

Trabajo práctico N° 1
Operador-Matriz Densidad - 14/03/19

Problema 1. Un microestado viene dado por un vector $|\psi\rangle = \sum_k a_k |a_k\rangle$ en la base $\{|a_k\rangle\}$. Toda la información física que contiene se puede deducir del operador $\hat{D} = |\psi\rangle\langle\psi|$ (notar que, a diferencia de los vectores de estado, es único es decir no hay fases globales). Mostrar las siguientes propiedades:

- a) $\text{Tr}(\hat{D}) = 1$.
- b) Dado un observable $\hat{A}$ entonces $\text{Tr}(\hat{D}\hat{A}) = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\hat{A}\rangle$
- c) Siendo: a_n un autovalor del observable $\hat{A}$; $P(a_n)$ la probabilidad de medirlo en el estado $|\psi\rangle$ y $\hat{P}_{a_n}$ el proyector en el subespacio que genera, mostrar que

$$P(a_n) = \text{Tr}(\hat{D}\hat{P}_{a_n})$$

Problema 2. Sea un macroestado definido por $\hat{D}$, y un observable macroscópico A representado por un operador hermítico $\hat{A}$. Mostrar que:

- a) $\text{Tr}(\hat{D}) = 1$,
- b) $\hat{D}$ es hermítico¹ y el valor medio $\langle\hat{A}\rangle$ será real.
- c) $\hat{D}$ es un operador no negativo (y con ello los $r_k \geq 0$) y el promedio de un operador no negativo será mayor o igual que cero.
- d) si $\hat{D}^2 = \hat{D}$ (es decir, si $\hat{D}$ es un proyector), entonces el sistema está en un *estado puro*.

Problema 3. Sea un observable $\hat{A}$ cuyos autoestados $\{|a_j\rangle\}$, $\hat{A}|a_j\rangle = a_j|a_j\rangle$, conforman una base ortonormal del espacio de estados. Sea otro observable $\hat{B}$, con una base ortonormal de autoestados $\{|b_i\rangle\}$, tal que $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$. Supondremos que p_1 y p_2 son dos números reales y positivos, con $p_1 + p_2 = 1$. Consideremos dos sistemas distintos.

El primero se encuentra en el microestado dado el por ket:

$$|\Psi\rangle = \sqrt{p_1}|a_1\rangle + \sqrt{p_2}|a_2\rangle.$$

Como vimos en el problema 1 también está descripto por el operador $\hat{D}' = |\Psi\rangle\langle\Psi|$.

El segundo estado corresponde a otro sistema descripto por el operador densidad

$$\hat{D} = |a_1\rangle p_1 \langle a_1| + |a_2\rangle p_2 \langle a_2|.$$

- a) Encontrar la probabilidades $P(a_1)$ y $P(a_2)$ de medir los autovalores a_1 y a_2 en ambos sistemas.
- b) Si se mide el observable $\hat{B}$, encontrar la probabilidades $P(b_i)$ de medir el autovalor b_i en ambos sistemas. ¿Cuál es la diferencia esencial entre ambos estados?

¹Recordar que esto implica que puede elegirse una base ortonormal $|r_k\rangle$ —tales que $\hat{D}|r_k\rangle = r_k|r_k\rangle$ — y sus autovalores r_k serán reales y tales que $\sum_k r_k = 1$. Las r_k pueden seguirse interpretando como probabilidades, ahora de estados sin solapamiento. Ésta será siempre la base más cómoda para trabajar.

- c) Llamamos *poblaciones* a los términos diagonales del operador densidad ($\hat{D}_{a_j a_j}$) y *coherencias* a los términos no diagonales ($\hat{D}_{a_j a_k}$ con $j \neq k$) de este operador en una base ortonormal. Escribir $P(a_1)$ y $P(b_i)$ en términos de las poblaciones y las coherencias de los operadores $\hat{D}$ y $\hat{D}'$ ¿Qué información tienen las poblaciones y las coherencias?

Problema 4.^(*) Supongamos ahora que un sistema está descrito por un operador densidad más general, $\hat{D} = \sum_{\lambda} |\psi_{\lambda}\rangle p_{\lambda} \langle \psi_{\lambda}|$.

- a) Muestre que las poblaciones $D_{a_j a_j}$ seguirán siendo positivas.
- b) Si midiera N veces el observable A , en N sistemas idénticos preparados en idénticas condiciones ¿en cuántos sistemas espera medir el autovalor a_j ?
- c) Puede decirse algo a priori del valor de las coherencias?

Problema 5.

- a) Muestre que la evolución temporal del operador densidad está descrita por la ecuación

$$\frac{dD}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{D}],$$

(ecuación de *Liouville-von Neumann*).

- b) Escriba la ecuación para la evolución temporal de un observable $\hat{A}$ ¿Qué sucederá con $\langle \hat{A}(t) \rangle$ si $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$?
- c) Muestre que $\text{Tr} \hat{D}(t) = \text{Tr} \hat{D}(t_0)$.

Problema 6.

a) Muestre que, puesto que el observable $\tilde{A}_a$ opera efectivamente sólo sobre el espacio $\mathcal{E}_{\mathcal{H}}^a$, el promedio $\langle \tilde{A}_a \rangle = \text{Tr}(\hat{D} \tilde{A}_a)$ puede escribirse como una traza sobre el espacio vectorial $\mathcal{E}_{\mathcal{H}}^a$. Esta traza parcial $\text{Tr}_a()$ comprende solamente operadores definidos sobre este espacio: $\langle \tilde{A}_a \rangle = \text{Tr}(\hat{D} \tilde{A}_a) = \text{Tr}_a(\hat{D}_a \tilde{A}_a)$. El operador $\hat{D}_a \equiv \text{Tr}_b(\hat{D})$ es el *operador densidad del subsistema a*, y contiene toda la información concniente a observables que comprendan sólo a este sistema.

b) Comprobar que cuando el operador densidad de un sistema de entidades distinguibles puede escribirse como producto de operadores de los subsistemas que lo componen $\hat{D} = \prod_i \hat{D}_i$, los resultados de las medidas parciales en un subsistema dado no se ven afectadas por el macroestado particular de los otros subsistemas. (Cuando $\hat{D}$ no puede escribirse como un producto, decimos que los subsistemas están correlacionados cuánticamente o *entrelazados*).

c) Sean a y b dos spines $\frac{1}{2}$ en un estado singlete: $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle)$ (se entiende aquí que, siendo $\hat{S}_z$ el operador que da la proyección de spin a lo largo del eje z , $\hat{S}_z|\pm\rangle = \pm\frac{1}{2}\hbar|\pm\rangle$). Encontrar $\hat{D}$, el operador densidad $\hat{D}_a$ que describe al subsistema conformado por el spin a , y $\hat{D}_b$.

ch) Notar que pese a que en el ejemplo anterior partimos de un estado puro, el estado del subsistema a es una mezcla estadística (y por lo tanto, no puede describirse utilizando simplemente vectores de estado). Si medimos solamente el estado del spin a , ¿puedo decir con certeza cuál será el resultado? ¿Será la entropía del subsistema mayor o menor que la del sistema global?

d) Los autoestados del operador $\hat{S}_x$ con proyección de spin positiva o negativa a lo largo del eje x puede escribirse como $|\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \pm |-\rangle)$. Los autoestados respectivos de S_y a su vez son $|\pm\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \pm i|-\rangle)$. Comente sobre el estado de polarización del spin a a lo largo de los ejes x e y .

e) Imaginemos que, dado el macroestado global anterior $\hat{D}$, mido el spin a obteniendo como resultado que su proyección sobre el eje z es positiva. ¿En qué estado queda ahora el sistema conjunto? Si midiera ahora (luego de medir el spin a) el estado de polarización del spin b , ¿puedo tener alguna certeza de cuál será el resultado? Notar que los espines a y b pueden estar separados espacialmente todo cuanto se quiera. Este resultado (que la medida cuántica de un sistema separado físicamente de otro pueda influenciar a este segundo sistema) constituye la llamada “paradoja EPR” (Einstein, Podolsky y Rosen).

f) Muestre que un sistema con un operador densidad arbitrario $\hat{D}_a$ siempre puede considerarse un subsistema de un sistema mayor ab que está en un estado puro. ([Ayuda]: Alcanzará con encontrar un macroestado puro que al ser reducido por medio de la traza me de el operador densidad $\hat{D}_a$ original.)

Problema 7.

- a) ¿Puede el operador $\hat{D} = \frac{\exp[-\beta\hat{H}]}{Z_C}$ ser el operador densidad que define el macroestado de un sistema caracterizado por el Hamiltoniano $\hat{H}$? De ser posible, escriba qué condición especial tiene que satisfacer Z_C (llamada “función de partición canónica”; pese a parecer simplemente una constante de normalización, tendrá una importancia singular en esta materia). Escriba esta condición en términos de los autovalores (supuestos discretos) E de $\hat{H}$, cada uno con degeneración $g(E)$.
- b) Note que (por primera vez) este operador no ha sido escrito como una suma de proyectores pesados por una “probabilidad”. Intente escribirlo de esa manera, utilizando la base de autovectores de $\hat{H}$. *Ayuda: un truco que generalmente da frutos es utilizar a la unidad, convenientemente escrita.*
- c) ¿Cuáles serían las poblaciones y cuáles las coherencias en esa base? ¿Qué relación guardan con las probabilidades a que nos referíamos en el ítem anterior? ¿Cómo cambian las poblaciones al subir o bajar la energía del sistema? ¿Cómo lo hacen al crecer el parámetro β ? ¿Cambiarán sus valores poblaciones y coherencias al cambiar la base?
- d) En base al ítem anterior y conociendo las unidades de β , intente interpretar el significado de este parámetro. Puede ayudar a esta interpretación considerar lo siguiente: ¿cómo evoluciona $\hat{D}$ con el tiempo, según lo determinado en el ejercicio anterior?
- e) Supongamos que $\hat{H} = \sum_{i=1}^2 \hat{p}_{x_i}^2/2m_i + V(\hat{x}_i)$, donde m_i es la masa de la partícula i -ésima y $V(x)$ el potencial unidimensional confinante, que es constante en la región del espacio entre $x = 0$ y $x = L$, e infinito fuera de ella.
 - i Suponiendo que las partículas son distinguibles: ¿cómo son las poblaciones asociadas a este operador en la base de sus impulsos?
 - ii ¿Existen correlaciones entre los impulsos de ambas partículas? ¿Espera que las haya para sus posiciones? Luego de responderse esa pregunta, muestre que su respuesta es cierta construyendo (a menos de la constante normalizadora, con la que pelearemos luego, al estudiar sistemas en equilibrio) el operador densidad de cada partícula $\hat{D}_i$ y el operador densidad producto, $\hat{D} = \hat{D}_1 \otimes \hat{D}_2$.