Álgebra Lineal I
Proyecto
Mecánica cuántica desde álgebra lineal

1 Motivación

Una de las ramas fundamentales de la física es la mecánica cuántica, la cual nos ayuda a describir la dinámica de los objetos más pequeños del universo. En este proyecto desarrollarás algunos conceptos técnicos sencillos, pero importantes para el entendimiento de la teoría

Debido a su importancia, la teoría cuántica se ha desarrollado a niveles muy profundos y con gran alcance, incluyendo aspectos técnicos de muchas áreas matemáticas, pero para estudiar los fundamentos basta con saber cálculo, ecuaciones diferenciales y álgebra lineal. Para los conceptos que aquí se presentan veremos que sólo es necesaria la teoría de álgebra lineal que ya has trabajado durante el curso.

En el proyecto se presenta la idea de operadores y su condición para representar observables físicas, se habla de estados y cómo estos describen un sistema físico. Más adelante, se introduce la notación de Dirac para hacer cálculos sencillos y con ayuda del operador de espín se introduce la noción de medir una cualidad de un sistema, así como la interpretación probabilística de esto. Por último realizarás una deducción del principio de incertidumbre de Heisenberg en su forma más general que, a grandes rasgos, dice que es imposible saber con certeza la posición y el momento de una partícula simultáneamente.

2 Definiciones

En el curso ya estudiamos que es un producto interior en un espacio vectorial real, es decir, sobre $\mathbb{R}$. También es posible definir la noción de producto interior en un espacio sobre $\mathbb{C}$, el campo de los complejos, pero hay que ser un poco más cuidadosos. Para un complejo $z = a + bi$, usaremos z^* para denotar a su conjugado $z = a - bi$.

Definición. Sea V un espacio vectorial sobre $\mathbb{C}$. Un *producto interior* en V es una función $\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \to \mathbb{C}$ que cumple las siguientes tres propiedades:

- *Simetría conjugada.* Para cualesquiera u, v en V se tiene que $\langle u, v\rangle = \langle v, u\rangle^*$
- *Linealidad en la segunda entrada.* Para u, v, w en V y z un complejo, se tiene que

$$\langle u, zv + w\rangle = \langle u, v\rangle + z\langle u, w\rangle.$$

Álgebra Lineal I, COMAL Matemáticas a Distancia, Facultad de Ciencias, UNAM
Sitio web del curso: `http://www.mdistancia.com/comal/0`.
Trabajo realizado con el apoyo del Programa UNAM-DGAPA-PAPIME PE104721

- *Positiva definida.* Para $x \neq 0$ se tiene que $\langle x, x \rangle > 0$.

Como observación importante, la linealidad en la segunda entrada se cambia por linealidad en la primera entrada en algunas otras referencias en la literatura. Aquí nos apegaremos a la linealidad en la segunda entrada.

Definición. Decimos que una matriz H en $M_n(\mathbb{C})$ es *hermitiana* si cumple:

$$H = H^\dagger,$$

donde $H^\dagger$ es por definición H^{*T}, es decir, la matriz obtenida de transponer a H y tomar el conjugado complejo de cada una de sus entradas. A esta matriz la llamamos la *transpuesta conjugada* de H, o simplemente H *daga*.

Definición. (Notación de Dirac). Sea V un espacio vectorial sobre $\mathbb{C}$ con un producto interior $\langle \cdot, \cdot \rangle$. A los vectores de V los vamos a expresar de la forma $|v\rangle$, y en vez de llamarlos vectores los llamaremos *kets*.

Un teorema importante (de representación de Riesz) garantiza que para cada ket $|v\rangle$ existe un elemento $\langle v|$ en el espacio dual V^* que cumple que para todo w en V se cumple que

$$\langle |v\rangle, |w\rangle \rangle = \langle v| (|w\rangle).$$

A los elementos de la forma $\langle v|$ les llamaremos *bras*.

Una observación importante es que es posible realizar este producto con cualquier bra $\langle u|$ y un ket $|v\rangle$. Al hacerlo obtenemos un número complejo que por simplicidad denotaremos por $\langle u|v\rangle$.

La notación puede resultar un poco extraña, pero todo resulta muy claro al recordar que en el fondo hay simplemente un producto interior. Como se verá más adelante, en mecánica cuántica, esta cantidad se puede interpretar como una amplitud de probabilidad.

Definición. El producto interior lo denotaremos a partir de ahora como $\langle \cdot|\cdot \rangle$ y la norma que le corresponde por $\| \cdot \|$. Como discutimos arriba, el produto interior de dos vectores $|\alpha\rangle$ y $|\beta\rangle$ es el número complejo que escribimos como $\langle \alpha|\beta\rangle$ y cumple las siguientes propiedades:

1. $\langle v|u\rangle = \langle u|v\rangle^*$ para cualesquiera dos vectores u, v en V.
2. $\|u\|^2 = \langle u|u\rangle \geq 0$, para cualquier vector u en V y $\|u\| = 0$ si y sólo si $u = 0$.
3. Para u, v, w vectores en V y z un complejo, se tiene que

$$\langle u|zv + w\rangle = z \langle u|v\rangle + \langle u|w\rangle.$$

Definición. Un *espacio de Hilbert* (complejo) $\mathcal{H}$ es un espacio vectorial completo con producto interior.

Es posible mostrar que todo espacio vectorial de dimensión finita es completo.

Trabajo realizado con el apoyo del Programa UNAM-DGAPA-PAPIME PE104721

Definición. Usando la notación de Dirac, se puede definir el *sistema cuántico de dos estados* como el espacio de Hilbert

$$V = \left\{ |v\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} : \alpha, \beta \in \mathbb{C} \right\},$$

equipado con el producto interior canónico

$$\left\langle \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} \gamma \\ \delta \end{pmatrix} \right\rangle = \bar{\alpha}\gamma + \bar{\beta}\delta.$$

Una observación importante es que para elementos de este espacio, podemos representar a los bras, como vectores renglón:

$$V^* = \left\{ \langle v| = \begin{pmatrix} \bar{\alpha} & \bar{\beta} \end{pmatrix} : \alpha, \beta \in \mathbb{C} \right\},$$

donde $\bar{\alpha},\ \bar{\beta}$ son los conjugados de α y β.

Definición. Las *cantidades observables* son representadas por operadores Hermitianos $\hat{A}$. El *valor esperado* de $\hat{A}$ en un estado $|\psi\rangle$ es $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$. El valor esperado es el valor promedio obtenido al realizar mediciones en un gran número de sistemas inicialmente idénticos.

Definición. Para un estado determinado del observable $\hat{A}$ la *desviación estándar* se representa como σ_A y para su cuadrado tenemos la igualdad:

$$\begin{aligned} \sigma_A^2 &= \left\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \right\rangle \\ &= \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)\psi \mid (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)\psi \rangle \end{aligned}$$

En mecánica cuántica, la desviación estándar representa qué tan lejos en promedio la medición individual se desvía del valor esperado.

3 Exploración de las definiciones

1. A las siguientes matrices se les conoce como las *matrices de Pauli*

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\ \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \text{ y } \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

   Muestra que son hermitianas.

2. Considera los vectores $|\uparrow_z\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|\downarrow_z\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Demuestra que el conjunto $B_z = \{|\uparrow_z\rangle, |\downarrow_z\rangle\}$ forma una base ortonormal del sistema cuántico de dos estados.

4 Solución del problema paso a paso

Las matrices cuyos eigenvalores son reales son de particular interés en la física porque pueden representar cantidades físicas. En cuántica estamos particularmente interesados en utilizar matrices hermitianas.

Trabajo realizado con el apoyo del Programa UNAM-DGAPA-PAPIME PE104721

1. Demuestra que las matrices hermitianas tienen eigenvalores reales. Puedes usar algunas ideas de la demostración del teorema espectral para matrices simétricas reales que se vio en el curso.

2. Considera los vectores
$$|\uparrow_x\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix},\ |\downarrow_x\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix},$$
y
$$|\uparrow_y\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix},\ |\downarrow_y\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix},$$
al igual que el conjunto B_z, los conjuntos $B_x = \{|\uparrow_x\rangle, |\downarrow_x\rangle\}$ y $B_y = \{|\uparrow_y\rangle, |\downarrow_y\rangle\}$ forman bases ortonormales para el espacio de dos posibles estados. Encuentra la matriz de cambio de base de B_z a B_x, y la matriz de cambio de base de B_z a B_y.

3. Considera el sistema de dos estados descrito por $|\psi\rangle = \alpha|\uparrow_z\rangle + \beta|\downarrow_z\rangle$ con $|\uparrow_z\rangle$ y $|\downarrow_z\rangle$ como se definieron en arriba. Calcula los productos $\langle\uparrow_z|\psi\rangle$, $\langle\psi|\uparrow_z\rangle$, $\langle\downarrow_z|\psi\rangle$ y $\langle\psi|\downarrow_z\rangle$ y prueba que $\langle\psi|\psi\rangle = \langle\uparrow_z|\psi\rangle\langle\psi|\uparrow_z\rangle + \langle\downarrow_z|\psi\rangle\langle\psi|\downarrow_z\rangle$.

En cuántica, siempre buscamos que $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ pues en general interpretamos esta cantidad como la amplitud de probabilidad de medir el sistema, la cuál siempre es uno (normalizada); teniendo esto en cuenta podemos interpretar a los coeficientes $\langle\uparrow_z|\psi\rangle\langle\psi|\uparrow_z\rangle$ y $\langle\downarrow_z|\psi\rangle\langle\psi|\downarrow_z\rangle$ como la probabilidad de encontrar al sistema en el estado $|\uparrow_z\rangle$ y $|\downarrow_z\rangle$, respectivamente.

4. ¿Cómo se escribe la condición $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ en términos de α y β? ¿Cuánto deben valer α y β para que la probabilidad de medir al sistema en el estado $|\uparrow_z\rangle$ sea la misma que medirlo en el estado $|\downarrow_z\rangle$?

Los vectores $|\uparrow_z\rangle$ y $|\downarrow_z\rangle$ definidos anteriormente denotan el estado de espín arriba y espín abajo respectivamente en la dirección z, de modo que al escribir $|\psi\rangle = \alpha|\uparrow_z\rangle + \beta|\downarrow_z\rangle$ queremos decir que el estado del sistema $|\psi\rangle$ es una superposición de estados de espín, es decir, al medir el estado de espín del sistema podemos encontrarlo hacia arriba o hacia abajo con una probabilidad asociada a cada una de las mediciones.

Usando las matrices de Pauli podemos construir el operador que nos permite medir el estado de espín del sistema, estas son las matrices $S_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x$, $S_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y$ y $S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$. Aquí $\hbar$ es una constante fundamental de la física, es decir que no puede ser deducida de otras consantes fundamentales. Se le conoce como *la constante reducida de Plank* y vale aproximádamente 1.05×10^{-34}.

5. Calcula el siguiente braket $\langle\psi| S_x |\psi\rangle$ donde $|\psi\rangle$ es un vector del espacio de dos estados, observando que $S_x|\psi\rangle$ sigue siendo un vector de este espacio y por tanto el producto está bien definido, realiza este cálculo expresando a ψ en las tres bases B_x, B_y y B_z definidas previamente. Usando estos resultados encuentra $\langle\psi| S_y |\psi\rangle$ y $\langle\psi| S_z |\psi\rangle$ en términos de α y β.

Lo que resta del proyecto consiste en demostrar el *Principio de Incertidumbre* en su manera más general. Para esto, ten en cuenta a σ_A^2 y sigue los pasos.

6. Definamos $|f\rangle \equiv \left|(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)\psi\right\rangle$. Ahora, reescribe σ_A^2 en términos de $|f\rangle$ y su conjugado. De la misma manera define $|g\rangle$ para cualquier otro observable B, y escribe σ_B^2 en términos de $|g\rangle$ y su conjugado.

Trabajo realizado con el apoyo del Programa UNAM-DGAPA-PAPIME PE104721

7. Utilizando la desigualdad de Cauchy-Schwarz en $\sigma_A^2\sigma_B^2$ obtenemos que:

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 = \langle f|f\rangle \langle g|g\rangle \geq |\langle f|g\rangle|^2$$

donde $\langle f|g\rangle$ es un número complejo. Escribe su norma cuadrada y compárala con una desigualdad con solamente la parte imaginaria de la norma.

8. Reescribe la desigualdad de Cauchy-Schwarz usando que $\langle f|g\rangle$ es un número complejo y que $(Im(z))^2 = [\frac{1}{2i}(z-\overline{z})]^2$ para z complejo.

9. Para poder seguir con la demostración, desarrolla $\langle f|g\rangle$ haciendo uso de sus definiciones. Desarrolla también $\langle f|g\rangle$.

10. Realiza la operación $\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle$ y exprésala en términos del operador conmutador de $\hat{A}$ y $\hat{B}$, que está definido por $[\hat{A},\hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$.

11. Combina los resultados de los puntos 10 y 12 para concluir el principio de incertidumbre en su forma más general. Debes llegar a que:

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\right)^2.$$

Lo que mostraste en los incisos anteriores resulta ser la manera más general del principio de incertidumbre, y está enunciado completamente en términos de álgebra lineal. Para poder llegar a la manera más conocida, que involucra a la posición y momento, procedemos como sigue.

Tomemos el primer observable como la posición, es decir $\hat{A} = x$ y el segundo como el momento $\hat{B} = (\hbar/i)d/dx$. Dada una función arbitraria $k(x)$, el conmutador se obtiene como sigue:

$$\begin{aligned}
[\hat{x},\hat{p}]k(x) &= x\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}(k) - \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}(xk) \\
&= \frac{\hbar}{i}\left[x\frac{dk}{dx} - \left(k + x\frac{dk}{dx}\right)\right] \\
&= i\hbar k
\end{aligned}$$

De esta manera, $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$ y por lo tanto

$$\sigma_x^2\sigma_p^2 \geq \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2.$$

Como las desviaciones estándar son positivas, podemos sacar raíz cuadrada en ambos lados. Con esto obtenemos el principio de incertidumbre en su versión clásica

$$\sigma_x\sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Álgebra Lineal I, COMAL Matemáticas a Distancia, Facultad de Ciencias, UNAM
Sitio web del curso: `http://www.mdistancia.com/comal/0`.
Trabajo realizado con el apoyo del Programa UNAM-DGAPA-PAPIME PE104721