r, \theta) \end{aligned}$$

Por otra parte, la función de onda del estado con máxima proyección del momento angular (cuando  $m = l$ ) se obtiene a partir de la ecuación  $L_+ \Psi_{n,l,l}(r, \theta, \phi) = 0$ :

$$\begin{aligned} L_+ \Psi_{n,l,l}(\vec{r}) &= -\hbar e^{i\phi} (-\partial_\theta + l \cot \theta) \Psi_{n,l,l}(\vec{r}) \\ \implies (-\partial_\theta + l \cot \theta) f_{n,l,m}(r, \theta) &= 0 \end{aligned}$$

Por lo tanto,

$$\partial_\theta f_{n,l,l}(r, \theta) = l \cot \theta f_{n,l,l}(r, \theta)$$

La solución de esta ecuación es inmediata:

$$f_{n,l,l}(r, \theta) = \sin^l \theta g_{n,l,l}(r)$$

De todo lo anterior deducimos que podemos escribir

$$\Psi_{n,l,l}(r, \theta, \phi) = e^{im\phi} \sin^l \theta g_{n,l,l}(r)$$

Donde, por ahora, la función  $g_{n,l,l}$  es elegida de modo tal que la función de onda completa está normalizada. Una vez obtenida la función de onda de este estado podemos encontrar las funciones de onda de todos aquellos con  $m \leq l$  usando que

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = \sqrt{\frac{(l+m)!}{2l!(l-m)!}} \left(\frac{L_-}{\hbar}\right)^{l-m} \Psi_{n,l,l}(r, \theta, \phi)$$

Podemos introducir la siguiente notación para reescribir esta expresión

$$\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = Y_l^m(\theta, \phi) R_{n,l}(r)$$

donde la parte angular y radial de la función de onda satisfacen las condiciones de normalización

$$\begin{aligned} \int \sin \theta d\theta d\phi Y_l^m(\theta, \phi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi) &= \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} \\ \int r^2 dr R_{n,l}(r) R_{n',l'}^*(r) &= \delta_{n,n'} \delta_{l,l'} \end{aligned}$$

Usando todas las expresiones anteriores es posible escribir una expresión simple para las funciones  $Y_l^m(\theta, \phi)$  que no son otra cosa mas que los armónicos esféricos. Esta es:

$$Y_l^l(\theta, \phi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)2!}{4\pi}} e^{il\phi} \sin^l \theta$$

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(l+m)!}{2l!(l-m)!}} \left(\frac{L_-}{\hbar}\right)^{l-m} Y_l^l(\theta, \phi)$$

o sea,

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(l+m)! (2l+1)}{(l-m)! 4\pi}} \times \frac{e^{im\phi}}{\sin^m \theta} \left(\frac{d}{d \cos \theta}\right)^{l-m} (\sin^{2l} \theta)$$

### E. Los armónicos esféricos y las rotaciones

Como vimos, los operadores que representan a las rotaciones en el espacio de estados conmutan con  $\vec{L}^2$  y, por lo tanto, dejan invariantes los subespacios asociados con los distintos valores del número cuántico  $l$ . Por consiguiente, si aplicamos una rotación a un estado de la forma  $|l, m\rangle$  siempre obtendremos una combinación lineal de estados con el mismo valor de  $l$ :

$$\mathcal{D}(R_{\vec{n}}(\phi))|l, m\rangle = \sum_{m'} D_{m, m'}^{(l)}(R_{\vec{n}}(\phi))|l, m'\rangle$$

En esta expresión, el símbolo  $\mathcal{D}^{(l)}$  denota a una matriz de  $(2l+1) \times (2l+1)$  que depende de  $l$  y de la rotación en cuestión. Estas matrices nos dicen, precisamente, como se mezclan los armónicos esféricos. Veamos cómo es esto: Consideremos un autoestado de la posición  $|\vec{r}\rangle$ , la parte angular de este vector podemos describirla con un versor  $\vec{e}_r$ , que apunta en la dirección del vector  $\vec{r}$ , caracterizado por las coordenadas esféricas  $\theta$  y  $\phi$ . Usando esta noción, podemos escribir que

$$Y_l^m(\theta, \phi) = Y_l^m(\vec{e}_r) = \langle \vec{e}_r | l, m \rangle$$

La función de onda del estado rotado  $\mathcal{D}(R_{\vec{n}})$  será

$$\langle \vec{e}_r | \mathcal{D}(R_{\vec{n}}) | l, m \rangle$$

Tendiendo en cuenta esta expresión, resulta que

$$\langle \vec{e}_r' | l, m \rangle = Y_l^m(\vec{e}_r) = \sum_{m'} \mathcal{D}^{(l)}(R_{\vec{n}})_{m, m'} Y_l^m(\vec{e}_r)$$

donde  $\vec{e}_r' = R_{\vec{n}}^T \vec{e}_n$  es el vector que se obtiene rotando  $\vec{e}_r$  con la rotación inversa  $R_{\vec{n}}^T$ .

Podemos aplicar esta expresión a un caso particular y descubrir que los elementos de la matriz de  $\mathcal{D}^{(l)}$  se relacionan también con armónicos esféricos. Consideremos el vector  $\vec{e}_r$  apuntando en la dirección del versor  $\vec{e}_z$  (o

sea, tomamos  $\theta = 0$ ). Si rotamos este versor hasta hacerlo apuntar en la dirección de  $\vec{e}_r$ , cuyas coordenadas esféricas son  $\theta$  y  $\phi$ , entonces podemos escribir que

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \sum_{m'} \mathcal{D}^{(l)}(R_{\vec{n}})_{m, m'} Y_l^m(0, 0),$$

donde la matriz  $R_{\vec{n}}^T$  es la que me lleva del eje  $\vec{e}_z$  a  $\vec{e}_r$ . Los armónicos esféricos son tales que se cumple que

$$Y_l^m(0, 0) = \delta_{m, 0} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}$$

y por lo tanto resulta que

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \mathcal{D}(R_{\vec{n}})_{m, 0}.$$

Cabe notar que la rotación  $R_{\vec{n}}$  es aquella cuyos ángulos de Euler son  $\theta$ ,  $\phi$  y  $\chi = 0$ .

### F. Representaciones irreducibles del grupo de las rotaciones en $\mathcal{H}_{\vec{r}}$

Consideremos el espacio de Hilbert de una partícula que se mueve en tres dimensiones. Este espacio, que llamamos  $\mathcal{H}_{\vec{r}}$  tiene una base formada por los autoestados del operador posición, a los que denominamos  $|\vec{r}\rangle$ , estos vectores forman una base. Por otra parte, en este mismo espacio podemos definir otra base, como mencionamos mas arriba, que esté asociada a un CCOC integrado por  $\vec{L}^2$ ,  $L_z$  y algún otro operador que conmute con ambos (y que complete la base). Por ejemplo, en el caso de una partícula en un potencial central, este CCOC podría ser completado por el Hamiltoniano  $H$ . En este caso, la base está formada por los estados de la forma  $|n, l, m\rangle$ . En este espacio de Hilbert actúan los representantes de las rotaciones, a los que llamamos  $\mathcal{H}(R_{\vec{n}}(\phi))$ . Los resultados que expusimos mas arriba implican que las matrices de rotación no mezclan estados con distinto momento angular principal  $l$ . Es decir, en cada subespacio generado por un dado valor de  $l$  actúa un representante de la rotación a la que llamamos  $\mathcal{D}^{(l)}$ . Estos subespacios son llamados "representaciones irreducibles" del grupo de las rotaciones. Si el subespacio de momento angular  $l$  se denomina  $\mathcal{H}_l$ , entonces el espacio de Hilbert total es la suma directa de todas las representaciones irreducibles. Es decir

$$\mathcal{H}_{\vec{r}} = \bigoplus_{l \geq 0} \mathcal{H}_l$$

### G. Momento angular orbital y energía cinética

Es fácil ver que la energía cinética de una partícula que se mueve en tres dimensiones puede escribirse de modo tal que la parte angular quede determinada completamente por el momento angular. Esto es equivalente a lo

que obtenemos cuando escribimos el Laplaciano en coordenadas esféricas. Para deducir la forma explícita de esta relación podemos calcular

$$\vec{L}^2 = (\vec{r} \wedge p) \cdot (\vec{r} \wedge p)$$

Este producto escalar puede reescribirse en términos de las componentes de los vectores posición y momento de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \vec{L}^2 &= \epsilon_{jkl}\epsilon_{jmn} r_k p_l r_m p_n \\ &= (\delta_{k,m}\delta_{l,n} - \delta_{k,n}\delta_{l,m}) r_k p_l r_m p_n \\ &= r_k p_l r_k p_l - r_k p_l r_l p_k \\ &= r_k r_k p_l p_l - r_k p_k p_l r_l - i\hbar r_k p_k - i\hbar r_k p_k \\ &= r_k r_k p_l p_l - r_k p_k r_l p_l - i\hbar r_k p_k - i\hbar r_k p_k + 3i\hbar r_k p_k \\ &= \vec{r}^2 \vec{p}^2 - (\vec{r} \cdot \vec{p})^2 + i\hbar \vec{r} \cdot \vec{p} \end{aligned}$$

En consecuencia, el operador  $\vec{p}^2$  resulta ser

$$\begin{aligned} \vec{p}^2 &= \frac{1}{r^2} (\vec{r} \cdot \vec{p})^2 - i\hbar \frac{1}{r^2} (\vec{r} \cdot \vec{p}) + \frac{1}{r^2} \vec{L}^2 \\ &= -\hbar^2 \left( \frac{1}{r} \partial_r (r \partial_r) + \frac{1}{r} \partial_r - \frac{1}{r^2} \vec{L}^2 \right) \\ &= -\hbar^2 \left( \partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r - \frac{1}{r^2} \vec{L}^2 \right) \end{aligned}$$

## H. Operadores vectoriales

El momento angular  $\vec{J}$  es el generador de las rotaciones, lo que quiere decir que  $\mathcal{D}(R_{\vec{n}}(\phi)) = \exp(-i\phi \vec{n} \cdot \vec{J}/\hbar)$ . Es fácil analizar cómo cambia el operador  $\vec{J}$  frente a una rotación. En efecto, calculemos

$$\vec{J}' = \mathcal{D}^\dagger(R_{\vec{n}}(\phi)) \vec{J} \mathcal{D}(R_{\vec{n}}(\phi))$$

Usando las relaciones de conmutación entre las componentes del momento angular, se puede demostrar de manera sencilla que

$$J'_k = (R_{\vec{n}}(\phi))_{kl} J_l$$

Esto quiere decir, que las rotaciones afectan al operador  $\vec{J}$  de la misma manera que lo hacen con un vector en el espacio  $\text{Re}^3$ . Las componentes del operador rotado son combinaciones lineales de las componentes del operador sin rotar, siendo los coeficientes de esa combinación lineal los elementos de la matriz de rotación (de  $3 \times 3$ ) correspondiente. Cualquier terna de operadores que cumpla con esta misma condición forman un "operador vectorial". Es decir,  $\vec{V} = V_x \vec{e}_x + V_y \vec{e}_y + V_z \vec{e}_z$  es un operador vectorial si y sólo si se cumple que

$$V'_k = \mathcal{D}^\dagger(R_{\vec{n}}(\phi)) V_k \mathcal{D}(R_{\vec{n}}(\phi)) = (R_{\vec{n}}(\phi))_{kl} V_l$$

La condición necesaria y suficiente para que un operador sea vectorial es que se cumplan las relaciones de conmutación

$$[J_j, V_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} V_l$$

Para demostrar esta identidad basta con considerar una rotación alrededor del eje  $\vec{e}_z$  en un ángulo infinitesimal. En ese caso tenemos que  $\mathcal{D}(R_z(\phi)) = I - i\phi J_z/\hbar$ . Entonces, la condición de que el operador sea vectorial es equivalente a

$$V'_j = V_j + i\phi(J_z V_j - V_j J_z)/\hbar = (R_z(\phi))_{jk} V_k$$

Usando la forma explícita de la matriz de rotación que es tal que (a primer orden en  $\phi$ ) sus únicos elementos no nulos son  $R_{kk} = 1$ ,  $R_{xy} = -\phi = -R_{yx}$ , obtenemos las condiciones:

$$i(J_z V_x - V_x J_z) = -\hbar V_y, \quad i(J_z V_y - V_y J_z) = \hbar V_x$$

de donde se desprende que debe valer  $[J_k, V_l] = i\hbar \epsilon_{klm} V_m$ .

## XV. CLASES 20: SUMA DE MOMENTOS ANGULARES

### A. Dos espines 1/2

Consideramos dos partículas de spin 1/2. El espacio de estados de cada una de ellas es  $\mathcal{H}_{1/2}$ , cuya dimensión es  $\dim(\mathcal{H}_{1/2}) = 2$ . El espacio del sistema compuesto es, tal como vimos anteriormente  $\mathcal{H}_{1,2} = \mathcal{H}_{1/2} \otimes \mathcal{H}_{1/2}$ . En este espacio compuesto, existe una base (que habitualmente en este contexto se denomina "base desacoplada") que está formada por los autoestados comunes de los operadores  $S_{1,z} = S_z \otimes I$  y  $S_{2,z} = I \otimes S_z$ . Denotaremos a estos vectores como  $\mathcal{B}_{1,2} = \{|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle, |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, |-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle, |-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle\}$  (en los capítulos anteriores denotábamos estos estados como  $\mathcal{B}_{1,2} = \{|0,0\rangle, |0,1\rangle, |1,0\rangle, |1,1\rangle\}$ ), pero en este capítulo usaremos la notación en la que cada estado está rotulado por el autovalor de  $S_{a,z}/\hbar$  (con  $a = 1, 2$ ).

En el espacio  $\mathcal{H}_{1,2}$  podemos definir otra base, que está asociada a otro CCOC. En efecto, podemos considerar el espín total  $\vec{S}_T = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ . Como sucede con cualquier operador que satisface el álgebra del momento angular, se cumple que  $[\vec{S}^2, S_k] = 0$  para todo  $k = x, y, z$ . Asimismo, se cumple que los operadores  $\vec{S}_{1,2}^2$  conmutan tanto con  $\vec{S}_T^2$  como con  $S_{T,z}$ . Esto es fácil de demostrar usando las identidades

$$\vec{S}_T^2 = \vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

La conmutación de  $\vec{S}_T^2$  con  $\vec{S}_{1,2}^2$  surge a partir de notar que estos operadores conmutan con  $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$  (ya que conmutan con todas las componentes de  $\vec{S}_1$  y de  $\vec{S}_2$ ). Por otra parte, el hecho de que  $S_{T,z}$  conmuta con todos los operadores en cuestión es también obvio.

En consecuencia, hay dos conjuntos completos de observables que conmutan:

$$\begin{aligned} CCOC_1 &= \{\vec{S}_1^2, \vec{S}_2^2, S_{1,z}, S_{2,z}\} \\ CCOC_2 &= \{\vec{S}_1^2, \vec{S}_2^2, \vec{S}_T^2, S_{T,z}\}. \end{aligned}$$

Obviamente, estos no son los únicos CCOC. Hemos visto en este mismo caso (dos espines 1/2) que un conjunto completo alternativo está provisto por los operadores

$$CCOC_3 = \{\vec{S}_1^2, \vec{S}_2^2, S_{1,z} \otimes S_{2,z}, S_{1,x} \otimes S_{2,x}\}$$

Cada CCOC tiene una base de autoestados asociados. El primero de ellos tiene a la base  $\mathcal{B}_{1,2}$ , que ya hemos definido mas arriba. El tercer conjunto tiene a la base de Bell como la base de autoestados comunes. Encontraremos la base de autoestados del segundo conjunto completo. Para esto usaremos un método que puede generalizarse para el caso de dos sistemas de espín arbitrario ( $j_1$  y  $j_2$ ).

En efecto, podemos notar que hay dos vectores de la base  $\mathcal{B}_{1,2}$  que también son autoestados del segundo CCOC. Estos son los vectores  $|\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$  y  $|-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ . Esto

puede demostrarse explícitamente:

$$\begin{aligned} \vec{S}_T^2 |+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle &= (\vec{S}_1^2 + \vec{S}_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2) |+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle \\ &= \hbar^2 \left( \frac{3}{4} + \frac{3}{4} + \right. \\ &\quad \left. + 2(S_{1,x}S_{2,x} + S_{1,y}S_{2,y} + S_{1,z}S_{2,z}) \right) |+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle \\ &= \hbar^2 \left( \frac{3}{2} + 2\frac{1}{4} \right) |+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle \\ &= 2\hbar^2 |+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle \end{aligned}$$

Para demostrar estas últimas identidades es conveniente notar que

$$S_{1,x}S_{2,x} + S_{1,y}S_{2,y} = \frac{1}{2}(S_{1,+}S_{2,-} + S_{1,-}S_{2,+})$$

En consecuencia, cuando este operador actúa sobre el estado  $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$  siempre lo anula (obviamente este argumento podrá aplicarse en general para estados con espín  $j_1$  y  $j_2$ ). Para el caso de espín 1/2 que estamos analizando también podríamos operar con los operadores  $S_{a,x}$  y  $S_{a,y}$  y usar que  $S_{1,x}S_{2,x}|+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle = |-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$  y  $S_{1,y}S_{2,y}|+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle = -|-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ , con lo cual la contribución de estos términos en la ecuación anterior se cancelan mutuamente.

Por otra parte, cualquier estado que es autoestado de  $S_{1,z}$  y de  $S_{2,z}$  será también autoestado de la suma de ambos. Es decir, podemos probar que el estado es autoestado de  $S_{T,z}$ :

$$S_{T,z} |+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle = \hbar |+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle.$$

De estas expresiones se deduce que el estado  $|+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$  es autoestado de  $\vec{S}_T^2$  con autovalor  $s = j(j+1)\hbar^2$  con  $j = 1$ . Este estado también es autoestado de  $S_{T,z}$  con autovalor  $m\hbar$  con  $m = 1$ . Lo mismo sucede con el estado  $|-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$ . Es decir, que hemos demostrado las siguientes identidades

$$\begin{aligned} |+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle &= |s = 1, m = 1\rangle = |1, 1\rangle \\ |-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle &= |s = 1, m = -1\rangle = |1, 1\rangle \end{aligned}$$

A partir de estos estados podemos construir todos los autoestados del  $CCOC_2$  de la siguiente manera. Si tomamos el estado con espín total  $s = 1$  y  $m = 1$ , podemos obtener otro estado con  $s = 1$  y  $m = 0$  aplicando el operador  $S_{T,-} = S_{1,-} + S_{2,-}$ . A partir de ahora denotaremos los estados asociados al  $CCOC_2$  con los autovalores  $s$  y  $m$ , es decir, serán de la forma  $|s, m\rangle$ . Entonces,

$$\begin{aligned} S_{T,-}|1, 1\rangle &= \hbar\sqrt{1(1+1) - 1(1-1)}|1, 0\rangle \\ (S_{1,-} + S_{2,-})|1, 1\rangle &= \hbar\sqrt{\frac{1}{2}(1 + \frac{1}{2}) - \frac{1}{2}(\frac{1}{2} - 1)} \\ &\quad \times (|+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + |-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle) \end{aligned}$$

En consecuencia, deducimos que

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + |-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle)$$

Entonces, hasta aquí hemos demostrado que es posible construir dos estados que son autoestados del  $CCOC_2$ . El tercero es el estado  $|-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = |s = 1, m = -1\rangle$ . Estos estados son autoestados del spín total con autovalor  $s = 1$  y autovalores de  $S_{T,z}$  que son  $m = -1, 0, +1$ . Es decir, a partir del estado de máxima proyección del momento angular total en la dirección  $\vec{e}_z$  hemos construido una familia de tres estados que podemos denominar

$$B_1 = \{|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle\}$$

Cómo construir el cuarto estado para completar la base de  $\mathcal{H}_{1,2}$ ? Este estado debe ser ortogonal a todos los anteriores. Por lo tanto puede construirse a partir de los mismos estados que intervienen en la combinación lineal que define al estado  $|1, 0\rangle$ . De ese modo, el estado resultante necesariamente será autovalor de  $S_{T,z}$  con autovalor  $m = 0$ . A partir de las expresiones anteriores es fácil ver que el estado ortogonal al  $|s = 1, m = 0\rangle$ , que denotamos como  $|1, 0\rangle_\perp$ , es

$$|1, 0\rangle_\perp = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle - |-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle)$$

Este estado es también autoestado de  $\vec{S}_T^2$ , lo cual puede verse calculando explícitamente. Su autovalor es  $s = 0$ . En general, es inmediato notar que el estado ortogonal a  $|1, 0\rangle$  es aniquilado por  $S_{T,+}$  y, por lo tanto, es el de máxima proyección de  $S_{T,z}$  (y por consiguiente debe tener  $s = 0$ ). En resumen, hemos construido una base del espacio  $\mathcal{H}_{1,2}$  que está formada por los cuatro siguientes vectores (la base se denomina "base acoplada"):

$$\begin{aligned} |s = 1, m = 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle - |-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle) \\ |s = 1, m = -1\rangle &= |+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle \\ |s = 1, m = 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + |-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle) \\ |s = 1, m = -1\rangle &= |-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \end{aligned}$$

Evidentemente esta base es la unión de los estados de la familia  $B_1$  con el estado de la familia (unipersonal!)  $B_0 = \{|0, 0\rangle\}$ . En rigor, hemos demostrado que el espacio producto  $\mathcal{H}_{1,2}$ , que es el producto tensorial de los espacios de cada espín, puede escribirse como suma directa de espacios correspondientes a sistemas de  $s = 1$  y  $s = 0$ . Es decir

$$\mathcal{H}_{1,2} = \mathcal{H}_{1/2} \otimes \mathcal{H}_{1/2} = \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_1$$

## B. Suma de momentos angulares

Vamos a generalizar aquí la construcción anterior y aprender a sumar dos momentos angulares cualquiera.

Para evitar confusiones introduciremos la siguiente notación: Los autoestados comunes de  $\vec{J}_1^2, \vec{J}_2^2, \vec{J}_T^2$  y  $J_{T,z}$  se deberían denotar como  $|j_1, j_2, j, m\rangle$ . Sin embargo, para no recargar la notación los denominaremos  $|j, m\rangle$ . Es decir

$$|j_1, j_2, j, m\rangle = |j, m\rangle$$

Además usaremos la notación

$$j_\pm = j_1 \pm j_2,$$

y supondremos que  $j_1 \geq j_2$ , lo cual podemos hacer sin pérdida de generalidad.

Como vimos mas arriba, hay dos estados de la base desacoplada que también están en la base acoplada. Es decir, hay dos estados que tienen una "doble personalidad". Estos son los estados: a)  $j = j_+ = j_1 + j_2$  y  $m = j_+ = j_1 + j_2$  y b)  $j = j_- = j_1 - j_2$  y  $m = -j_- = -(j_1 - j_2)$ . Estos dos estados son los que tienen máximo valor de  $j$  y máxima (o mínima) proyección de  $\vec{J}$  a lo largo de la dirección  $\vec{e}_z$ . Estos dos estados serán denotados como

$$\begin{aligned} |j_1, j_2, j_+, j_+\rangle &= |j_+, j_+\rangle \\ |j_1, j_2, j_+, -j_+\rangle &= |j_+, -j_+\rangle \end{aligned}$$

Tal como hicimos en el caso de dos partículas de espín 1/2 usaremos el estado  $|j_+, j_+\rangle$  como punto de partida para generar una familia de estados (en el caso anterior esa familia era  $B_1$ , ahora será  $B_{j_+}$ ; en el caso anterior la familia tenía  $g_1 = 3$  estados, ahora tendrá  $g_{j_+} = (2j_+ + 1)$  estados. Veamos cómo puede hacerse esto.

## C. Construcción de todos los estados $|j_+, m\rangle$ (la familia $B_{j_+}$ )

Consideremos el estado  $|j_+, j_+\rangle$ . Si a ese estado le aplicamos el operador  $J_{T,-}$  iremos bajando en la escalera de autovalores de  $J_{T,z}$  manteniendo el momento angular total  $j = j_+$ . En efecto, podemos asegurar que

$$|j, m\rangle = \sqrt{\frac{(j+m)!}{(j-m)!2^m}} \left(\frac{J_{T,-}}{\hbar}\right)^{j-m} |j_1, j_2, j_1, j_2\rangle$$

Podemos recordar que  $J_{T,-} = J_{1,-} + J_{2,-}$  y desarrollar el binomio que aparece en la expresión anterior. De ese

modo obtenemos

$$\begin{aligned}
|j_+, m\rangle &= \sqrt{\frac{(j_+ + m)!}{(j_+ - m)!2j_2!}} \frac{1}{\hbar^{j_+ - m}} \sum_{k=0}^{j_+ - m} \binom{j_+ - m}{k} \times \\
&\times J_{1,-}^{j_+ - m - k} J_{2,-}^k |j_1, j_2, j_1, j_2\rangle \\
&= \sqrt{\frac{(j_+ + m)!(j_+ - m)!}{2j_2!}} \sum_{k=0}^{j_+ - m} \frac{1}{k!(j_+ - m - k)!} \\
&\times \sqrt{\frac{2j_1!2j_2!(j_+ - m - k)!k!}{(2j_1 - j_+ + m + k)!(2j_2 - k)!}} \\
&\times |j_1, j_2, j_1 - j_+ + m + k, j_2 - k\rangle \\
&= \sqrt{\frac{(j_+ + m)!(j_+ - m)!2j_1!2j_2!}{2j_2!}} \sum_{k=0}^{j_+ - m} \\
&\times \frac{1}{\sqrt{(j_+ - m - k)!k!(j_1 - j_2 + m + k)!(2j_2 - k)!}} \\
&\times |j_1, j_2, j_1 - j_+ + m + k, j_2 - k\rangle
\end{aligned}$$

Entonces, concluimos que usando la expresión anterior podemos escribir todos los estados de la forma  $|j_+, m\rangle$  con todos los valores de  $m \in [-j_+, j_+]$ . Cabe notar que en cada paso, el número de términos en la combinación lineal es distinto. Para el estado  $|j_+, m\rangle$  intervienen todos los estados de la forma  $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$  con  $m_1 + m_2 = j_+$ . La fórmula final que usaremos es

$$\begin{aligned}
|j_+, m\rangle &= \sqrt{\frac{(j_+ + m)!(j_+ - m)!2j_1!2j_2!}{2j_2!}} \sum_{k=0}^{j_+ - m} \\
&\times \frac{|j_1, j_2, m + k - j_2, j_2 - k\rangle}{\sqrt{(j_+ - m - k)!k!(j_+ - m + k)!(2j_2 - k)!}}
\end{aligned}$$

Cabe notar que esta expresión involucra una combinación lineal que en apariencia involucra un número de estados que es igual a  $N = j_+ - m$ . Sin embargo, el número de estados está acotado por  $N = 2j_2 + 1$ . Esto se debe a que el operador  $J_{2,-}$  aparece elevado a la potencia  $k$  y  $J_{2,-}^k = 0$  cuando  $k \geq 2j_2$  (esto se refleja en la fórmula anterior en el hecho de que si reemplazamos algún valor de  $k > 2j_2$  en esa expresión obtendríamos estados no físicos). En consecuencia,  $N = 2j_2 + 1$  es el número máximo de términos que intervienen en la combinación lineal.

Podemos graficar este procedimiento diciendo que hemos construido una escalera de estados

$$|j_+, j_+\rangle \rightarrow |j_+, j_+ - 1\rangle \rightarrow \dots \rightarrow |j_+, -j_+ + 1\rangle \rightarrow |j_+, -j_+\rangle$$

Con este procedimiento hemos construido  $2j_+ + 1$  estados que forman una familia que denominamos

$$B_{j_+} = \{|j_+, m\rangle, -j_+ \leq m \leq j_+\}$$

Esta construcción es la generalización evidente de la que hicimos anteriormente para dos espines  $1/2$  y que nos llevo a construir la familia del triplete  $B_1$ . Ahora debemos continuar el procedimiento y construir otras familias, que tendrán valores diferentes del momento angular total  $j$ .

#### D. Construcción de todos los estados de la forma

$|j_+ - 1, m\rangle$  (la familia  $B_{j_+ - 1}$ )

Tomemos el segundo estado de la escalera que describimos mas arriba (o sea, el estado  $|j_+, j_+ - 1\rangle$  al cual llegamos luego de aplicar  $J_{T,-}$  una sola vez al estado  $|j_+, j_+\rangle$ ). Este estado es combinación lineal de dos estados (corresponde al caso donde el límite superior de la suma que aparece mas arriba es  $j_+ - m = j_+ - (j_+ - 1) = 1$ ). En este caso, es fácil escribir explícitamente el estado ya que involucra la suma de dos términos. En efecto, usando las expresiones anteriores obtenemos

$$|j_+, j_+ - 1\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_+}} |j_1, j_2, j_1 - 1, j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_+}} |j_1, j_2, j_1, j_2 - 1\rangle$$

Es fácil encontrar un estado que sea ortogonal a éste y que sea construido como combinación lineal de los mismos estados. El estado ortogonal a este podemos denotarlo como  $|j_+, j_+ - 1\rangle_\perp$  y resulta ser

$$|j_+, j_+ - 1\rangle_\perp = \sqrt{\frac{j_2}{j_+}} |j_1, j_2, j_1 - 1, j_2\rangle - \sqrt{\frac{j_1}{j_+}} |j_1, j_2, j_1, j_2 - 1\rangle$$

Tal como hicimos en el caso de dos espines, es posible demostrar que este estado no es otro mas que  $|j_+ - 1, j_+ - 1\rangle$ . El motivo es obvio: por un lado es trivial observar que este estado es autoestado de  $J_{T,z}$  ya que está construido como combinación lineal de estados tales que  $m_1 + m_2 = j_+ - 1$ . Por otra parte, para ver que ese estado también es autoestado de  $J_T^2$  alcanza con demostrar que es aniquilado por el operador de subida  $J_{T,+}$ . Este cálculo podría hacerse en forma explícita en este caso, pero hacemos notar aquí que existe un argumento general que lo demuestra, que expondremos mas abajo. En resumen, hemos demostrado que

$$\begin{aligned}
|j_+, j_+ - 1\rangle_\perp &= |j_+ - 1, j_+ - 1\rangle \\
|j_+ - 1, j_+ - 1\rangle &= \sqrt{\frac{j_2}{j_+}} |j_1, j_2, j_1 - 1, j_2\rangle \\
&\quad - \sqrt{\frac{j_1}{j_+}} |j_1, j_2, j_1, j_2 - 1\rangle
\end{aligned}$$

Este estado tiene  $j = j_+ - 1$  y  $m = j_+ - 1$  y puede usarse como semilla para generar una nueva familia de estados que obtenemos aplicando el operador de bajada  $J_{T,-}$ . De esa manera generamos una escalera de estados todos los cuales tienen el mismo valor de  $j = j_+ - 1$  (que es heredado del progenitor, ya que el operador de bajada conmuta con  $J_T^2$ ). Estos estados van recorriendo todos los valores posibles de  $m \in [j_+ - 1, j_+ - 1]$ . Es decir, generamos una segunda familia de estados a la que llamamos  $B_{j_+ - 1}$  y está formada por

$$B_{j_+ - 1} = \{|j_+ - 1, m\rangle, -(j_+ - 1) \leq m \leq (j_+ - 1)\}$$

Esta familia es análoga a la que denominamos  $B_0$  para el caso de dos espines  $1/2$  (en ese caso  $j_+ - 1 = 0$  y por lo

tanto la familia tiene un solo integrante. En este caso el número de integrantes será  $\dim(\mathcal{H}_{j_+-1}) = 2(j_+ - 1) + 1$ . Gráficamente podemos ver que hemos generado estados en una escalera descendente de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} |j_+ - 1, j_+ - 1\rangle &\rightarrow |j_+ - 1, j_+ - 2\rangle \rightarrow \dots \\ \dots &\rightarrow |j_+ - 1, -j_+ + 2\rangle \rightarrow |j_+ - 1, -j_+ + 1\rangle \end{aligned}$$

### E. Siguiendo en la escalera descendente de $j$ (generando todas las familias $B_j$ )

Siguiendo la estrategia que delineamos antes, podemos continuar generando estados con distintos valores de  $j$ . En efecto, hemos mostrado como generar las familias de estados

$$\begin{aligned} B_{j_+} &= \{|j_+, m\rangle, m \in [-j_+, j_+]\} \\ B_{j_+-1} &= \{|j_+ - 1, m\rangle, m \in [-j_+ - 1, j_+ - 1]\} \end{aligned}$$

Para generar la familia de estados  $B_{j_+-2}$  tomamos los estados de estas familias que tienen el autovalor  $m = j_+ - 2$ . Estos son  $|j_+, j_+ - 2\rangle$  y  $|j_+ - 2, j_+ - 2\rangle$  (el tercero y segundo estados de  $B_{j_+}$  y  $B_{j_+-1}$  respectivamente). Estos estados son combinación lineal de los mismos vectores (los tres vectores de la base desacoplada que cumplen, precisamente, que  $m_1 + m_2 = j_+ - 2$ ). Como estos tres vectores generan un subespacio real de dimensión 3, es posible encontrar un tercer vector que sea ortogonal a los dos anteriores. Por construcción, este estado será también autoestado de  $J_{T,z}$  del mismo autovalor que los otros dos. Por otra parte, es fácil ver que este estado será aniquilado por el operador  $J_{T,+}$ . Para demostrar esto podemos hacer la cuenta en forma explícita (lo cual es trabajoso) o bien podemos argumentar de la siguiente manera general: Al aplicar  $J_{T,+}$  al estado ortogonal a los dos anteriores, generaremos necesariamente una combinación lineal de los dos vectores que cumplen  $m_1 + m_2 = j_+ - 1$ . Este nuevo vector debería tener el mismo valor de  $j$  que su progenitor y por lo tanto debería ser un estado ortogonal a los dos anteriores. Sin embargo, como el espacio generado por los vectores que cumplen con la condición  $m_1 + m_2 = j_+ - 1$  tiene dimensión 2 no hay lugar para un tercer vector ortogonal, por lo cual este vector tiene que ser necesariamente nulo. En conclusión, demostramos rigurosamente que este tercer vector es autoestado de  $m$  con autovalor  $j_+ - 2$  y que es aniquilado por  $J_{T,+}$ . Por consiguiente, este estado debe ser autoestado de  $\tilde{J}_T^2$  con autovalor  $j = j_+ - 2$ . Aplicando el operador de bajada  $J_{T,-}$  a este estado construimos la tercera familia

$$B_{j_+-2} = \{|j_+ - 2, m\rangle, -(j_+ - 2) \leq m \leq (j_+ - 2)\}.$$

La pregunta que surge naturalmente es: Cuántas familias podremos generar de este modo? Esta pregunta es equivalente a otra: Cuáles son los valores posibles de  $j$  que podemos obtener a partir de  $j_1$  y  $j_2$ ? La respuesta es sencilla: Como dijimos antes, el número de vectores  $N$

que aparece en la combinación lineal que permite escribir el estado  $|j_+, m\rangle$  crece desde  $N = 1$  para  $m = j_+$  hasta llegar a  $N = 2j_2 + 1$  para  $m = j_-$  (o sea, el estado  $|j_+, j_-\rangle$  es siempre combinación lineal de  $2j_2 + 1$  estados).

A partir de ese estado, al aplicar el operador de bajada, el número de términos en la combinación lineal se mantiene constante (e igual a  $2j_2 + 1$ ) hasta llegar al estado con  $m = -j_-$  (o sea, al estado  $|j_+, -j_-\rangle$ ). A partir de este estado el número de términos en la combinación lineal se va reduciendo hasta llegar a ser nuevamente  $N = 1$  para el estado  $|j_+, -j_+\rangle$ .

Esta observación nos permite responder la pregunta sobre el número de familias que podremos generar. En efecto, nunca podremos generar más de  $N = 2j_2 + 1$  familias ya que ese es el número máximo de vectores ortogonales que podremos generar combinando aquellos que participan en la combinación lineal necesaria para escribir cualquier estado  $|j_+, m\rangle$ . Como cada familia está asociada a un valor distinto de  $j$  que decrece desde  $j = j_+$ , concluimos que los posibles valores de  $j$  son tales que  $j_- \leq j \leq j_+$  (ya que  $j_- = j_+ - 2j_2$ ). O sea, en general

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$$

Es fácil ver que si contamos el número de vectores en estas familias obtenemos la dimensión del espacio producto  $\mathcal{H}_{j_1} \otimes \mathcal{H}_{j_2}$  (o sea,  $(2j_1 + 1) \times (2j_2 + 1)$ ). Por cierto, esto surge de realizar explícitamente la sumatoria

$$\begin{aligned} \sum_{j=j_-}^{j_+} (2j + 1) &= \sum_{j'=0}^{2j_2} (2(j' + j_-) + 1) \\ &= (2j_2 + 1)2j_2 + (2j_- + 1)(2j_2 + 1) \\ &= (2j_1 + 1) \times (2j_2 + 1) \end{aligned}$$

Todo lo anterior implica que el espacio producto  $\mathcal{H}_{1,2} = \mathcal{H}_{j_1} \otimes \mathcal{H}_{j_2}$  puede obtenerse como suma directa de los espacios generados por las familias de estados  $b_j$ . Es decir

$$\mathcal{H}_{1,2} = \mathcal{H}_{j_1} \otimes \mathcal{H}_{j_2} = \bigoplus_{j=j_-}^{j_+} \mathcal{H}_j$$

### F. Método gráfico

En preparación (faltan todas las figuras...).

### G. Acoplamiento espín órbita.

Esta construcción puede hacerse de manera completa en un caso simple pero que es importante. Supongamos que sumamos el momento angular orbital y el espín. En ese caso tenemos  $j_1 = l$  y  $j_2 = 1/2$ . Entonces, solamente dos términos sobreviven en la suma que permite expresar cualquiera de los estados  $|j, m\rangle$ . En efecto, las ecuaciones

anteriores pueden reescribirse como

$$\begin{aligned}
|l + \frac{1}{2}, m\rangle &= \sqrt{\frac{(l + \frac{1}{2} + m)!(l + \frac{1}{2} - m)!}{2l + 1}} \\
&\times \left( \frac{1}{\sqrt{(l + \frac{1}{2} - m)!(l - \frac{1}{2} + m)!}} |l, \frac{1}{2}, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \right. \\
&\left. + \frac{1}{\sqrt{(l - \frac{1}{2} - m)!(l + \frac{1}{2} + m)!}} |l, \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \right)
\end{aligned}$$

o sea que finalmente los autoestados del momento angular total (suma del momento angular orbital y el espín) son

$$\begin{aligned}
|l + \frac{1}{2}, m\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2l + 1}} \left( \sqrt{\frac{(l + \frac{1}{2} + m)!}{(l - \frac{1}{2} + m)!}} |l, \frac{1}{2}, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \right. \\
&\left. + \sqrt{\frac{(l + \frac{1}{2} - m)!}{(l - \frac{1}{2} - m)!}} |l, \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \right)
\end{aligned}$$

lo que puede simplificarse aún mas para llegar a

$$\begin{aligned}
|l + \frac{1}{2}, m\rangle &= \sqrt{\frac{(l + \frac{1}{2} + m)!}{2l + 1}} |l, \frac{1}{2}, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\
&+ \sqrt{\frac{(l + \frac{1}{2} - m)!}{2l + 1}} |l, \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle
\end{aligned}$$

Los autoestados del momento angular total para una partícula de espín 1/2 tienen funciones de onda que son de la forma (un vector de dos componentes, una para cada proyección del espín:

$$\mathcal{Y}_{l+\frac{1}{2}}^m(\theta, \phi) = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+\frac{1}{2}+m}{2l+1}} Y_l^{(m-\frac{1}{2})}(\theta, \phi) \\ \sqrt{\frac{l+\frac{1}{2}-m}{2l+1}} Y_l^{(m+\frac{1}{2})}(\theta, \phi) \end{pmatrix} \quad (105)$$

donde  $m = -(l + \frac{1}{2}), \dots, l + \frac{1}{2}$ . Los estados con valor del momento angular total  $j = l - \frac{1}{2}$  se obtienen a partir de los anteriores encontrando el estado ortogonal. O sea:

$$\mathcal{Y}_{l-\frac{1}{2}}^m(\theta, \phi) = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+\frac{1}{2}-m}{2l+1}} Y_l^{(m-\frac{1}{2})}(\theta, \phi) \\ -\sqrt{\frac{l+\frac{1}{2}+m}{2l+1}} Y_l^{(m+\frac{1}{2})}(\theta, \phi) \end{pmatrix} \quad (106)$$

## H. Coeficientes de Glebsch Jordan

En las secciones anteriores hemos construido dos bases para el espacio  $\mathcal{H}_{1,2}$ : la base desacoplada y la acoplada (esta última es la unión de todos los vectores de las familias  $B_j$ ). Cada base está asociada a un CCOC. La base desacoplada está asociada al  $CCOC_1$  y la base acoplada al  $CCOC_2$ . Estas bases son

$$\begin{aligned}
B_D &= \{|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle, -j_1 \leq m_1 \leq j_1; -j_2 \leq m_2 \leq j_2\} \\
B_A &= \{|j, m\rangle, |j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2; -j \leq m \leq j\}
\end{aligned}$$

Estas son dos bases ortonormales y completas del mismo espacio de estados. Por lo tanto, el operador identidad puede descomponerse como suma de proyectores sobre los vectores de ambas bases. Es decir

$$\begin{aligned}
I &= \sum_{m_1} \sum_{m_2} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2|, \\
I &= \sum_j \sum_m |j, m\rangle \langle j, m|.
\end{aligned}$$

Asimismo, es evidente que es posible escribir a los vectores de una base como combinación lineal de los vectores de la otra. Por ejemplo, usando la descomposición de la identidad que figura mas arriba, tenemos

$$\begin{aligned}
|j, m\rangle &= \sum_{m_1, m_2} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m\rangle \\
|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle &= \sum_{j, m} |j, m\rangle \langle j, m | j_1, j_2, m_1, m_2\rangle
\end{aligned}$$

Los coeficientes que aparecen en estas combinaciones lineales se denominan coeficientes de Glebsch Gordan (son, simplemente, los productos escalares de los vectores de una base con los de la otra). Estos coeficientes tienen propiedades muy importantes (algunas de las cuales serán usadas mas adelante). En particular, podemos destacar una de ellas: todos estos coeficientes pueden ser elegidos como números reales. Esto surge a partir de lo que vimos mas arriba: Vimos que todos los estados de la forma  $|j, m\rangle$  pueden obtenerse como combinaciones lineales de los elementos de la base  $B_D$  usando solamente coeficientes reales, lo cual implica que los coeficientes de GG son reales. En consecuencia, los mismos coeficientes aparecen el cambio de base y en su inversa (la matriz de cambio de base es ortogonal). De su definición se sigue inmediatamente que

$$\begin{aligned}
\langle j, m | j_1, j_2, m_1, m_2\rangle &= \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j, m\rangle \\
\langle j, m | j_1, j_2, m_1, m_2\rangle &= 0 \text{ si } m_1 + m_2 \neq m \\
\langle j, m | j_1, j_2, m_1, m_2\rangle &= 0 \text{ si } j > (j_1 + j_2) \text{ o } j < |j_1 - j_2|
\end{aligned}$$

## I. Relaciones de recurrencia para los coeficientes de Glebsch Gordan

Entre la propiedades importantes de los coeficientes de Glebsch Gordan satisfacen relaciones de recurrencia que los relacionan entre si. Estas son consecuencias de lo que vimos mas arriba, ya que se obtienen a partir de notar que los distintos estados de la forma  $|j, m\rangle$  pueden vincularse entre si por los operadores de subida y bajada  $J_{T,\pm}$ . COMPLETAR.

## XVI. CLASES 21: OPERADORES TENSORIALES ESFÉRICOS

### ESTA SECCION ESTA EN PREPARACION

Una introduccion y motivación. Representaciones irreducibles.

#### A. Tensores cartesianos

Definición. Relaciones de conmutación con  $\vec{J}$ .

#### B. Tensores esféricos

Definición. Relaciones de conmutación con  $J_{\pm}$  y  $J_z$ . Motivación. Propiedades. Cómo obtenerlos a partir de vectores.

#### C. Coeficientes de Glebsch Gordan.

Relaciones de recurrencia. Importancia.

#### D. Teorema de Wigner Ekart

Enunciarlo. Bosquejo de demostración. Teorema de proyección.

#### E. Reglas de selección

Transiciones dipolares.

#### F. Paridad

Implicancias para las reglas de selección. Operadores pares e impares.

## XVII. CLASE 23: TEORÍA DE PERTURBACIONES. CASO DEGENERADO Y NO DEGENERADO.

Consideremos un problema con un Hamiltoniano

$$H(\epsilon) = H_0 + \epsilon V$$

donde  $\epsilon$  es un parámetro adimensional pequeño (en un sentido preciso que definiremos más adelante). Conocemos la solución del problema de autovalores del Hamiltoniano  $H_0$ , que resulta ser

$$H_0|\phi_{n,\mu}^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|\phi_{n,\mu}^{(0)}\rangle$$

donde el índice  $\mu = 1, \dots, g_n$  indica que los niveles de  $H_0$  son degenerados. La degeneración del nivel  $n$ , cuya energía es  $E_n^{(0)}$  es  $g_n$ . Para un problema de este tipo resulta conveniente definir los proyectores sobre el subespacio de autovalor  $E_n^{(0)}$  y su ortogonal. Estos son:

$$\Pi_{\parallel} = \sum_{\mu=1}^{g_n} |\phi_{n,\mu}^{(0)}\rangle\langle\phi_{n,\mu}^{(0)}|,$$

$$\Pi_{\perp} = I - \Pi_{\parallel} = \sum_{k \neq n} \sum_{\mu=1}^{g_k} |\phi_{k,\mu}^{(0)}\rangle\langle\phi_{k,\mu}^{(0)}|.$$

Nuestro objetivo es obtener una expresión aproximada para los autovectores y autovalores del problema completo, a partir de aquellos asociados al problema cuya solución conocemos. Es decir, buscamos autovalores y autovectores que satisfagan

$$H(\epsilon)|\chi_n(\epsilon)\rangle = E_n(\epsilon)|\chi_n(\epsilon)\rangle$$

Partiremos de la base de desarrollar todos los elementos de la expresión anterior en potencias de  $\epsilon$ . El único cuidado que debemos tener es tratar por separado las contribuciones de la parte paralela y perpendicular de los nuevos autoestados, a los que definimos como

$$\begin{aligned} |\chi_n(\epsilon)_{\parallel}\rangle &= \Pi_{\parallel}|\chi_n(\epsilon)\rangle \\ |\chi_n(\epsilon)_{\perp}\rangle &= \Pi_{\perp}|\chi_n(\epsilon)\rangle \end{aligned}$$

Cuando desarrollamos estos estados como potencias de  $\epsilon$  tenemos que tener en cuenta que solamente la parte paralela tiene una contribución de orden cero. Por otra parte, el cambio en la energía  $\Delta E_n$  se anula para  $\epsilon = 0$ . Es decir

$$\begin{aligned} |\chi_{n,\parallel}(\epsilon)\rangle &= \sum_{j \geq 0} |\chi_{n,\parallel}^{(j)}\rangle \epsilon^j \\ |\chi_{n,\perp}(\epsilon)\rangle &= \sum_{j \geq 1} |\chi_{n,\perp}^{(j)}\rangle \epsilon^j, \\ \Delta E_n(\epsilon) &= E_n(\epsilon) - E_n^{(0)} = \sum_{j \geq 1} E_n^{(j)} \epsilon^j. \end{aligned}$$

Antes de introducir estas expresiones en la ecuación de autovalores del problema completo, conviene reescribirla de la siguiente forma

$$(H_0 - E_n^{(0)})|\chi_n(\epsilon)\rangle = (\Delta E_n(\epsilon) - \epsilon V)|\chi_n(\epsilon)\rangle$$

Notamos que en esta expresión, en su miembro izquierdo, aparece un operador que denominamos  $h$ , donde

$$h = H_0 - E_n^{(0)}.$$

Este operador no es invertible ya que tiene  $g_n$  autovalores nulos. Sin embargo, este operador es invertible en el subespacio ortogonal, asociado al proyector  $\Pi_{\perp}$ . En efecto, en este subespacio podemos escribir la expresión

$$\begin{aligned} h &= (H_0 - E_n^{(0)}) = \sum_{k \neq n} \sum_{\mu=1}^{g_k} |\phi_{k,\mu}^{(0)}\rangle\langle\phi_{k,\mu}^{(0)}| (E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) \\ &= \sum_{k \neq n} \Pi_{k,\perp} (E_k^{(0)} - E_n^{(0)}), \end{aligned}$$

donde

$$\Pi_{k,\perp} = \sum_{\mu=1}^{g_k} |\phi_{k,\mu}^{(0)}\rangle\langle\phi_{k,\mu}^{(0)}|.$$

En consecuencia, la inversa de este operador, restringida al subespacio asociado al proyector  $\Pi_{\perp}$  es, simplemente

$$\begin{aligned} h^{-1} &= (H_0 - E_n^{(0)})_{\perp}^{-1} = \sum_{k \neq n} \sum_{\mu=1}^{g_k} \frac{|\phi_{k,\mu}^{(0)}\rangle\langle\phi_{k,\mu}^{(0)}|}{(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})} \\ &= \sum_{k \neq n} \frac{\Pi_{k,\perp}}{(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})} \end{aligned}$$

### A. Desarrollo perturbativo

Trabajemos entonces con la ecuación de autovalores

$$h|\chi_n(\epsilon)\rangle = (\Delta E_n(\epsilon) - \epsilon V)|\chi_n(\epsilon)\rangle.$$

En primer lugar es evidente que del lado izquierdo de esta expresión sólo contribuye la parte perpendicular de los autoestados: Escribiendo  $|\chi_n(\epsilon)\rangle = |\chi_{n,\parallel}(\epsilon)\rangle + |\chi_{n,\perp}(\epsilon)\rangle$ , y usando que  $h|\chi_{n,\parallel}(\epsilon)\rangle = 0$ , la ecuación anterior se reduce a

$$h|\chi_{n,\perp}(\epsilon)\rangle = (\Delta E_n(\epsilon) - \epsilon V)|\chi_n(\epsilon)\rangle.$$

Esta es una identidad vectorial y por lo tanto podemos escribirla como varias ecuaciones para sus distintas componentes. En particular, podemos proyectar esa ecuación en sus partes a lo largo de los subespacios asociados a los proyectores  $\Pi_{\parallel}$  y  $\Pi_{\perp}$ . Estas dos ecuaciones son

$$\begin{aligned} 0 &= \Delta E_n(\epsilon)|\chi_{n,\parallel}(\epsilon)\rangle - \epsilon \Pi_{\parallel} V |\chi_n(\epsilon)\rangle, \\ h|\chi_{n,\perp}(\epsilon)\rangle &= \Delta E_n(\epsilon)|\chi_{n,\perp}(\epsilon)\rangle - \epsilon \Pi_{\perp} V |\chi_n(\epsilon)\rangle. \end{aligned}$$

Vamos a escribir los primeros dos términos del desarrollo de la primera de estas ecuaciones (la que corresponde a la proyección a lo largo de  $\Pi_{\parallel}$ ). Haciendo esto, obtenemos

$$\begin{aligned} 0 &= E_n^{(1)}|\chi_{n,\parallel}^{(0)}\rangle - V_{\parallel}|\chi_{n,\parallel}^{(0)}\rangle, \\ 0 &= E_n^{(1)}|\chi_{n,\parallel}^{(1)}\rangle - V_{\parallel}|\chi_{n,\parallel}^{(1)}\rangle \\ &\quad + E_n^{(2)}|\chi_{n,\parallel}^{(0)}\rangle - \Pi_{\parallel} V |\chi_{n,\perp}^{(1)}\rangle \end{aligned}$$

donde hemos definido la matriz del potencial restringida al subespacio para lolo como

$$V_{\parallel} = \Pi_{\parallel} V \Pi_{\parallel}.$$

Cabe notar que a partir de estas dos ecuaciones ya tenemos información relevante. Podemos concluir cuanto valen las correcciones a la energía a primer orden en la perturbación. En efecto, la primera de estas dos ecuaciones puede re escribirse como una ecuación de autovalores de la forma

$$V_{\parallel} |\chi_{n,\parallel}^{(0)}\rangle = E_n^{(1)} |\chi_{n,\parallel}^{(0)}\rangle.$$

Esta expresión es fundamental. Nos dice que para encontrar las correcciones a primer orden en la energía debemos resolver el problema de autovalores para la matriz  $V_{\parallel}$ , que no es otra cosa que la matriz de la perturbación, restringida al subespacio asociado al autovalor  $E_n^{(0)}$  del Hamiltoniano  $H_0$  (o sea, al subespacio cuyo proyector es  $\Pi_{\parallel}$ ). Los autovalores de este problema son las correcciones a las energías mientras que los autovectores son los autoestados del problema sin perturbar  $|\chi_{n,\parallel}^{(0)}\rangle$ . Es importante notar que la perturbación selecciona algunos autoestados en el subespacio asociado a  $\Pi_{\parallel}$ . En efecto, los estados  $|\chi_{n,\parallel}^{(0)}\rangle$  son aquellos que se definen como el límite de los estados perturbados,  $|\chi_n(\epsilon)\rangle$ , cuando la perturbación tiende a cero (o sea, cuando  $\epsilon \rightarrow 0$ , la perturbación selecciona ciertos estados del subespacio  $\Pi_{\parallel}$ , que son los autovectores de  $V_{\parallel}$ , tal como se indica en la Figura).

La siguiente ecuación también nos brinda información muy útil ya que determina parcialmente el valor de la corrección en la energía a segundo orden. En esta ecuación aparecen los estados  $|\chi_{n,\parallel}^{(1)}\rangle$  en los primeros dos términos. Pero estos términos no contribuyen a la corrección a segundo orden en la energía. Podemos demostrar esto de la siguiente manera. Podemos proyectar esta ecuación sobre los estados a primer orden que encontramos en el paso anterior. En efecto, si aplicamos el bra  $\langle \chi_n^{(0)} |$  a esa ecuación y utilizamos la ecuación de autovalores para los estados a orden cero, vemos que los dos primeros términos se cancelan mutuamente. En consecuencia, la segunda ecuación se reduce a

$$0 = E_n^{(2)} - \langle \chi_{n,\parallel}^{(0)} | \Pi_{\parallel} V | \chi_{n,\perp}^{(1)} \rangle,$$

De donde se deduce cuanto vale la corrección a segundo orden en la energía. En efecto, usando esta identidad, podemos deducir que

$$E_n^{(2)} = \langle \chi_{n,\parallel}^{(0)} | V | \chi_{n,\perp}^{(1)} \rangle,$$

En consecuencia, para conocer la corrección a segundo orden en la energía es necesario conocer los estados  $|\chi_{n,\parallel}^{(0)}\rangle$  (que son soluciones del problema de autovalores de  $V_{\parallel}$ ), pero también es necesario conocer las correcciones a

primer) orden en la parte perpendicular de los autoestados:  $|\chi_{n,\perp}^{(1)}\rangle$ . Estas correcciones se obtienen a partir de la proyección de la ecuación de partida en la dirección de  $\Pi_{\perp}$ . En efecto, podemos reescribir esta ecuación (antes del desarrollo en serie de Taylor en potencias de  $\epsilon$ ) como

$$h |\chi_{n,\perp}(\epsilon)\rangle = \Delta E_n(\epsilon) |\chi_{n,\perp}(\epsilon)\rangle - \epsilon \Pi_{\perp} V |\chi_n(\epsilon)\rangle.$$

De aquí deducimos inmediatamente (aplicando el operador inverso  $h^{-1}$ , que está bien definido sobre el subespacio asociado a  $\Pi_{\perp}$ ) la siguiente identidad:

$$|\chi_{n,\perp}(\epsilon)\rangle = \Delta E_n(\epsilon) h^{-1} |\chi_{n,\perp}(\epsilon)\rangle - \epsilon h^{-1} \Pi_{\perp} V |\chi_n(\epsilon)\rangle.$$

Desarrollando esta ecuación al orden mas bajo en potencias de  $\epsilon$  (que es el primero) vemos que las únicas contribuciones resultan ser)

$$|\chi_{n,\perp}^{(1)}\rangle = -h^{-1} \Pi_{\perp} V |\chi_{n,\parallel}^{(0)}\rangle.$$

Esta es una expresión sencilla que nos dice cómo es la parte perpendicular de los autoestados a primer orden en  $\epsilon$ . Usando esta expresión, podemos deducir ahora cual es el cambio en la energía de los autoestados a segundo orden en  $\epsilon$ . Esta es:

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= -\langle \chi_{n,\parallel}^{(0)} | V h^{-1} V | \chi_{n,\parallel}^{(0)} \rangle. \\ E_n^{(2)} &= -\sum_{k \neq n} \frac{\langle \chi_{n,\parallel}^{(0)} | V \Pi_{k,\perp} V | \chi_{n,\parallel}^{(0)} \rangle}{(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})} \\ E_n^{(2)} &= -\sum_{k \neq n} \sum_{\mu=1}^{g_k} \frac{|\langle \chi_{n,\parallel}^{(0)} | V | \chi_{k,\mu}^{(0)} \rangle|^2}{(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})} \end{aligned}$$

## B. Resumen de resultados

Obtuvimos un desarrollo en potencias del parámetro perturbativo  $\epsilon$  de los autovectores y autovalores del problema completo. Los autovectores, tal como los calculamos, resultan no estar normalizados pero dicha normalización puede realizarse al completar el cálculo. A segundo orden en la energía y primer orden en los estados los resultados son

$$\begin{aligned} V_{\parallel} |\chi_{n,\parallel}^{(0)}\rangle &= E_n^{(1)} |\chi_{n,\parallel}^{(0)}\rangle \\ |\chi_{n,\perp}^{(1)}\rangle &= -h^{-1} V |\chi_{n,\parallel}^{(0)}\rangle \\ &= -\sum_{k \neq n} \sum_{\mu=1}^{g_k} \frac{\langle \chi_{k,\mu}^{(0)} | V | \chi_{n,\parallel}^{(0)} \rangle}{(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})} |\chi_{k,\mu}^{(0)}\rangle \\ E_n^{(2)} &= \langle \chi_{n,\parallel}^{(0)} | V | \chi_{n,\perp}^{(1)} \rangle \\ &= -\sum_{k \neq n} \sum_{\mu=1}^{g_k} \frac{|\langle \chi_{n,\parallel}^{(0)} | V | \chi_{k,\mu}^{(0)} \rangle|^2}{(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})} \end{aligned}$$

### C. El caso no degenerado

Para el caso no degenerado, las ecuaciones anteriores son bastante más sencillas. En efecto, cuando  $g_n = 1$  no hay que resolver ningún problema de autovalores para obtener autoestados a orden cero. En ese caso, cuando hay un único autovector con autovalor  $E_n^{(0)}$ , las correcciones de primero y segundo orden en la energía y los estados son simplemente

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \langle \phi_n^{(0)} | V | \phi_n^{(0)} \rangle \\ E_n^{(2)} &= - \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \phi_n^{(0)} | V | \phi_k^{(0)} \rangle|^2}{(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})} \\ |\chi_n^{(1)}\rangle &= - \sum_{k \neq n} \frac{\langle \phi_k^{(0)} | V | \phi_n^{(0)} \rangle}{(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})} |\phi_k^{(0)}\rangle \end{aligned}$$

De las expresiones anteriores surge un comentario general: Para el estado fundamental, teniendo en cuenta que en ese caso se satisface que  $(E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) > 0$  entonces la corrección en la energía a segundo orden es siempre negativa. O sea, siempre se satisface que  $E_n^{(2)} \leq 0$ .

### D. Normalización

En el caso no degenerado el cálculo del factor de normalización resulta particularmente sencillo. En efecto, consideremos que el estado  $|\chi_n(\epsilon)\rangle$  está normalizado, es decir que

$$\langle \chi_n(\epsilon) | \chi_n(\epsilon) \rangle = 1$$

Por otra parte, si cada una de las correcciones también está normalizada (es decir, si  $\langle \chi_n^{(k)} | \chi_n^{(k)} \rangle = 1$ ) podemos escribir que

$$|\chi_n(\epsilon)\rangle = Z^{1/2}(\epsilon) \sum_{k \geq 0} |\chi_n^{(k)}\rangle \epsilon^k$$

Por lo tanto,

$$Z^{-1}(\epsilon) = \left\| \sum_{k \geq 0} \epsilon^k |\chi_n^{(k)}\rangle \right\|^2$$

Ahora bien, la contribución de orden cero  $|\chi_n^{(0)}\rangle$  es ortogonal a todas las otras. Por lo tanto, al orden más bajo en  $\epsilon$  resulta que

$$\begin{aligned} Z^{-1}(\epsilon) &= 1 + \epsilon^2 \langle \chi_n^{(1)} | \chi_n^{(1)} \rangle + \dots \\ &= 1 + \epsilon^2 \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \chi_n^{(0)} | V | \chi_k^{(0)} \rangle|^2}{(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})^2} + \dots, \end{aligned}$$

de donde se deduce que

$$Z(\epsilon) = 1 - \epsilon^2 \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \chi_n^{(0)} | V | \chi_k^{(0)} \rangle|^2}{(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})^2} + \dots,$$

Teniendo en cuenta que a segundo orden en  $\epsilon$  ya habíamos deducido que

$$E_n(\epsilon) = E_n^{(0)} - \epsilon \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \chi_n^{(0)} | V | \chi_k^{(0)} \rangle|^2}{(E_k^{(0)} - E_n^{(0)})} + \dots$$

podemos deducir fácilmente que vale la ecuación

$$Z(\epsilon) = \frac{\partial E_n(\epsilon)}{\partial E_n^{(0)}}$$

### E. Ejemplo: El efecto Stark de primero y segundo orden.

Consideremos un átomo de hidrógeno en un campo eléctrico uniforme, que apunta en la dirección del vector  $\vec{e}_z$ . Es decir  $\vec{E} = \tilde{E}_0 \vec{e}_z$ . La interacción entre el electrón y el campo externo se tiene en cuenta mediante un término en el Hamiltoniano que es de la forma:

$$V = -e \tilde{E}_0 z$$

donde  $z$  es la coordenada del electrón a lo largo de la dirección del campo. El problema de un átomo en un campo de estas características no se puede resolver exactamente. Sin embargo, podemos aplicar la teoría de perturbaciones que desarrollamos hasta aquí. Veamos en primer lugar cómo se afecta la energía del estado fundamental a primer orden en la perturbación. Usando la notación que aplicamos hasta ahora, el estado fundamental es

$$|\chi_n^{(0)}\rangle = |n=1, l=0, m=0\rangle = |1, 0, 0\rangle$$

La energía de este estado, tomando el hamiltoniano sin perturbar como  $H_0 = p^2/2m - e^2/r$ , resulta ser  $E_0^{(0)} = -E_0/2 = -e^4 m/2\hbar^2 = -13.6 eV$ . Por lo tanto, el cambio en la energía a primer orden en la perturbación (lo cual tiene sentido para valores suficientemente pequeños del campo eléctrico) resulta ser

$$E_0^{(1)} = -e \tilde{E}_0 \langle 1, 0, 0 | z | 1, 0, 0 \rangle = 0$$

La última expresión se anula debido a simples argumentos de simetría: en efecto, el estado fundamental es par (invariante frente a reflexiones) mientras que el operador  $z$  es impar). Entonces, a primer orden en teoría de perturbaciones, la energía del estado fundamental no se modifica. Veamos a segundo orden. En este caso, podemos aplicar la ecuación

$$E_n^{(2)} = -e^2 \tilde{E}_0^2 \sum_{k \neq (1,0,0)} \frac{\langle 1, 0, 0 | z | \chi_k^{(0)} \rangle^2}{(E_k^{(0)} - E_{1,0,0})}$$

Podemos acotar esta expresión de manera simple: en efecto, podemos usar que  $(E_k^{(0)} - E_{1,0,0}) \geq \Delta E =$

$(E_{2,l,m} - E_{1,0,0}) = 3E_0/8 \approx 5.1eV$ . Entonces,

$$\begin{aligned}
 |E_{1,0,0}^{(2)}| &\leq \frac{e^2 \tilde{E}_0^2}{\Delta E} \sum_{k \neq (1,0,0)} |\langle 1, 0, 0 | z | k \rangle|^2 \\
 &= \frac{e^2 \tilde{E}_0^2}{\Delta E} \sum_k |\langle 1, 0, 0 | z | k \rangle|^2 \\
 &= \frac{e^2 \tilde{E}_0^2}{\Delta E} |\langle 1, 0, 0 | z^2 | 1, 0, 0 \rangle|^2 \\
 &= \frac{e^2 \tilde{E}_0^2}{\Delta E} a_0^2
 \end{aligned}$$

donde  $\langle 1, 0, 0 | z^2 | 1, 0, 0 \rangle = a_0^2$ , siendo  $a_0$  el radio de Bohr, cuyo valor vimos anteriormente y resulta ser  $a_0 = \hbar^2/m_e e^2 = 0.5A$ . En resumen, el corrimiento del estado fundamental del átomo de hidrógeno debido al campo eléctrico es

$$\Delta E_{1,0,0} = -\tilde{E}_0^2 e^2 a_0^2 \frac{8a_0}{3e^2} = -\frac{8}{3} \tilde{E}_0^2 a_0^3$$

Se define la polarizabilidad  $\tilde{\alpha}$  del átomo en el nivel  $|1, 0, 0\rangle$  como el factor que satisface que  $\Delta E_{1,0,0} = -\frac{1}{2} \tilde{\alpha} \tilde{E}_0^2$ . En consecuencia nuestro cálculo establece que

$$\tilde{\alpha} = \frac{16}{3} a_0^3$$

Notablemente, el valor observado para la polarizabilidad (deducido a partir del corrimiento Stark) es muy cercano a esta predicción aproximada (el valor medido tiene un factor 4.5 en lugar de  $16/3 \approx 5.1$ ).

### XVIII. CLASE 24: ESTRUCTURA FINA

Como vimos, los niveles de energía del átomo de hidrógeno están etiquetados por un único número cuántico (el número cuántico principal  $n$ ) y están determinados por la famosa fórmula de Bohr

$$E_n = -\frac{E_0}{2n^2}, \quad E_0 = \frac{me^4}{\hbar^2} = \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 mc^2$$

El valor de la constante  $E_0$  (la constante de Rydberg) es de  $E_0/2 = 13.6eV$ . Por su parte, la constante adimensional que aparece naturalmente en esta fórmula es

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

Como vemos, esta constante fija una escala que tiene que ver con el orden de magnitud de las energías involucradas en la física atómica ordinaria con aquellas involucradas en procesos relativistas. En efecto, la energía en reposo del electrón es  $mc^2 \approx 0.511MeV$  y  $E_0 \approx 0.511MeV/2(137)^2 = 13.6eV$ .

La fórmula de Bohr describe apropiadamente el espectro de átomos hidrogenoides con las distintas series espectroscópicas (Balmer, etc). Históricamente, poco después del descubrimiento de esas series espectroscópicas se encontró que las líneas principales tienen una estructura fina: casi todas las líneas están desdobladas. Esos desdoblamientos son muy pequeños comparados con las separaciones entre las líneas principales (la línea principal de la serie de Lyman tiene una energía  $\Delta E = \frac{E_0}{2}(1 - \frac{1}{4}) = 13.6 \times 3/4 eV$ ). Estas correcciones son de origen relativista y tienen un orden de magnitud  $\alpha^2$  veces menor que esta energía. Veremos ahora su origen.

Las principales causas de la estructura fina son tres. En lo que sigue las describiremos en detalle, y más adelante mostraremos como calcular, aplicando la teoría de perturbaciones que desarrollamos antes para calcular los desdoblamientos de niveles que producen.

En la figura vemos el espectro del hidrógeno con sus distintas series. La de Lyman es la que corresponde al decaimiento al nivel  $n = 1$  desde todos los otros niveles. La línea Lyman- $\alpha$  es la de mayor longitud de onda de esa serie y tiene  $\lambda_\alpha = 121nm$ . Esta línea corresponde a una transición con una energía  $\Delta E_2 = E_2 - E_1 = (1 - 1/4)13/6eV = 10.2eV$ . La última línea de la serie es la que corresponde a la transición de  $13.6eV$  y tiene una longitud de onda de  $95nm$ . La estructura fina produce un desdoblamiento de la línea Lyman- $\alpha$  en dos líneas cuya diferencia de longitud de onda es del orden de  $10^{-5}$  veces más pequeño que  $\lambda_\alpha$ .

#### A. Corrección relativista en la energía cinética.

El primer término en la estructura fina tiene que ver con el hecho de que la energía cinética del electrón tiene una corrección debido a los efectos relativistas. De

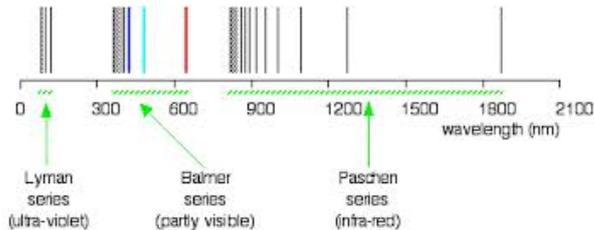


FIG. 23 Espectro del átomo de hidrógeno, con las distintas series espectrales (Lyman, Balmer, etc).

acuerdo a la teoría de la relatividad, la energía cinética de una partícula es

$$T = c(m^2c^2 + p^2)^{1/2} \\ \approx mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2} + \dots$$

Entonces, la primera corrección a la energía de Bohr es el término  $H_{TE} = -\frac{p^4}{8m^3c^2}$ . Es fácil calcular el orden de magnitud esperado para esta corrección, comparada con la energía típica de los niveles atómicos principales. En efecto, si calculamos el cociente  $H_{TE}/E_0$  podemos estimar que

$$\left| \frac{H_{TE}}{E_0} \right| \approx \frac{p^4}{4m^3c^2} \frac{2m}{p^2} \approx \frac{p^2}{4m^2c^2} \approx \frac{1}{4} \frac{\lambda_C^2}{a_0^2} \approx \alpha^2.$$

En consecuencia, la corrección es de una parte en diez mil comparada con la escala de  $13.6eV$  (es decir, es de alrededor de  $10^{-5}eV$ , que corresponde a una frecuencia típica de decenas de GHz, microondas).

#### B. Tamaño finito del electrón: término de Darwin.

Teniendo en cuenta los efectos relativistas, el electrón no puede considerarse una partícula puntual. En efecto, es imposible localizar una partícula de masa  $m$  por debajo de una longitud del orden de la longitud de onda de Compton. El argumento heurístico en el que se fundamenta esta afirmación es que para localizar una partícula por debajo de una longitud  $\lambda_C$  se necesita utilizar fotones que tienen una energía  $\hbar\omega$  que es mayor que la necesaria para crear un par de partículas (en consecuencia, en ese límite no tiene sentido la teoría para una única partícula). Esta longitud es  $\lambda_C = \frac{\hbar}{mc}$ . Teniendo en cuenta esto, podemos suponer que el electrón es una nube de carga localizada alrededor de un cierto punto  $\vec{r}$ , que interactúa con el potencial electrostático producido por el átomo. Es decir:

$$V_{int} = \int_V d^3\vec{r}' \rho(\vec{r}') \Phi(\vec{r} + \vec{r}')$$

Si desarrollamos el potencial en función de  $\vec{r}'$ , cuyas coordenadas son  $\chi_j$ , podemos escribir

$$\Phi(\vec{r} + \vec{r}') = \Phi(\vec{r}) + \chi_j \partial_j \Phi(\vec{r}) + \frac{1}{2} \chi_j \chi_k \partial_j \partial_k \Phi(\vec{r})$$

Reemplazando esta expresión en la energía de interacción, obtenemos la siguiente

$$V_{int} = q\Phi(\vec{r}) + \frac{1}{6}\nabla^2\Phi(\vec{r}) \int d^3\vec{r}' \rho(\vec{r}') r'^2$$

Donde  $q = \int_V d^3\vec{r}' \rho(\vec{r}')$  Teniendo en cuenta que el tamaño típico del electrón es  $\lambda_C$  es evidente que la corrección por el tamaño finito del mismo será del siguiente tipo:  $\Delta V = q\lambda_C^2 \nabla^2\Phi$ . Los factores numéricos exactos que acompañan a esta expresión solamente pueden ser deducidos a partir de la ecuación de Dirac. Este término puede reescribirse utilizando el hecho de que

$$\nabla^2\Phi(\vec{r}) = 4\pi e^2 \delta(\vec{r})$$

En consecuencia, el resultado final es

$$V_{int} = \frac{e}{r} + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} 4\pi e^2 \delta(\vec{r})$$

Es fácil estimar el orden de magnitud de este término, comparado con la energía  $H_0$ . En efecto, el término correctivo que describimos, y que lleva el nombre de término de Darwin, es

$$H_{Darwin} = \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} 4\pi e^2 \delta(\vec{r})$$

En consecuencia, los elementos de matriz de este término son no nulos solamente para estados en los cuales la función de onda en el origen es no nula. Como recordamos, estas funciones son tales que  $\Psi_{n,l,m} \propto r^l L_{n-l-1}(r)$  donde  $L_{n-l-1}$  es un polinomio de grado  $n-l-1$ . En consecuencia, este término solamente afecta estados con  $l=0$  (los llamados estados  $s$ ). El cociente entre el valor típico del término de Darwin comparado con el valor típico de la energía del estado fundamental es

$$\frac{H_{Darwin}}{H_0} \approx \frac{\lambda_C^2}{8E_0} |\Psi_n(0)|^2 e^2$$

Teniendo en cuenta que  $|\Psi_n(0)|^2 a_0^3 \approx 1$  y que  $E_0 = e^2/2a_0$ , tenemos que entonces

$$\frac{H_{Darwin}}{H_0} \approx \frac{\lambda_C^2}{a_0^2} \approx \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 = \alpha^2$$

### C. Acoplamiento espín órbita

Existe un tercer efecto relativista que aparece naturalmente en el átomo de Hidrógeno. Como dijimos, el electrón tiene espín, y por lo tanto tiene un momento magnético asociado que es

$$\vec{\mu}_e = -\frac{ge}{2mc} \vec{S}$$

donde  $g$  es el factor giromagnético del electrón (cuyo valor, como veremos, es cercano a  $g=2$ ). El electrón

se mueve en las cercanías del núcleo, que genera un potencial electrostático, que da lugar a un campo eléctrico que puede escribirse como  $\vec{E} = \frac{e}{r^2} \vec{e}_r$ . Podemos razonar apelando a un simple argumento clásico: el electrón se mueve respecto del núcleo con una velocidad  $\vec{v}$ . Si en el sistema de referencia del núcleo el campo eléctrico es  $\vec{E}$  (y el magnético es nulo), en el sistema de referencia del electrón se observa un campo magnético que será

$$\vec{B} = -\frac{1}{c} \vec{v} \wedge \vec{E}$$

En consecuencia, como el electrón viaja en un campo magnético, hay una interacción entre su momento magnético y dicho campo. Esta interacción está descrita por un Hamiltoniano de la forma

$$\begin{aligned} H_{SO} &= -\vec{\mu}_e \cdot \vec{B} \\ &= -\frac{ge}{2mc^2} \vec{S} \cdot (\vec{v} \wedge \vec{E}) \\ &= -\frac{ge^2}{2mrv^3c^2} \vec{S} \cdot (\vec{v} \wedge \vec{r}) \\ &= \frac{ge^2}{2m^2r^3c^2} \vec{L} \cdot \vec{S} \end{aligned}$$

Este argumento simple, conduce al resultado correcto a menos de un factor 2, que aparece cuando uno hace el pasaje en forma correcta al sistema de referencia del electrón (que no se mueve en forma rectilínea ni uniforme). Entonces, el Hamiltoniano correcto que describe el acoplamiento "espín-órbita" es el siguiente:

$$H_{SO} = \frac{1}{2} \frac{ge^2}{2m^2r^3c^2} \vec{L} \cdot \vec{S}$$

La estimación del orden de magnitud de este término es también simple. Si lo comparamos contra la energía del estado fundamental de  $H_0$  tenemos

$$\left| \frac{H_{SO}}{H_0} \right| \approx \frac{ge^2}{2m^2a_0^3c^2} \hbar^2 \frac{a_0}{e} \approx \frac{\lambda_C^2}{a_0^2} \approx \alpha^2$$

En consecuencia, este término también tiene una magnitud  $\alpha^2$  veces menor que las energías típicas de  $H_0$ .

Resumiendo, los tres términos que contribuyen a la estructura fina son

$$\begin{aligned} H_{EF} &= H_{TE} + H_{Darwin} + H_{SO} \\ &= -\frac{p^4}{8m^3c^2} + \frac{e^2\hbar^2}{8m^2c^2} 4\pi\delta(\vec{r}) + \frac{1}{2} \frac{ge^2}{2m^2r^3c^2} \vec{L} \cdot \vec{S} \end{aligned}$$

### D. Estructura fina del nivel $n=2$ del átomo de Hidrógeno

Veamos como debemos aplicar la teoría de perturbaciones que aprendimos mas arriba para calcular el efecto de las correcciones relativistas sobre la estructura del nivel  $n=2$  del átomo de Hidrógeno. La teoría de Bohr nos dice que este nivel tiene una energía  $E_2 = -E_0/8 = -3.4eV$ . Asimismo, la degeneración de

este estado es  $g_2 = 2 \times 4$ , donde el primer factor 2 se origina en los grados de libertad de espín y el factor  $n^2 = 4$  proviene de los estados orbitales. En efecto, el estado  $n = 2$  tiene subniveles degenerados que, en notación espectroscópica, se denominan  $2s = (n = 1, l = 0, m = 0)$  y  $2p = (n = 1, l = 1, m = -1, 0, 1)$ . Los subespacios  $2s$  y  $2p$  tienen dimensión  $\dim(2s) = 2$  y  $\dim(2p) = 6$  debido a la existencia del espín del electrón.

Teniendo en cuenta lo aprendido mas arriba, para calcular el efecto de la perturbación  $H_{EF}$  sobre el nivel  $n = 2$  tenemos que escribir la matriz de este operador restringida a dicho subespacio. Haremos eso en lo que sigue, atacando cada uno de los términos por separado.

1. *Corrección relativista en la energía cinética*  
Recordemos que este término está representado por el Hamiltoniano

$$H_{TE} = -\frac{p^4}{8m^3c^2} = -\frac{1}{2mc^2}(H_0 - V)^2$$

donde  $V = -\frac{e^2}{r}$  es la energía de interacción electrostática entre el electrón y el núcleo. Esta expresión resulta útil para calcular la matriz de este operador ya que, si nos restringimos al subespacio  $n = 2$ , cuya energía es  $E_2 = -e^2/8a_0$ , podemos escribir que

$$H_{TE} = -\frac{1}{2mc^2}(E_2^2 - 2E_2V + V^2)$$

En consecuencia, solamente tenemos que calcular los elementos de matriz de los operadores  $V$  y  $V^2$  en el subespacio  $n = 2$ . Es evidente que la matriz de estos dos operadores será diagonal en la base de los estados  $|n, l, m, \sigma\rangle$  ya que ambos operadores son escalares (y conmutan con  $\vec{L}$  y  $\vec{S}$ ). Para hacer el cálculo podemos recordar que los estados del átomo de hidrógeno son tales que

$$\begin{aligned} \langle n, l, m, \sigma | V | n, l, m, \sigma \rangle &= -\frac{e^2}{n^2 a_0} = 2E_2 \\ \langle n, l, m, \sigma | V^2 | n, l, m, \sigma \rangle &= \frac{e^4}{n^3 (l + \frac{1}{2}) a_0^2} = E_2^2 \frac{4n}{l + \frac{1}{2}} \end{aligned}$$

En consecuencia

$$\begin{aligned} H_{TE} &= -\frac{1}{mc^2} \frac{e^4}{128a_0^2} \left(-3 + \frac{8}{l + \frac{1}{2}}\right) \\ &= -\frac{1}{128} \left(-3 + \frac{8}{l + \frac{1}{2}}\right) mc^2 \alpha^4 \end{aligned}$$

En consecuencia, cuando restringimos la matriz de  $H_{KE}$  al subespacio  $n = 2$  obtenemos

$$H_{TE} = \begin{pmatrix} b_{2s} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b_{2s} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b_{2p} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b_{2p} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & b_{2p} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b_{2p} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b_{2p} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b_{2p} \end{pmatrix}$$

donde las constantes  $b_{2s}$  y  $b_{2p}$  resultan ser

$$\begin{aligned} b_{2s} &= -\frac{13}{128} mc^2 \alpha^4 \\ b_{2p} &= -\frac{7/3}{128} mc^2 \alpha^4 \end{aligned}$$

2. *Término de Darwin.* Recordamos que el Hamiltoniano de Darwin es

$$H_{Darwin} = \frac{e^2 \hbar^2}{8m^2 c^2} 4\pi \delta(\vec{r})$$

Por lo tanto, los elementos de matriz de este operador son siempre diagonales en la base  $|n, l, m, \sigma\rangle$  (ya que no conectan valores distintos de  $l$  ni de  $m$  ni de  $\sigma$  (porque conmutan con  $\vec{L}^2$ ,  $\vec{L}_z$  y  $\vec{S}$ ). Asimismo, el elemento de matriz es proporcional al valor de la función de onda en el origen. Para calcularlo podemos recordar que

$$\Psi_{n,0,0}(0) = \frac{2}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{1}{na_0}\right)^{3/2}, \quad \Psi_{n,l,m}(0) = 0 \text{ si } l \neq 0$$

En consecuencia, la matriz del hamiltoniano de Darwin, restringida al subespacio  $n = 2$  es una matriz de  $8 \times 8$  que tiene la forma

$$H_{Darwin} = \begin{pmatrix} a_{2s} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_{2s} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

donde el valor del coeficiente  $a_{2s}$  es

$$\begin{aligned} a_{2s} &= \frac{e^2 \hbar^2}{8m^2 c^2} 4\pi |\Psi_{2,0,0}(0)|^2 \\ &= \frac{e^2}{16a_0} \frac{\lambda_C^2}{a_0^2} = \frac{1}{16} \alpha^4 mc^2 = \frac{8}{128} \alpha^4 mc^2 \end{aligned}$$

3. *Acoplamiento espín órbita.* Recordemos que el Hamiltoniano es

$$H_{SO} = \frac{1}{2} \frac{ge^2}{2m^2 r^3 c^2} \vec{L} \cdot \vec{S}$$

Para calcular los elementos de matriz de este operador, conviene usar la identidad que relaciona al momento angular total  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ :

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} (\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2)$$

Como usaremos esta identidad dentro de los subespacios con  $l = 1, 0$  y en ambos casos tenemos  $s = 1/2$  podremos reemplazar

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \hbar^2 \left( j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right)$$

Como vemos, el término  $H_{SO}$  es automáticamente diagonal en la base  $|n, l, j, M\rangle$  (donde  $s = 1/2$  está implícito). En esta base el operador se puede escribir como

$$H_{SO} = \frac{g\hbar^2 e^2}{8m^2 c^2} (j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}) \langle n, l, j, M | \frac{1}{r^3} | n, l, j, M \rangle$$

Para avanzar en este cálculo basta conocer los valores medios del operador  $1/r^3$ , que resultan ser

$$\langle n, l, j, M | \frac{1}{r^3} | n, l, j, M \rangle = \frac{1}{n^3 a_0^3} \frac{1}{l(l + \frac{1}{2})(l + 1)}$$

En consecuencia, recopilando estos resultados obtenemos que

$$H_{SO} = mc^2 \alpha^4 \frac{g}{8n^3} \frac{(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4})}{l(l + \frac{1}{2})(l + 1)}$$

En consecuencia, para el caso de  $n = 2$  tenemos dos subniveles: En el nivel  $2s$  se cumple que  $l = 0$  y  $j = 1/2$ . En consecuencia, en ese nivel el Hamiltoniano se anula. En cambio, en el nivel  $2p$ , cuya degeneración es  $g_{2p} = 6$  tenemos dos subniveles: uno con  $j = 3/2$  (y dimensión  $\dim(2p_{3/2}) = 4$  y otro con  $j = 1/2$  cuya dimensión es  $\dim(2p_{1/2}) = 2$ . Entonces, la matriz del operador  $H_{SO}$ , en la base  $|n, l, j, M\rangle$  es

$$H_{SO} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_{2p_{1/2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{2p_{1/2}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{2p_{3/2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{2p_{3/2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{2p_{3/2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{2p_{3/2}} \end{pmatrix}$$

donde el valor del coeficiente  $c_{2p_{1/2}}$  y del  $c_{2p_{3/2}}$  es

$$c_{2p_{1/2}} = -\frac{4g}{3} mc^2 \alpha^4 \frac{1}{128}$$

$$c_{2p_{3/2}} = \frac{2g}{3} mc^2 \alpha^4 \frac{1}{128}.$$

Estamos en condiciones de resumir los resultados y obtener la corrección de las energías del nivel  $n = 2$ . En primer término conviene sumar las expresiones correspondientes a los Hamiltonianos de Darwin y a la corrección relativista de la energía cinética. Estos resultan ser:

$$H_{Darwin} + H_{TE} = -\frac{mc^2 \alpha^4}{128} \begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{7}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{7}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{7}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{7}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{7}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{7}{3} \end{pmatrix}$$

En consecuencia, sumando los tres términos que contribuyen a la estructura fina podemos escribir la matriz de la perturbación (en la base acoplada, formada por los estados de la forma  $|n, l, j, M\rangle$  de la siguiente forma:

$$H_{EF} = -\frac{mc^2 \alpha^4}{128} \begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{7+4g}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{7+4g}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{7-2g}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{7-2g}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{7-2g}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{7-2g}{3} \end{pmatrix}$$

Como vemos, cuando  $g = 2$ , los niveles  $2s_{1/2}$  y  $2p_{1/2}$  tienen la misma energía:  $\Delta E_{j=1/2} = -\frac{5}{384} mc^2 \alpha^4$ . Por otra parte, el estado  $2p_{3/2}$  tiene un corrimiento diferente dado por  $\Delta E_{j=3/2} = -\frac{1}{128} mc^2 \alpha^4$ . El estado fundamental del sistema pasa a ser aquel con  $j = 1/2$  y tiene degeneración  $\dim(2s_{1/2}) + \dim(2p_{1/2}) = 4$ . El siguiente estado tiene una energía mayor y también tiene dimensión  $\dim(2p_{3/2}) = 4$ . La diferencia entre la energía de estos dos subniveles es  $\Delta E_{1/2,3/2} = -mc^2 \alpha^4 / 32$ .

## E. Efecto Zeeman y Parthen Back

Óptica cuántica lineal. Fotones en interferómetros.

## 1. Introducción: luz cuántica y materia clásica

Ya hemos visto que el campo electromagnético es un conjunto de infinitos osciladores armónicos (dos osciladores para cada vector de onda  $\vec{k}$ , cada uno de los cuales corresponde a una polarización diferente). Cada uno de esos osciladores tiene autoestados  $|n_{\vec{k},\lambda}\rangle$  cuyas energías son  $E_{n_{\vec{k},\lambda}} = (n_{\vec{k},\lambda} + 1/2)\hbar\omega_{\vec{k}}$  (con  $\omega_{\vec{k}} = c|\vec{k}|$ ). En este estado hay  $n_{\vec{k},\lambda}$  fotones en el modo con vector de onda  $\vec{k}$  y polarización  $\lambda$  (lo cual no es otra cosa que la definición de lo que es un fotón).

En ausencia de materia, estos osciladores del campo no interactúan entre sí, ya que la teoría electromagnética es lineal. Cada oscilador evoluciona independientemente de los otros. Para lograr que los distintos modos del campo electromagnético interactúen entre sí, es necesario acoplarlos con la materia. Un ejemplo sencillo de este tipo de interacción "mediada por la materia" la vimos (o la veremos) en el dominio de la electrodinámica cuántica en cavidades CQED). En ese caso podemos almacenar un modo del campo atrapándolo en una cavidad ideal y podemos también controlar la interacción entre este modo y un átomo. De esta manera podemos lograr que dos modos del campo que se encuentran atrapado en dos cavidades distantes interactúen entre sí haciendo pasar un átomo por las dos cavidades. En este tipo de situación, tanto la luz como la materia ponen de manifiesto su naturaleza cuántica. Sin embargo es posible hacer una descripción microscópica sencilla y razonablemente realista de la interacción entre el átomo y el campo, tal como veremos en el próximo capítulo.

Sin embargo, en muchas situaciones experimentales no tiene sentido apelar a un modelo microscópico para describir la interacción entre los fotones y la materia. En efecto, es mucho más conveniente y razonable apelar a una descripción fenomenológica de la interacción entre el campo electromagnético y la materia, tal como lo hacemos cuando analizamos la propagación de ondas electromagnéticas en medios materiales (por ejemplo, en el límite de la óptica geométrica). En este régimen, observamos efectos cuánticos debidos a la luz (fotones) pero la materia puede ser tratada como un medio continuo que no manifiesta efectos cuánticos. De ese modo, por ejemplo, podemos definir un espejo ideal como un dispositivo tal que transforma al estado de  $n$  fotones en el modo  $\vec{k}_1$  en otro estado con el mismo número de fotones en el modo  $\vec{k}_2$ , donde los vectores  $\vec{k}_1$  y  $\vec{k}_2$  tienen direcciones que cumplen las leyes de la óptica clásica (en este caso la ley de Snell, que se deduce sencillamente de la teoría electromagnética en presencia de contornos materiales ideales). En este capítulo estudiaremos la evolución cuántica del campo electromagnético en experimentos en los que se utilizan solamente elementos ópticos lineales (pasivos). Es decir, consideraremos un conjunto finito de modos del

campo electromagnético que estarán etiquetados por un único índice  $j = 1, \dots, N$  (en ese índice agrupamos tanto el vector de onda como la polarización). Mas adelante consideraremos ejemplos con dos modos (dos vectores de onda) con y sin polarización y nos limitaremos a analizar modos con la misma frecuencia, o sea  $|\vec{k}_j| = |\vec{k}|, \forall j$ .

## Appendix A: Evolución temporal de operadores de creación y destrucción de varios modos: óptica lineal

Analizaremos la evolución temporal usando la representación de Heisenberg. O sea, los operadores (las propiedades observables del sistema) evolucionan mientras que el estado se mantiene invariable. En este caso, el problema de la dinámica se reduce a encontrar cómo cambian los operadores de creación y destrucción del campo:  $a_{\vec{k}_j}^\dagger$  y  $a_{\vec{k}_j}$ .

Para esto utilizaremos un enfoque fenomenológico pero extremadamente útil. En lugar de analizar la evolución temporal continua nos limitaremos a estudiar los cambios en los operadores de creación y destrucción para un conjunto discreto de instantes. En cada paso, lo importante es saber como dependen los operadores finales  $a_{\vec{k}}(out)$  de los operadores iniciales  $a_{\vec{k}}(in)$ . Esta es algo así como una descripción estroboscópica de la evolución temporal, a la que concebiremos como una sucesión de pasos discretos. Veremos que en cada paso se pueden imponer fuertes restricciones que limitan las formas posibles del mapa que expresa los operadores finales en función de los iniciales. Estas restricciones surgen de la linealidad, de la conservación de las relaciones de conmutación y de la conservación del número de fotones.

La linealidad de la evolución implica que los operadores de salida son una combinación lineal de los de la entrada:

$$a_{\vec{k}_j}(out) = \mathcal{L}_j(a_{\vec{k}_i}(in), a_{\vec{k}_i}^\dagger(in)).$$

La conservación del número de fotones implica que en la combinación lineal debe cumplirse que los operadores de destrucción finales dependan solamente de los operadores de destrucción iniciales. En efecto, sólo de este modo garantizamos que el estado de vacío inicial, que es aquel aniquilado por todos los operadores  $a_{\vec{k}}(in)$  también sea aniquilado por todos los operadores de salida  $a_{\vec{k}}(out)$ . Para no recargar demasiado la notación, denotaremos  $a_j = a_{\vec{k}_j}$ . Entonces, hasta aquí demostramos que los operadores de salida son una combinación lineal de los de la entrada de la forma:  $a_j(out) = \sum_k M_{jk} a_k(in)$ .

Ahora veremos que la matriz  $M_{jk}$  tiene que satisfacer restricciones muy fuertes para que las relaciones de conmutación entre los operadores de salida sean las mismas que satisfacen los operadores de entrada. En efecto, es fácil ver que la condición  $[a_j(out), a_i^\dagger(out)] = \delta_{ki}$  se satisface si y solo si la matriz  $M_{jl}$  es unitaria (este se ve a partir de la igualdad  $[a_j(out), a_i^\dagger(out)] = \sum_{mn} M_{jm} M_{in}^* [a_m(out), a_n^\dagger(out)] = \sum_m M_{jm} M_{nj}^\dagger$ . En

consecuencia, el mapa que describe la evolución temporal tiene que estar dado por una transformación tal que los modos de salida sean una combinación lineal de los modos de entrada. cuyos coeficientes forman una matriz unitaria:

$$\begin{bmatrix} a_1(out) \\ a_2(out) \\ \vdots \\ a_N(out) \end{bmatrix} = U_{N \times N} \begin{bmatrix} a_1(in) \\ a_2(in) \\ \vdots \\ a_N(in) \end{bmatrix}. \quad (A1)$$

Una primera observación que cabe hacer aquí es la siguiente: hay ciertos estados de la luz que se transforman de manera muy sencilla en este tipo de operaciones. En efecto, supongamos que el estado de entrada es un estado coherente para cada uno de los modos. Las expresiones anteriores nos dicen que el estado a la salida también será un estado coherente ya que podemos ver trivialmente que cualquier autoestado del operador de destrucción de todos los modos de entrada se transforma en un autoestado del operador de destrucción de todos los modos de salida. En este sentido, el operador unitario simplemente provee los coeficientes con los que se mezclan las amplitudes de cada uno de los estados coherentes (que, justamente, son los estados cuasi clásicos de la luz).

## Appendix B: El caso de dos modos

Nos concentraremos en primer lugar en el caso de dos modos sin tomar en cuenta su polarización. Esto se reduce al caso  $N = 2$  de la sección anterior (si directamente eliminamos el índice de polarización) o bien corresponde al caso  $N = 4$  donde todas las transformaciones son triviales en los índices que etiquetan la polarización (o sea, si los índices  $j = 1, 2$  corresponden a la polarización horizontal y vertical del primer modo entonces todas las matrices que consideramos mas abajo deben interpretarse como matrices de  $4 \times 4$  con bloques de  $2 \times 2$  que siempre son proporcionales a la identidad).

Demostraremos aquí que la transformación mas general que pueden sufrir dos modos del campo electromagnético puede representarse matemáticamente de manera muy sencilla. En efecto, en ese caso veremos que la operación unitaria mas general puede descomponerse siempre como:

$$U = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\phi} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t & i r \\ i r & t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\phi'} \end{bmatrix} \quad (B1)$$

O sea, está parametrizada por los coeficientes  $r$  y  $t$  (transmisión y reflexión (hay un solo parámetro libre entre  $r$  y  $t$  ya que cumplen  $r = \sqrt{1 - t^2}$ ) y por las fases  $\phi$  y  $\phi'$ .

### 1. Forma general de una matriz unitaria de $2 \times 2$

Para demostrar esto analizaremos aquí la forma mas general que puede tener una matriz unitaria de  $2 \times 2$ .

Si escribimos esta matriz en función de cuatro números complejos como

$$UU^\dagger = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} aa^* + bb^* & a^*c + bd^* \\ ac^* + db^* & cc^* + dd^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (B2)$$

$$U^\dagger U = \begin{bmatrix} aa^* + bb^* & a^*b + dc^* \\ ab^* + cd^* & cc^* + dd^* \end{bmatrix}. \quad (B3)$$

o sea

$$\begin{aligned} |a^2| + |b^2| &= |c^2| + |d^2| = 1, \\ ac^* + bd^* &= ab^* + cd^* = 0. \end{aligned} \quad (B4)$$

entonces si  $c \neq 0$  debe valer  $a = -b(d/c)^*$  y  $d = -ba^*/c^*$ . De aquí surge que  $|b^2|(1 + |d/c|^2) = 1 = |c^2|(1 + |ab|^2/|c^4|)$ . Por lo tanto,  $|b| = |c|$ ,  $|a| = |d|$  y  $|a^2| + |b^2| = 1$ . Sin pérdida de generalidad podemos tomar al coeficiente  $a$  como un número real y positivo (usaremos la notación  $a = t$  y  $|b| = r$ ). O sea que la matriz puede escribirse como

$$U = \begin{bmatrix} t & i r e^{i\phi_b} \\ i r e^{i\phi_c} & t e^{i(\phi_b + \phi_c)} \end{bmatrix} \quad (B5)$$

con  $r^2 + t^2 = 1$  (esta notación está originada en la interpretación de  $r$  y  $t$  como coeficientes de reflexión y transmisión).

Es obvio que esta matriz puede escribirse como un producto del siguiente tipo:

$$U = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\phi_c} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t & i r \\ i r & t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\phi_b} \end{bmatrix} \quad (B6)$$

Este cálculo, sin duda mas largo que lo estrictamente necesario, demuestra que la matriz unitaria mas general de  $2 \times 2$  siempre puede obtenerse como el producto de dos matrices diagonales que introducen desfases y una matriz que depende de los coeficientes de reflexión y transmisión. En lo que sigue usaremos la siguiente notación compacta para estas matrices

$$U_1(\phi) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\phi} \end{bmatrix}, \quad U_2(r) = \begin{bmatrix} t & i r \\ i r & t \end{bmatrix}. \quad (B7)$$

## Appendix C: Divisores de haz no polarizante (BS) y láminas retardadoras

Por lo tanto, la matriz unitaria mas general de  $2 \times 2$  se puede escribir siempre como un producto de la forma  $U = U_1(\phi)U_2(r)U_1(\phi')$ . Estas operaciones elementales son simples de interpretar y de implementar en experimentos con elementos ópticos lineales. En particular, el operador  $U_2(r) \equiv U_{BS}(r)$  corresponde a un divisor de haz con coeficientes de reflexión y transmisión  $r$  y  $t = \sqrt{1 - r^2}$ . El divisor de haz 50/50 corresponde al caso  $r = t = 1/\sqrt{2}$ . En ese caso

$$U_2\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) = U_{BS} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{bmatrix}. \quad (C1)$$

Este operador es tal que  $U_{BS}^2 = i\sigma_x$ . Una secuencia de interés es la que caracteriza a la figura xxx (que aparecerá mas adelante) y que representa a un interferómetro de Mach Zender. El operador unitario que nos permite obtener los operadores de salida en función de los de entrada es:  $U_{MZ}(\phi) = U_{BS}U_1(\phi)U_{BS}$ . Usando las expresiones anteriores podemos ver que

$$\begin{aligned} U_{MZ}(\phi) &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\phi} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{bmatrix} \\ &= i e^{i\frac{\phi}{2}} \begin{bmatrix} -\sin(\frac{\phi}{2}) & \cos(\frac{\phi}{2}) \\ \cos(\frac{\phi}{2}) & \sin(\frac{\phi}{2}) \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (C2)$$

#### Appendix D: Fotones en interferómetros

El primer interferómetro que analizaremos será el denominado interferómetro de Mach Zender. Un divisor de haz se construye con un espejo semi reflectante ubicado a 45 grados respecto de la dirección de propagación, tal como indica la figura. El divisor transmite el 50% de la amplitud y transmite el otro 50%. Asimismo, agrega una fase de  $\pi/2$  al campo reflejado. Por ese motivo su acción se describe mediante el mapa asociado al operador  $U_{BS}$ .

**Enunciado** Interferómetro de Mach Zender. Considere el dispositivo descrito en la figura que consta de dos divisores de haz 50/50, dos espejos perfectos y una lámina de vidrio que introduce un desfase  $\phi$  en una de las ramas del interferómetro. a) Encuentre el operador unitario que permite escribir los modos de salida en función de los modos de entrada. b) Suponga que el estado del campo electromagnético es el de un único fotón en el modo de entrada 1: Calcule la probabilidad de detectar un fotón en cada detector ubicado a la salida del dispositivo (analice la dependencia de la probabilidad con el desfase  $\phi$ ). c) repita el cálculo cuando uno de los dos espejos perfectos es reemplazado por un absorbente perfecto (o por un espejo con coeficiente de transmisión  $t = 1$ ). d) Repita los cálculos anteriores cuando el estado del campo es tal que un fotón incide en el modo 1 y otro fotón incide en el modo 2.

#### Solución

Como vimos, el divisor de haz se describe con el operador  $U_{BS}$ . En cambio un espejo perfecto, en corresponde al operador  $U_{BS}(r = 1)$  (que simplemente cambia de dirección el fotón, o transforma un modo entrante en uno saliente con una fase global de  $\pi/2$ , que puede ser ignorada. La lámina de vidrio que introduce un desfase en uno de los dos modos corresponde al operador  $U_1(\phi)$ . El dispositivo de la figura (un interferómetro de Mach Zender) está descrito entonces por el producto de operadores  $U_{MZ} = U_{BS}U_1(\phi)U_{BS}$ . Por lo tanto la relación entre operadores de salida (que denotamos con una prima) y los de entrada es:

$$\begin{bmatrix} a'_1 \\ a'_2 \end{bmatrix} = U_{MZ} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = i e^{i\frac{\phi}{2}} \begin{bmatrix} -\sin(\frac{\phi}{2}) & \cos(\frac{\phi}{2}) \\ \cos(\frac{\phi}{2}) & \sin(\frac{\phi}{2}) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}. \quad (D1)$$

Veamos cómo extraer información física relevante de esta ecuación. Supongamos que el estado inicial del sistema es el de un único fotón incidiendo en el modo 1. Usando la expresión anterior (y su inversa) podemos escribir (a menos de una fase global) que:  $a_1 = -\sin(\frac{\phi}{2})a'_1 + \cos(\frac{\phi}{2})a'_2$ . Teniendo en cuenta que el estado del sistema (que no cambia en el tiempo) es:  $|\Psi\rangle = a_1^\dagger|0\rangle = |1_1, 0_2\rangle$  y escribiendo el operador de creación en función de los modos finales, podemos ver que el estado también puede escribirse como  $|\Psi\rangle = (-\sin(\frac{\phi}{2})a_1'^\dagger + \cos(\frac{\phi}{2})a_2'^\dagger)|0\rangle = -\sin(\frac{\phi}{2})|1_{1'}, 0_{2'}\rangle + \cos(\frac{\phi}{2})|0_{1'}, 1_{2'}\rangle$ . Dado este estado, podemos calcular la probabilidad de detectar un fotón en cada uno de los dos modos. Evidentemente, tenemos que  $\text{Prob}(1_{1'}, 0_{2'}) = \sin^2(\frac{\phi}{2})$  y  $\text{Prob}(0_{1'}, 1_{2'}) = \cos^2(\frac{\phi}{2})$ . En particular, tanto para  $\phi = 0$  como para  $\phi = \pi$  el fotón saldrá con probabilidad 1 por una de las dos salidas (en la otra, un detector nunca detectará un fotón. Este es un experimento sencillo pero notable ya que es imposible de explicar su resultado a menos que aceptemos que los fotones no viajan por un camino bien definido (es una versión discreta del experimento de las dos rendijas de Young). En efecto, supongamos que cambiamos uno de los espejos perfectos por absorbentes perfectos (o transmisores perfectos). En ese caso, solamente tendremos un modo entrante en el último divisor de haz. En consecuencia, los modos salientes se escriben en función de los entrantes reemplazando  $a_2 = 0$  en las expresiones anteriores (esto es equivalente a decir que ese modo se pierde?? REVISAR!!). En este caso la probabilidad de detectar fotones en ambos detectores es idéntica (e igual a 1/4, ya que la mitad de las veces el fotón será absorbido por el absorbente ideal). La analogía con el experimento de las dos rendijas es clara: cuando los dos caminos están abiertos un detector puede permanecer siempre oscuro mientras que si alguno de los dos caminos se cierra los dos detectores recibirán igual cantidad de fotones (luz mas luz es igual a sombra).

#### Appendix E: Interferencia de dos fotones (Hong, Ou, Mandel).

Consideremos ahora un experimento mas interesante, Preparamos un estado inicial con dos fotones, uno en el modo 1 y otro en el modo 2. O sea, el estado es  $|\Psi\rangle = |1_1, 1_2\rangle = a_1^\dagger a_2^\dagger|0\rangle$ . Usando las expresiones para los modos de entrada en función de los de salida ( $a_1 = -\sin(\frac{\phi}{2})a'_1 + \cos(\frac{\phi}{2})a'_2$  y  $a_2 = \cos(\frac{\phi}{2})a'_1 + \sin(\frac{\phi}{2})a'_2$ ) es fácil demostrar que el estado puede escribirse como  $|\Psi\rangle = \sin(\phi)(|0_{1'}, 2_{2'}\rangle - |2_{1'}, 0_{2'}\rangle)/\sqrt{2} + \cos(\phi)|1_{1'}, 1_{2'}\rangle$ . Para  $\phi = 0$  vemos que los dos fotones salen por caminos diferentes. Si ubicamos detectores en cada uno de esos caminos, debemos detectar ambos fotones en coincidencia. Si modificamos el desfase que se introduce entre ambos caminos, podemos lograr eliminar las coincidencias por completo: cuando  $\phi = \pi/2$  no debemos observar coincidencias y los dos fotones salen siempre por el mismo

camino (con igual probabilidad pueden salir por  $1'$  o por  $2'$ ). Este fenómeno de interferencia de dos fotones tiene una implicancia muy profunda y sólo se explica a partir de la indistinguibilidad de los fotones, fue descrito y observado por primera vez por Hong, Ou y Mandel a fines de la década de 1980). También es interesante analizar que sucede en este caso si alguno de los dos caminos está cerrado (por un absorbente ideal). En ese caso los dos fotones recorrerán el único camino disponible (con probabilidad  $1/2$  y por lo tanto llegará uno a cada detector (demostrar esto!).

#### **Appendix F: Divisores de haz polarizantes (PBS) y láminas de cuarto y media onda**

#### **Appendix G: Problemas sugeridos**

**Enunciado** OTROS PROBLEMAS: MEDICION SIN INTERACCION. DELAYED CHOICE. QUANTUM ERASER.