

Esta hoja y las sucesivas las iré poniendo en <http://matematicas.uam.es/~fernando.chamizo/supervision/TFG/tfg.html> donde también hay una lista de la propuesta inicial de los contenidos. La fuente L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X, en los ficheros CM23hoja\*.tex, te será muy útil como plantilla y para poder copiar fórmulas y referencias. Más o menos imita el formato indicado en la guía docente. De todas formas, seguramente es más adecuado, para ahorrar tiempo, que las entregas de cada hoja las incluyas en la plantilla oficial del TFG que puedes descargar en Moodle.

Está claro que uno puede ser un experto en programación de ordenadores convencionales sin saber absolutamente nada de la física de los semiconductores. En principio, uno también podría dominar la computación cuántica sin saber casi nada de física cuántica. Sin embargo, olvidándose del todo de la física cuántica algunos conceptos fundamentales de la computación cuántica, como el de qubit o su medición, resultarían muy extraños, al igual que la formalización matemática con espacios vectoriales complejos y matrices unitarias. Por ello, vamos a dedicar esta primera hoja a aprender un poco de física cuántica básica que sirva de motivación, a sabiendas de que en el resto del trabajo no aparecerá nunca más una función de ondas en el sentido habitual.

La física cuántica tuvo su origen en que algunos fenómenos a escala atómica se producían “a saltos”, de manera discontinua. Un primer modelo matemático, debido a M. Born, W. Heisenberg y P. Jordan, se basaba en matrices infinitas que de alguna manera tenían información sobre los saltos. Poco después, E. Schrödinger desarrolló un modelo basado en ondas que se mostró mucho más poderoso y es el que ha llegado hasta nuestros días. Una idea fundamental, recogiendo una hipótesis de L. de Broglie, es que las partículas cuánticas tienen naturaleza ondulatoria [5]. Si nos parecen partículas es porque son ondas muy concentradas.

El rápido éxito de la formulación de Schrödinger radicaba en que, mediante una ecuación que regulaba la evolución de las ondas, permitía matematizar bastante los problemas sin depender de intuiciones físicas. Gracias al impulso de J. von Neumann y de P. Dirac, se extremó este punto intentando dar una base muy matemática a la teoría a través de postulados o axiomas, en gran medida ligados al análisis funcional.

Hoy en día, no hay acuerdo unánime entre los autores cuando uno consulta los postulados de la mecánica cuántica. Además tienen un enunciado muy raro, lejos de ser verdades evidentes por sí mismas como los postulados de la geometría de Euclides. Veremos aquí una versión abreviada de ellos (fundamentalmente tomada de [4], véase [2] para otros más completos) usando un ejemplo como motivación. Esta versión de los postulados se tornará muy simple en el contexto de la computación cuántica porque el espacio de Hilbert será  $\mathbb{C}^n$  con el producto escalar usual. De este modo, la computación cuántica está basada en el álgebra lineal.

En primer lugar, debes conocer el ejemplo básico.

1) Lee las secciones §1.1 y §1.2 de [1]. Para ver que lo has entendido, escribe para tu trabajo la parte de la sección §1.2, pero considerando que las paredes están en  $x = 0$  y  $x = L$  y por tanto se cumple  $\Psi(0, t) = \Psi(L, t) = 0$ . Calcula cuánto valen los momentos  $p_n$  y las

energías  $E_n$  en función de  $L$  y halla unas posibles  $\Psi_n$  que estén normalizadas en el sentido de que  $\int_0^L |\Psi_n(x)|^2 dx = 1$ . Exprésalas en la forma  $\Psi_n(x, t) = Ce^{-E_n t/\hbar} \text{sen}(\dots)$  con  $C$  una constante real.

Para cada  $t$  fijo,  $\Psi_n$  no está concentrada en el espacio, que es lo que esperaríamos de una partícula clásica. Hay que superponer muchas de las ondas, considerar una combinación lineal, para que adquieran la forma de un pico estrecho. Si tienes curiosidad, en [1, §1.4] está hecho.

Una pregunta muy primaria es qué significa la función de ondas asociada a una partícula. Si se anula, es de sospechar que indica que la partícula no está allí, pero ¿y en el resto? Sin entrar en detalles (esto está relacionado con el tercer postulado), pronto se consideró que para cada  $t$  fijado  $|\Psi(x, t)|^2$  es proporcional a la densidad de probabilidad de detectar la partícula en la posición  $x$ . Para que la probabilidad total sea 1, es lógico normalizar las ondas de forma que  $\int |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$ .

En términos abstractos, para poder tomar combinaciones lineales (superposiciones) y normas, se necesita un espacio vectorial euclídeo (en realidad unitario, porque es sobre los complejos). Además típicamente es de dimensión infinita, por eso parece más adecuada la estructura de espacio de Hilbert [6]. De ahí viene el primer postulado:

**Postulado 1.** *Un sistema cuántico aislado viene representado por un espacio de Hilbert y cada estado del sistema por un vector unitario en él.*

En tu ejemplo, el espacio de Hilbert es  $L^2([0, L])$ . Como ya sabrás, este es el espacio compuesto por las funciones  $f : [0, L] \rightarrow \mathbb{C}$  de cuadrado integrable con la norma  $\|f\| = \int_0^L |f|^2$  que deriva del producto escalar  $\langle f, g \rangle = \int_0^L \bar{f}g$ . Normalizar  $f$  se reduce a dividir por su norma.

**2)** Supongamos una partícula correspondiente a la función de ondas  $\Psi_1 + \Psi_2$ . Normalízala para hallar el estado correspondiente y estudia cuándo es más probable que la partícula se detecte en el intervalo  $[0, L/4]$ , para  $t = 0$  o para  $t = mL^2/(6\pi\hbar)$ .

Los físicos cuánticos suelen escribir  $|\Psi\rangle$  en vez de  $\Psi$  cuando quieren hacer hincapié en que  $\Psi$  se considera un vector. Además indican con  $\langle \Phi | \Psi \rangle$  el producto escalar de  $\Phi$  y  $\Psi$  (en vez del típico  $\langle \Phi, \Psi \rangle$  de los matemáticos) y utilizan  $\langle \Phi | M | \Psi \rangle$  con  $M$  un operador para indicar el producto escalar de  $\Phi$  por  $M\Psi$ .

**3)** Comprueba que  $\langle \Psi_n | \Psi_m \rangle = 0$  para  $n \neq m$  (esto es, que son ortogonales) y calcula el valor de  $\langle \Psi_1 | P | \Psi_2 \rangle$  donde  $P$  es el operador  $-i\hbar \frac{d}{dx}$ .

La probabilidad total de detectar una partícula en algún punto es 1 y eso no tiene que cambiar con el tiempo. Los operadores que conservan la norma (como los giros y las simetrías en  $\mathbb{R}^n$ ) se llaman unitarios. Todo esto motiva el segundo postulado:

**Postulado 2.** *La evolución de un estado en un tiempo inicial  $t_i$  a otro estado en un tiempo  $t$  viene dada por la acción de un operador unitario  $U(t, t_i)$ , esto es,  $|\Psi(t)\rangle = U(t, t_i)|\Psi(t_i)\rangle$ .*

En el contexto de la computación cuántica, como veremos, este postulado se traducirá en que los cálculos que realiza un ordenador cuántico son multiplicaciones por matrices unitarias (si no recuerdas su definición de álgebra lineal, quizá es el momento de que la repases [3], [8]).

Este postulado se identifica con la ecuación de Schrödinger porque hallar  $U(t, t_i)|\Psi(t_i)\rangle$  es lo mismo que resolverla bajo la condición inicial  $\Psi(t_0)$ . Solo a modo de ilustración, en una dimensión, para una partícula de masa  $m$  en un campo conservativo con energía potencial  $V(x)$ , tal ecuación es

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x) \Psi(x, t)$$

y al resolver esta ecuación en derivadas parciales partiendo de un dato inicial  $\Psi(x, 0) = f(x)$  con  $\int |f|^2 = 1$  (bajo ciertas hipótesis de regularidad) se tiene  $\int |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$  para todo  $t > 0$ , la probabilidad se conserva. Esto no es evidente en absoluto. Si tienes curiosidad, consulta por ejemplo [10, §6].

4) En tu ejemplo, lo que hace  $U(t, t_i)$  es pasar del estado genérico  $\Psi = \sum c_n \Psi_n(x, t_i)$  al estado  $\tilde{\Psi} = \sum c_n \Psi_n(x, t)$ . Demuestra que esto conserva la norma.

Ahora viene el postulado de la discordia. Lo que ni Einstein ni Schrödinger creyeron nunca y la principal razón por la que la física cuántica es tan extraña. Está relacionado con el “gato de Schrödinger”, del que habrás oído hablar. En realidad Schrödinger no inventó ese experimento mental para ilustrar la física cuántica, como se hace ahora, sino para indicar que tenía que haber algo erróneo. La versión que escribo aquí solo contempla las llamadas *mediciones proyectivas* y es necesario que recuerdes o aprendas la definición matemática abstracta de proyección ortogonal [7]. En computación cuántica a menudo se utilizan también otras mediciones de tipo más general y abstracto, pero no las veremos en tu trabajo.

*Postulado 3. Una medición es un conjunto de proyecciones ortogonales  $P_m$  con  $\sum_m P_m = I$  donde  $m$  parametriza los resultados de la medición. La probabilidad de que al medir un estado  $\Psi$  se obtenga  $m$  es  $p(m) = \langle \Psi | P_m | \Psi \rangle$  y al hacer la medición el estado se transforma inmediatamente en el estado  $\frac{P_m |\Psi\rangle}{\sqrt{p(m)}}$ .*

En la primera parte, debemos interpretar que  $P_m$  proyecta sobre el espacio generado por los estados compatible con la medición  $m$ . En el ejemplo, si medimos si la energía es menor que 2023, habrá dos proyecciones, una sobre todos los estados compuestos por ondas que tienen energía menor que 2023 y otra proyección sobre los que están compuestos por ondas con energías mayores o iguales que 2023. Lo de la probabilidad tiene su lógica. Si tengo un aparato que comprueba si la energía es  $E_n$  y meto  $0,6\Psi_n + 0,8\Psi_{n+1}$ , suena natural, por la relación entre funciones de onda y densidad de probabilidad, que con probabilidad  $0,6^2$  salga un resultado positivo y con probabilidad  $0,8^2$  sea negativo. Lo que resulta increíble es que por arte de magia el estado se transforme en otra cosa por el hecho de haber sido medido. Concretamente, en  $\Psi_n$  si el resultado es positivo y en  $\Psi_{n+1}$  si es negativo. ¿Cómo sabe un sistema cuántico que

está siendo medido para modificarse instantáneamente? ¿Por qué se transforma esencialmente en lo que se quiere medir? Cuestiones de este tipo han hecho correr ríos de tinta.

El cambio abrupto de un estado tras la medición se llama *colapso de la función de onda* y lo que recoge el postulado es el núcleo de la llamada *interpretación de Copenhague*. La actitud de la mayoría de los físicos actuales es aceptar que esto funciona y sirve para hacer cálculos y no preocuparse demasiado por ir más allá. Quizá hayas leído alguna vez la frase “*Shut up and calculate!*” atribuida a R. Feynman. En realidad no es suya, N. D. Mermin, un físico del estado sólido, dijo en una entrevista *If I were forced to sum up in one sentence what the Copenhagen interpretation says to me, it would be “Shut up and calculate!”*.

5) Explica por qué, en el postulado, el estado después del colapso sigue siendo un estado normalizado.

6) Lee [1, §1.6] saltándote si quieres mis opiniones, marcadas con señales de prohibido (puedes dar un vistazo somero también a §1.7). No hace falta que redactes nada, solo que trates de entenderlo. El postulado anterior es muy importante para computación cuántica.

7) En tu ejemplo, imaginemos un aparato que mide si la energía  $E$  cumple a)  $E < E_{10}$ , b)  $E \in [E_{10}, E_{30})$  o c)  $E \geq E_{30}$ . Si introducimos el estado (normalizado)

$$\Psi = \frac{4}{21}\Psi_5 + \frac{3}{21}\Psi_{20} + \frac{4}{21}\Psi_{23} + \frac{20}{21}\Psi_{50},$$

¿cuál es la probabilidad de obtener b) y en qué se transformará el estado tras esa medición?

8) Muestra que en tu ejemplo

$$P_- \Psi(x) = \begin{cases} \Psi(x) & \text{si } x < \ell, \\ 0 & \text{si } x \geq \ell \end{cases} \quad \text{y} \quad P_+ \Psi(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < \ell, \\ \Psi(x) & \text{si } x \geq \ell, \end{cases}$$

son proyecciones ortogonales y cumplen  $P_- + P_+ = I$ . La primera está asociada a que se detecte la partícula en  $x < \ell$  y la segunda a que se haga en  $x \geq \ell$ . Calcula  $p(m)$  para comprobar que la interpretación probabilista de la función de onda es consecuencia del tercer postulado.

El último postulado te va a sonar raro si, como me dijiste, nunca has visto el *producto tensorial* de espacios vectoriales. No te preocupes, aquí te explicaré qué significa en el ejemplo y más adelante veremos que en computación cuántica es bastante explícito y se relaciona con incrementar el número de bits cuánticos.

**Postulado 4.** *El espacio de Hilbert correspondiente a un sistema cuántico aislado compuesto es el producto tensorial de los espacios correspondientes a cada una de sus componentes.*

Supongamos que en tu ejemplo consideramos dos partículas. Digamos que la primera en el intervalo  $[0, L]$  y la segunda en  $[2L, 3L]$ , para hacer hincapié en que son distinguibles. ¿Cuál sería el espacio natural para los estados? Es tentador pensar en  $L^2([0, L]) \times L^2([2L, 3L])$ . Sin embargo, esto no es correcto. Sus elementos son de la forma  $(\Psi(x_1), \tilde{\Psi}(x_2))$  y la norma  $\int_0^L |\Psi|^2 + \int_{2L}^{3L} |\tilde{\Psi}|^2$ . La probabilidad de que la primera partícula sea detectada en  $[0, \epsilon]$  y la segunda en  $[2L, 2L + \delta]$  sería  $\int_0^\epsilon |\Psi|^2 + \int_{2L}^{2L+\delta} |\tilde{\Psi}|^2$ , pero lo que nos gustaría es que saliera el producto de probabilidades  $\int_0^\epsilon |\Psi|^2 \cdot \int_{2L}^{2L+\delta} |\tilde{\Psi}|^2$ . Esto motiva que el espacio correcto en el que trabajar es el generado por productos de funciones de onda

$$\{\Psi(x_1)\tilde{\Psi}(x_2) : \Psi \in L^2([0, L]), \tilde{\Psi} \in L^2([2L, 3L])\}$$

con el producto escalar

$$\langle \Phi, \tilde{\Phi} \rangle = \int_0^L \int_{2L}^{3L} \Phi(x_1, x_2) \tilde{\Phi}(x_1, x_2) dx_2 dx_1.$$

De esta forma, la norma de  $\Phi(x_1, x_2) = \Psi(x_1)\tilde{\Psi}(x_2)$  es  $\|\Psi\|_{[0, L]}\|\tilde{\Psi}\|_{[2L, 3L]}$ . A este espacio vectorial con este producto escalar es a lo que se llama producto tensorial y se denota habitualmente con  $L^2([0, L]) \otimes L^2([2L, 3L])$ .

9) Imaginemos que el par de partículas tiene una función de ondas en  $t = 0$

$$\Psi = \frac{5}{13}\Psi_1(x_1)\Psi_2(x_2 + 2L) + \frac{12i}{13}\Psi_2(x_1)\Psi_1(x_2 + 2L).$$

Comprueba que el estado está normalizado,  $\|\Psi\| = 1$ , y calcula la probabilidad de que ambas partículas se detecten en la mitad derecha de su intervalo.

Con esto termina esta larga hoja llena de explicaciones físicas. La previsión es que el resto sean más breves y matemáticas. Si tienes curiosidad y quieres aprender más física cuántica por tu propio interés, un buen punto de partida es el magnífico curso [10] y su continuación [9]. El clásico en español [2] tiene una orientación bastante matemática.

**Tarea a entregar.** Debes escribir un documento que combine las soluciones de los ejercicios anteriores y enuncie los postulados. La extensión es libre siempre que no superes las 6 o, a lo más, 7 páginas con el formato de esta hoja o de la plantilla. El resultado debe dar lugar a un primer capítulo de tu TFG llamado *Principios de física cuántica* o algo parecido. Intenta que sea legible por cualquier estudiante de matemáticas. Incluye, si quieres, comentarios históricos o motivaciones, por ejemplo, en la línea de lo que escribo en la primera página, pero no te extiendas con explicaciones accesorias ni detalles mucho los cálculos.

## Referencias

- [1] F. Chamizo. Un poco de física cuántica para chicos listos de primero (del grado de física o matemáticas). <http://matematicas.uam.es/~fernando.chamizo/physics/files/qf.pdf>, 2015.
- [2] A. Galindo and P. Pascual. *Mecánica cuántica*. Alhambra, Madrid, 1978.
- [3] E. Hernández Rodríguez, M. J. Vázquez Gallo, and M. A. Zurro Moro. *Álgebra lineal y geometría*. Pearson, Madrid, 2012. 3<sup>a</sup> ed.
- [4] M. A. Nielsen and I. L. Chuang. *Quantum computation and quantum information*. Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
- [5] E. Schrödinger. An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules. *Phys. Rev.*, 28:1049–1070, Dec 1926.
- [6] Wikipedia contributors. Hilbert space — Wikipedia, the free encyclopedia. [https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Hilbert\\_space&oldid=1175410747](https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Hilbert_space&oldid=1175410747), 2023. [Online; accessed 15-September-2023].
- [7] Wikipedia contributors. Projection (linear algebra) — Wikipedia, the free encyclopedia. [https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Projection\\_\(linear\\_algebra\)&oldid=1162993300](https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Projection_(linear_algebra)&oldid=1162993300), 2023. [Online; accessed 17-September-2023].
- [8] Wikipedia contributors. Unitary matrix — Wikipedia, the free encyclopedia. [https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Unitary\\_matrix&oldid=1164727725](https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Unitary_matrix&oldid=1164727725), 2023. [Online; accessed 17-September-2023].
- [9] B. Zwiebach. Quantum physics II. MIT OpenCourseWare, <https://ocw.mit.edu/courses/physics/8-05-quantum-physics-ii-fall-2013/>, 2013.
- [10] B. Zwiebach. Quantum physics I. MIT OpenCourseWare, <https://ocw.mit.edu/courses/physics/8-04-quantum-physics-i-spring-2016/>, 2016.