Trabajo de fin de grado
Facultad de Ciencias
Universidad Autónoma de Madrid

Curso 2016-2017

# Las Matemáticas relacionadas con el espín

Jorge Blázquez Díaz

# Agradecimientos

En primer lugar, me gustaría agradecerle a Fernando la ayuda y guía en este trabajo. En segundo lugar, pero no menos importante, darle las gracias a Pedro, Manuel, Isabel, Telmo y Silvia, quienes han estado desde el principio o han aparecido estos cuatro años. Os dedico este trabajo (incluso alguno me ha ayudado o hemos hablado de los temas del trabajo). Por supuesto, también a todos los compañeros de grado con los que he compartido tiempo.

# Índice

# Abstract

Usually in the degree of mathematics is relatively rare to apply mathematical methods to physics, specially quantum mechanics or relativity, either because there are not enough theorems or due to our lack of knowledge in the description of the physical phenomenon.

In this final degree project, our goal is to study the physical concept called spin, and related conceps in quantum mechanics, through a physical approximation that will requiere a wide range of mathematical tools. The main ones we will use will be algebra and analysis, but probability and statistics have an important role in quantum mechanics too. It is widely used [Cha15] throughout the paper.

The paper starts with a historical introduction. In this historical introduction, we introduce the main postulates of quantum mechanics, which bring us the famous Schrödinger's equation, and the most common interpretation of quantum mechanics: the Copenhagen interpretation. After that, we introduce the spin. As described briefly in section 2, historically the existence of the spin was unexpected and came from purely experimental data. In section 3 we elaborate the resulting mathematical model when adjusting the observed phenomenons to the framework of quantum mechanics (postponing to the last section Dirac's derivation of the spin from first principles). In section 4 we introduce two-state systems which are crucial to understand nuclear magnetic resonance, widely used in medicine nowadays. In section 5 we introduce tensorial product in order to express main ideas of quantum entanglement and quantum teleportation. Finally, we introduce relativity and combine it with quantum mechanic to obtain the Dirac's equation, which leads us to the phenomenon of spin, as well as other physical consequences.

# 1. Física cuántica y la interpretación de Copenhague

A partir de finales del siglo XIX, una serie de fenómenos inexplicables con la teoría existente lleva inevitablemente a introducir una serie de hipótesis nuevas que conducen a lo que se conoce como mecánica cuántica.

Tales problemas, como la radiación del cuerpo negro, el efecto fotoeléctrico, el efecto Compton o la dualidad corpúsculo-onda, entre otros, fueron abordados por científicos como Schrödinger, Heisenberg, Dirac, Hilbert, Bose, Planck... quienes cimentaron las bases de la mecánica cuántica y, especialmente, el matemático John von Neumann (1903-1957) quien estableció las bases matemáticas de la teoría.

En esta época fue cuando se empezó a pensar en que las partículas podían comportarse como ondas (y las ondas como partículas), en que algunas magnitudes solo podían tomar valores en un conjunto discreto de valores y no cualquiera, en aplicar la estadística y probabilidad y dejar de lado los modelos deterministas anteriores.

Fue von Neumann junto con el físico Dirac quienes, hacia finales de 1920, formularon matemáticamente la física cuántica mediante una serie de *postulados* ([GP78], [Kak14], [NO08], [PostMC]), los cuales intentan dotar de rigor matemático a esta teoría física.

> POSTULADO. A cada sistema físico se le hace corresponder un espacio de Hilbert complejo y separable, tal que los *estados puros* corresponden con rayos unidad en el espacio de Hilbert y a cada elemento del rayo se le conoce como *vector estado*. Cualquier combinación lineal de estados posibles es también posible (principio de superposición).

Primero hacemos notar que un rayo en el espacio de Hilbert es una clase de equivalencia, dada por $v = \lambda w$ y que un estado puro es un estado de preparación maximal del sistema (es decir, un estado en el que hay el mayor número posible de observaciones compatibles e independientes. En caso contrario, el estado es mezcla). Después de estos apuntes, este postulado se fundamenta en que la función de onda cumple que

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\Psi(x,t)|^2 d^3x = 1.$$

Es decir, es un elemento de norma 1 de $L^2(\mathbb{R}^3) = \mathcal{H}$, espacio de Hilbert complejo.

> POSTULADO. Cada observable se representa por un operador hermítico $\mathcal{O} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$.

Esta interpretación se basa en hechos como que para el observable posición se le asocia el operador $X$ (por sencillez, definido en $L^2(\mathbb{R}) = \mathcal{H}$) tal que

$$(X\psi)(x) = x\psi(x).$$

**Notación:** Sea el producto escalar $\langle\psi|\phi\rangle$, definido por $\int_{\mathbb{R}} \overline{\psi}(x)\phi(x)dx$. Entonces utilizamos indistintamente la siguiente notación: $\langle\psi|A|\phi\rangle = \langle\psi|A\phi\rangle$, con $A$ un operador.

Entonces tenemos que

$$\langle\psi|X|\phi\rangle = \int_{\mathbb{R}} x\overline{\psi}(x)\phi(x)dx = \langle\psi|X\phi\rangle.$$

Por otro lado, tenemos que el *valor medio* (o esperado) de un observable $\mathcal{O}$ en el estado normalizado $|\psi\rangle$ se define como la media de los resultados obtenidos al efectuar $N$ medidas y esto lleva, tras unas consideraciones y manipulaciones [GP78], a que

(1) $$\langle\mathcal{O}\rangle_\psi = \langle\psi|\mathcal{O}|\psi\rangle.$$

Recapitulando, tras estas dos consideraciones, también tenemos que $|\Psi(x)|^2$ es la densidad de probabilidad de encontrar la partícula en el punto $x$, por lo que el valor medio es

$$\int_{\mathbb{R}} x|\Psi(x)|^2dx \overset{(a)}{=} \langle X\rangle_\Psi.$$

Es decir, la igualdad $(a)$ resulta de aplicar (1) al operador $X$. Dicho de otro modo, al observable posición se le puede asociar el operador $X$. Otro ejemplo de esto es el operador $P$ (también definido en $L^2(\mathbb{R}) = \mathcal{H}$) asociado al momento $p$, que se define como

$$(P\psi)(x) = -i\frac{d\psi(x)}{dx}.$$

Con todo esto, llegamos a que los observables tienen asociados operadores en el espacio $\mathcal{H}$.

POSTULADO. Dado un sistema físico que está en el estado normalizado $|\psi\rangle$, la medida de un observable $\mathcal{O}$ (puntual) resultará en un valor (propio) $\lambda$ con probabilidad $P_{\mathcal{O}|\psi\rangle} = |\langle\Lambda|\psi\rangle|^2$, donde $|\Lambda\rangle$ es el autovector asociado a $\lambda$, es decir $\mathcal{O}|\Lambda\rangle = \lambda|\Lambda\rangle$.

Este postulado marca la relación entre los valores posibles resultantes al medir un observable con los elementos matemáticos asociados a los estados y los observables, descritos en los anteriores postulados.

Entre otras consecuencias de este postulado está el *valor esperado* (1) que apoya la comprensión del anterior postulado [GP78], [PostMC].

POSTULADO. La evolución temporal de un sistema sigue la *ecuación de Schrödinger*

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = H\Psi(x,t) \tag{2}$$

donde $H$ es un operador llamado *hamiltoniano* del sistema, el cual corresponde al observable energía.

Los postulados anteriores suponían despreciable el tiempo de medida, mientras que este último postulado muestra la variación de los estados y observables. La ecuación descrita en el postulado es la más general, mientras que una forma más particular (y *famosa*) de la ecuación, en dimensión espacial uno, es

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t). \tag{3}$$

Y si $V = V(x)$, tenemos la ecuación de *Schrödinger independiente del tiempo*

$$\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\Psi(x) = 0. \tag{4}$$

Anteriormente a esta ecuación, en 1923, de Broglie propuso generalizar la dualidad corpúsculo-onda de la luz a todas las partículas, lo que más tarde fue comprobado. Esta propuesta motivó a Erwin Schrödinger (1887-1961), quien trató de escribir una ecuación para la onda asociada de De Broglie, que resultó, dos años más tarde, en la famosa ecuación que lleva su nombre.

## 1.1. La Interpretación de Copenhague

La interpretación de Copenhague es una interpretación de la mecánica cuántica, la más extendida y aceptada, también considerada tradicional. Esta trata de dar a entender el significado de las matemáticas de la mecánica cuántica. Fue propuesta en 1927, principalmente por Niels Bohr (1885-1962) y otros como Born o Heisenberg. Sin embargo, personalidades de la época como Einstein o Schrödinger murieron sin *creer* esta interpretación. La interpretación, entre otras cosas, afirma que [CopInt]:

- La función de onda, $\Psi$, contiene todo lo que puede ser conocido de un sistema ANTES de una observación.
- Hay propiedades incompatibles. Ciertas propiedades son incompatibles simultáneamente (principio de indeterminación de Heisenberg).
- El colapso de la función de onda a un estado concreto del observable al realizar una medida de dicho observable.
- Los resultados de los aparatos de medida son clásicos, y deben ser descritos en lenguaje común.
- La interpretación de la función de onda es probabilística (regla de Born).
- La función de onda refleja la dualidad corpúsculo-onda.
- La observación directa a escala atómica o inferior es imposible debido a que el hecho de observar interfiere decisivamente.
- Cuando los números cuánticos son grandes, las propiedades se acercan mucho a la descripción clásica (principio de correspondencia).

Entre tantas consecuencias de esta interpretación, una es la popularmente conocida como *gato de Schrödinger*. En pocas palabras, la función de onda del gato sería la superposición de los estados *vivo* y *muerto* pero que al abrir la caja estaría o bien vivo o bien muerto (que sería la acción de medir) [Gato].

**Teorema 1** *Sea la ecuación de Schrödinger con* $H = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$*, como en (3), entonces se cumple que*

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 dx \tag{5}$$

*no depende del tiempo (conservación de la probabilidad).*

Demostración: Suponemos que $\Psi$ y $\frac{\partial \Psi}{\partial x}$ decaen tan rápido a 0 como queramos. Por otra parte, tenemos que $\Psi = \Psi(x,t)$ cumple la ecuación de Schrödinger. Reescribiendo esta ecuación, llegamos a que

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\left( -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi\right) \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\partial \overline{\Psi}}{\partial t} = \frac{-1}{i\hbar}\left( -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \overline{\Psi}}{\partial x^2} + V\overline{\Psi}\right).$$

Y sea $D = \frac{\partial}{\partial t}(\overline{\Psi}\Psi)$. Entonces, tras derivar y utilizar las expresiones anteriores, resulta que

$$D = \frac{-i\hbar}{2m}\left(\Psi\frac{\partial^2 \overline{\Psi}}{\partial x^2} - \overline{\Psi}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}\right) = \frac{-i\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi\frac{\partial \overline{\Psi}}{\partial x} - \overline{\Psi}\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right) = \frac{\partial}{\partial x}P$$

con $P = \frac{-i\hbar}{2m}\left(\Psi\frac{\partial \overline{\Psi}}{\partial x} - \overline{\Psi}\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)$. Entonces

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\int_{-x}^{x} |\Psi(x,t)|^2 dx &= \frac{\partial}{\partial t}\int_{-x}^{x} \overline{\Psi}\Psi dx = \int_{-x}^{x} \frac{\partial}{\partial t}(\overline{\Psi}\Psi) dx = \\ &= \int_{-x}^{x} D dx = \int_{-x}^{x} \frac{\partial}{\partial x} P dx = P(x) - P(-x).\end{aligned}$$

Entonces, puesto que $\Psi$ y $\frac{\partial \Psi}{\partial x}$ tienden a 0 cuando $x \to \pm\infty$, llegamos a que (5) no depende del tiempo.

■

## 1.2. Ejemplo para la ecuación de Schrödinger: pozo de potencial infinito

Partimos de la ecuación de Schrödinger como en (4) y tenemos que $V = V(x)$ está definida en $[0,1]$ tal que $V$ vale 0 en el intervalo $(0,1)$ e infinito fuera de $(0,1)$. En base a la ecuación (4), y debido a que $\psi$ es más regular que $\psi''$, las singularidades de $V\psi$ deben compensarse con $\psi''(= \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2})$, pero si $V = \infty$ entonces $\psi \equiv 0$ ya que $\psi''$ no puede compensar la singularidad de otra forma.

Por tanto, nos queda

$$
\begin{aligned}
\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0 & \qquad\qquad \text{si } 0 < x < 1, \\
\psi \equiv 0 & \qquad\qquad \text{si } x = 0, 1.
\end{aligned}
$$

Cuyas soluciones son $\psi(x) = A\sin(\pi n x)$ y a $E$ corresponde $E_n = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2m}$.

## 1.3. Evolución temporal $U(t)$

Hasta ahora teníamos un hamiltoniano $H = p^2/2m + V$ de una sola partícula. Podemos pensar de forma más general y pedir únicamente que $H$ sea un operador (hermítico, para que sea observable) y que no dependa del tiempo. En esta situación, podemos formar el operador de *evolución temporal*, definido por $U(t) = e^{-itH/h}$ (en el caso de hamiltonianos que solo actúan sobre el espín, que estudiaremos en el capítulo 4, esto es realmente la exponencial de una matriz). Entonces $U(t)\Psi(x,0)$ cumple formalmente la ecuación de Schrödinger general (2), ya que, simplemente derivando y sustituyendo, ambos lados quedan

$$
i\hbar H \frac{-i}{\hbar} e^{-itH/\hbar}\Psi(x,0) = He^{-itH/\hbar}\Psi(x,0)
$$

que, evidentemente, son iguales.

## 2. Breve historia del espín

En 1897, Pieter Zeeman (1865-1943), realizando una serie de experimentos utilizando un electroimán Ruhmkorff y una red de difracción de Rowland, observó que una línea del espectro del cadmio se dividía bajo un campo magnético de 32.000 gauss. Ante este hecho, Zeeman informó a su antiguo director de investigación, Hendrik Antoon Lorentz (1853-1928), quien, mediante interpretaciones clásicas, afirmó que esta división en la línea espectral se debía al movimiento de las partículas eléctricas de los átomos (lo que crearía pequeños imanes). Sin embargo, aunque esta idea explicaba la mayoría de líneas espectrales, existían muchas excepciones, lo que se conoció como *efecto Zeeman anómalo*.

Posteriormente, en 1925, Ralph Kronig (1904-1995) tuvo la idea de que las partículas tenían un momento angular cuantizado e intrínseco, el *espín*, y con ello tratar de explicar el *efecto Zeeman anómalo*. En particular, esta cuantización haría que el espín de un electrón solo podría tomar dos valores opuestos: $\hbar/2$ o $-\hbar/2$ . Sin embargo, Wolfgang Ernst Pauli (1900-1958) le desanimó ("Esa es una idea muy inteligente, pero la naturaleza no funciona así" [SR05]).

Pocos meses después, ese mismo año, George Uhlenbeck (1900-1988) y Samuel Goudsmit (1902-1978) tuvieron la misma idea pero con la suerte de contárselo a Paul Ehrenfest (1880-1933), quien lo mandó publicar ("¡Los dos sois jóvenes, podéis permitiros una estupidez!", [SR05]).

Sin embargo, la primera evidencia experimental del espín fue anterior, en el experimento de Stern-Gerlach, en 1922.

# 3. Máquinas de Stern-Gerlach y matrices de Pauli

De acuerdo con el experimento de Otto Stern (1888-1969) y Walther Gerlach (1889-1979), realizado en 1922, al lanzar un haz de átomos de plata a través de un campo magnético no homogéneo, se observaban dos claras desviaciones: arriba y abajo. Esto chocaba con la visión clásica en la que se esperaría, por continuidad, cubrir todo el espacio entre arriba y abajo. Más tarde, en 1927 se explicaría el experimento gracias al espín.

De este modo, se idealiza la máquina de Stern-Gerlach, denotada por SGn, donde $\vec{n} \in \mathbb{R}^3$ indica una dirección. También denotamos $n$ por $x$, $y$, $z$ si $\vec{n}$ indica el eje OX, OY, OZ, respectivamente; por ejemplo SGz. Una máquina de este tipo entonces recibirá electrones y los clasificará en función del momento angular detectado en la dirección de $\vec{n}$, y solo habrá dos posibilidades: $+$ o $-$. Y tenemos, por la interpretación de Copenhague, el colapso de la función de onda $\Psi$ a una orientación definida, según una probabilidad de que al medir tenga una orientación $+$ o $-$.

Ahora, para simplificar, tomaremos $\vec{n}$, en cada caso, como el eje OX, OY u OZ, es decir, trabajaremos con máquinas SGx, SGy y SGz. En cada experimento, suministraremos a una primera máquina electrones "al azar" y suministraremos a la siguiente máquina los electrones que hayan salido con orientación $+$. Así, tenemos experimentalmente que, por ejemplo:

- SGz $\Rightarrow$ SGz. A la primera máquina se le suministran electrones sin espín fijado (al azar) y nos dará la mitad $+$ y la otra mitad $-$. Mientras que la segunda máquina solo nos dará orientación $+$.
- SGz $\Rightarrow$ SGy. La primera máquina hará lo mismo, mitad y mitad, pero ahora la segunda nos dará electrones con orientación $+$ y $-$ (un cuarto de los iniciales, en cada dirección $y$).
- SGz $\Rightarrow$ SGy $\Rightarrow$ SGz. Partiendo de la situación anterior, una tercera máquina, SGz, recibe los electrones de la segunda. Y, antiintuitivamente, recibimos, en la dirección $z$, la mitad (de la mitad de la mitad, un octavo de los iniciales) con orientación $+$ y la otra mitad (un octavo) con orientación $-$, cuando a la segunda máquina solo le habíamos suministrado electrones con orientación $+$ en la dirección $z$.

Con todo esto, se observa, según una interpretación cuántica, que la función de onda de un electrón (que pasen por una SGn), que será de la forma $|\Psi\rangle = c_1|n+\rangle + c_2|n-\rangle$, colapsa al primer o segundo término, con probabilidad $|c_i|^2$, y por tanto no se ve alterado el electrón al pasar por máquinas similares (SGn). También se observa que la orientación en un eje no es incompatible con la orientación en otro eje distinto. Y, por último, que la orientación inicial "no se guarda" si tras una clasificación realizada por una máquina $\mathrm{SGn}_1$ se realiza otra distinta por una máquina $\mathrm{SGn}_2$, es decir, la orientación en la dirección $\vec{n}_1$ se pierde (a pesar de que el ángulo $\alpha$ entre $\vec{n}_1$ y $\vec{n}_2$ sí influye en la proporción de $+$ y $-$ que resulta de $\mathrm{SGn}_2$).

Como tenemos dos posibles resultados al medir, por ejemplo $|z+\rangle$ y $|z-\rangle$, estos forman un espacio vectorial de dimensión 2, con $B_z = \{|z+\rangle, |z-\rangle\}$ una base ortonormal. También podíamos tomar, en vez de en la dirección $z$, la dirección $x$ o $y$.

Tomando como base $B_z$, tenemos que

$$|z+\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \qquad |z-\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}.$$

Ahora, si $C_{xz}$ es la matriz del cambio de base de $B_x$ a $B_z$

$$C_{xz} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}a & c\\ b & d\end{pmatrix} \qquad \text{si} \qquad |x+\rangle = \begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}, \qquad |x-\rangle = \begin{pmatrix}c\\d\end{pmatrix}.$$

Tenemos que $|x\pm\rangle$ se detecta como $|z+\rangle$ la mitad de las veces y como $|z-\rangle$ la otra mitad $\Rightarrow |a|^2 = |b|^2 = |c|^2 = |d|^2 = 1/2$. Podemos tomar $a = c = 1/\sqrt{2}$. Además, como $B_x$ es ortogonal: $1/2 + \bar{b}d = 0$, luego $b = 1/\sqrt{2}$ y $d = -1/\sqrt{2}$ es una elección válida.

Análogamente, para $C_{yz}$ podemos tomar $a = c = 1/\sqrt{2}$. Sin embargo, no podemos repetir los mismos valores para $b$ y $d$ (pues saldría la misma matriz y eso no es coherente con los experimentos). Esta vez tomamos $b = e^{i\beta}/\sqrt{2}$ y $d = -e^{i\beta}/\sqrt{2}$ (que cumplen con la condición de ortogonalidad). Para determinar $\beta$, consideramos el cambio de base de $B_y$ a $B_x$

$$C_{yx} = C_{zx}C_{yz} = C_{xz}^{-1}C_{yz} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ e^{i\beta} & -e^{i\beta}\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1+e^{i\beta} & 1-e^{i\beta}\\ 1-e^{i\beta} & 1+e^{i\beta}\end{pmatrix}.$$

De la misma manera que antes, $|y\pm\rangle$ se detecta como $|x\pm\rangle$ la mitad de las veces $\Rightarrow$ $|a|^2 = |b|^2 = |c|^2 = |d|^2 = 1/2$, por tanto: $|1 \pm e^{i\beta}/2|^2 = 1/2$ y obtenemos $e^{i\beta} = \pm i$, luego $b = i$ y $d = -i$.

Por tanto, las otras dos direcciones usuales, $x$ e $y$, quedan, referidos a la base $B_z$, como

$$|x+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}, \qquad |x-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix},$$

$$|y+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}, \qquad |y-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -i\end{pmatrix}.$$

En particular, por ejemplo, tenemos que

$$\begin{cases} |y+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1\cdot|z+\rangle + i\cdot|z-\rangle) \\ |y-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1\cdot|z+\rangle - i\cdot|z-\rangle) \end{cases}$$

Es decir, tenemos las matrices de cambio de base de $B_x$ o $B_y$ a $B_z$

$$C_{xz} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}, \qquad C_{yz} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ i & -i\end{pmatrix}.$$

Una vez llegados a este punto, los operadores de espín (que describen al espín), $S_x$, $S_y$ y $S_z$, son matrices cuyos autovectores son los vectores antes hallados y sus autovalores son $\hbar/2$ y $-\hbar/2$ (recordemos que estos son los dos únicos valores que puede tomar el espín). Sin embargo, es útil trabajar primero con autovalores 1 y $-1$. Así pues, tenemos

$$\sigma_z = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}, \qquad \sigma_x = C_{xz}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}C_{xz}^{-1}, \qquad \sigma_y = C_{yz}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}C_{yz}^{-1}.$$

Obteniendo lo que se conoce como *matrices de Pauli*

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

**Notación:** Con frecuencia usaremos $\sigma_1$, $\sigma_2$ y $\sigma_3$ para referirnos a $\sigma_x$, $\sigma_y$ $\sigma_z$, respectivamente.

Así, los operadores de espín son estas mismas matrices pero multiplicadas por $\hbar/2$. Desde un punto de vista matemático, las matrices de Pauli son matrices que forman una base del espacio vectorial sobre $\mathbb{R}$ de matrices hermíticas $2\times 2$ de traza cero.

En general, para una dirección unitaria $\vec{n} = (n_x, x_y, n_z)$, tenemos que su operador es $n_xS_x + n_yS_y + n_zS_z = \frac{\hbar}{2}(n_x\sigma_x + n_y\sigma_y + n_z\sigma_z)$. Si escribimos $\vec{n}$ en coordenadas esféricas, $\vec{n} = (\cos\phi\sin\theta, \sin\phi\sin\theta, \cos\theta)$, llegamos a

$$|n+\rangle = \begin{pmatrix}\cos(\frac{\theta}{2})\\ e^{i\phi}\sin(\frac{\theta}{2})\end{pmatrix}, \qquad |n-\rangle = \begin{pmatrix}-e^{-i\phi}\sin(\frac{\theta}{2})\\ \cos(\frac{\theta}{2})\end{pmatrix}.$$

Es decir:

$$\begin{cases} |n+\rangle = \cos(\frac{\theta}{2})\cdot|z+\rangle + e^{i\phi}\sin(\frac{\theta}{2})\cdot|z-\rangle \\ |n-\rangle = -e^{i\phi}\sin(\frac{\theta}{2})\cdot|z+\rangle + \cos(\frac{\theta}{2})\cdot|z-\rangle \end{cases} \tag{6}$$

## 3.1. Ejemplo con tres máquinas de Stern-Gerlach

Vemos ahora un ejemplo con un poco más de complejidad. Sea esta sucesión de máquinas de Stern-Gerlach: SGz $\Rightarrow$ SGn $\Rightarrow$ SGz, donde a la primera máquina se le suministra un número $N$ (grande) de electrones con espín aleatorio y cada máquina se conecta a la salida $+$ de la anterior y $\vec{n}$ corresponde a $\phi = 0$ y $\theta = \pi/3$. Queremos calcular qué fracción de $N$ sale por $+$ y por $-$ en la última máquina, SGz. Entonces:

**(a)** Está claro que de la primera máquina saldrán $N/2$ de $|z+\rangle$ y $N/2$ de $|z-\rangle$.

**(b)** Ahora, para la dirección $\vec{n}$, tenemos

$$|n+\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\pi}{6}) \\ \sin(\frac{\pi}{6}) \end{pmatrix}, \qquad |n-\rangle = \begin{pmatrix} -\sin(\frac{\pi}{6}) \\ \cos(\frac{\pi}{6}) \end{pmatrix}.$$

O lo que es equivalente

$$\begin{aligned} |n+\rangle &= \quad \cos\left(\frac{\pi}{6}\right)|z+\rangle + \sin\left(\frac{\pi}{6}\right)|z-\rangle, \\ |n-\rangle &= -\sin\left(\frac{\pi}{6}\right)|z+\rangle + \cos\left(\frac{\pi}{6}\right)|z-\rangle. \end{aligned}$$

Entonces, podemos calcular la función de onda de los $|z+\rangle$ de la primera máquina que pasan por SGn. Si multiplicamos la primera por $-\cos(\frac{\pi}{6})$ y la segunda por $\sin(\frac{\pi}{6})$, y las sumamos, tenemos que $|z+\rangle = \cos(\frac{\pi}{6})|n+\rangle - \sin(\frac{\pi}{6})|n-\rangle$. Entonces la probabilidad de que resulte $|n+\rangle$ es $\cos^2(\frac{\pi}{6}) = \frac{3}{4}$.

**(c)** Entonces, por (b), tenemos ya calculado como acaba el estado $|n+\rangle$ al pasar por la última máquina SGz

$$\begin{aligned} \#+ &= N \times \frac{1}{2} \times \cos^2\left(\frac{\pi}{6}\right) \times \cos^2\left(\frac{\pi}{6}\right) = N \times \frac{1}{2} \times \frac{3}{4} \times \frac{3}{4} = \frac{9N}{32}, \\ \#- &= N \times \frac{1}{2} \times \cos^2\left(\frac{\pi}{6}\right) \times \sin^2\left(\frac{\pi}{6}\right) = N \times \frac{1}{2} \times \frac{3}{4} \times \frac{1}{4} = \frac{3N}{32}. \end{aligned}$$

## 3.2. Representación de Bloch

La representación de Bloch es la identificación de un punto de la esfera unidad con un estado puro, de la siguiente forma

$$|n\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|z+\rangle + e^{i\phi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|z-\rangle.$$

Donde $0 \leq \theta \leq 2\pi$ y $0 \leq \phi < 2\pi$ y a $|n\rangle$ se le suele llamar *qubit*. Vemos que coincide con la primera expresión de (6) y además tenemos las siguientes propiedades [Glen]:

- **Ortogonalidad**. Si $|\psi\rangle$ es un estado que corresponde a un punto en la esfera y $|\chi\rangle$ es su antípoda en la esfera, $\langle\chi|\psi\rangle = 0$ (esta notación denota al producto escalar usual).

- **Rotaciones**. Las matrices $R_j \equiv e^{-i\theta\sigma_j/2}$, donde $\sigma_i$ es una de las tres matrices de Pauli, nos da una rotación de ángulo $\theta$ del vector $\vec{n}$ alrededor del eje al que corresponde $\sigma_j$.

# 4. Sistemas de dos estados

Cuando uno tiene un imán en un campo magnético uniforme, este tiende a girar como una peonza en ausencia de rozamiento (movimiento de precesión). Cuando este imán es generado por partículas cargadas en movimiento, lo que produce este fenómeno es la fuerza de Lorentz. Un hecho curioso es que se llega al mismo fenómeno de precesión (y los mismos valores numéricos de la frecuencia) tanto con argumentos cuánticos como clásicos. Buscando una analogía con lo clásico, la física nos dice que, en la dirección $x$, el operador hamiltoniano (la energía) es

$$H = -\gamma B S_x = \begin{pmatrix} 0 & -\gamma\hbar B/2 \\ -\gamma\hbar B/2 & 0 \end{pmatrix}$$

donde $\gamma$ es una constante de proporcionalidad entre la fuerza del imán y el momento angular, $B$ es el campo magnético en la dirección $x$. Con este hamiltoniano, el operador de evolución temporal resultar ser

$$U(t) = e^{-itH/\hbar} = e^{i(\frac{\gamma B}{2}t)(\frac{-2}{\gamma\hbar B}H)} \overset{*}{=} I\cos(\frac{t\gamma B}{2}) - i\frac{2}{\gamma\hbar B}H\sin(\frac{t\gamma B}{2}).$$

En * se usa que si $A^2 = I$, entonces se cumple que $e^{i\tau A} = I\cos\tau + iA\sin\tau$. Por ejemplo, para una partícula que parte del estado $|+\rangle$ $(= |z+\rangle)$, podemos ver que

$$U(t)|+\rangle = U(t)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\frac{t\gamma B}{2}) \\ i\sin(\frac{t\gamma B}{2}) \end{pmatrix} = \cos(\frac{t\gamma B}{2})|+\rangle + i\sin(\frac{t\gamma B}{2})|-\rangle$$

y observamos que en los tiempos $t = \frac{\pi(2k+1)}{\gamma B}$ obtenemos siempre el estado $|-\rangle$ o probabilidad $p = \cos^2(\frac{t_p\gamma B}{2})$ de que salga el estado $|+\rangle$ en el tiempo $t_p$. Por otra parte, si partimos de la condición inicial $|x+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$

$$U(t)|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{\frac{t\gamma Bi}{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{\frac{t\gamma Bi}{2}}(|+\rangle + |-\rangle).$$

Como $|e^{\frac{t\gamma Bi}{2}}| = 1$, el estado $|x+\rangle$ no se ve afectado por el campo magnético $B$ en la dirección $x$ (en otras palabras, el módulo de los coeficientes no varía).

Hasta ahora teníamos un campo magnético en la dirección $x$, pero en general, un campo magnético constante se representa por un vector de la forma $\vec{B} = (B_1, B_2, B_3)$, llamado inducción magnética. Esto nos da el siguiente hamiltoniano

$$H = -\gamma\sum_{j=1}^{3} B_j S_j = -\frac{\gamma\hbar}{2}\sum_{j=1}^{3} B_j\sigma_j.$$

Ahora, si consideremos $\vec{B} = (0,0,B)$, al que corresponde el siguiente operador de evolución temporal

$$U(t) = \begin{pmatrix} e^{it\gamma B/2} & 0 \\ 0 & e^{-it\gamma B/2} \end{pmatrix}$$

podemos comprobar la evolución del estado correspondiente al vector de coordenadas esféricas $(\theta_0, \phi_0)$ en la esfera de Bloch, $|\Psi\rangle = \cos(\frac{\theta_0}{2})|+\rangle + e^{i\phi_0}\sin(\frac{\theta_0}{2})$

$$U(t)|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} e^{it\gamma B/2}\cos(\frac{\theta_0}{2}) \\ e^{-it\gamma B/2}e^{i\phi_0}\sin(\frac{\theta_0}{2}) \end{pmatrix} = e^{it\gamma B/2}\Big(\cos(\frac{\theta_0}{2})|+\rangle + e^{i(\phi_0 - t\gamma B)}\sin(\frac{\theta_0}{2})|-\rangle\Big)$$

de donde es claro que $\theta = \theta_0$ y $\phi = \phi_0 - t\gamma B/2$, es decir, tenemos esta evolución de las coordenadas con el tiempo $(\theta, \phi) = (\theta_0, \phi_0 - t\gamma B/2)$, que es como el giro una peonza.

De forma más general, estos hamiltonianos que actúan sobre $\mathbb{C}^2$ corresponden a sistemas de dos estados ($|+\rangle$ y $|-\rangle$, son los dos estados). El espín es solo un caso particular de los sistemas de dos estados. Veamos ahora el caso más general de un hamiltoniano de un sistema de dos estados: $H = aI + b\sigma_1 + c\sigma_2 + d\sigma_3$ y calculemos la frecuencia del sistema. Entonces, tenemos que $H = A + B$, con

$$A = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & a \end{pmatrix} \qquad B = \begin{pmatrix} d & b - ic \\ b + ic & -d \end{pmatrix}$$

$A$ y $B$ conmutan, luego $e^H = e^A e^B$. Además, $B^2 = (b^2 + c^2 + d^2)I$. Luego, si llamamos $R = \sqrt{b^2 + c^2 + d^2}$, resulta que

$$e^{-itB/\hbar} = I\cos(\frac{R}{\hbar}t) - i\frac{1}{R}B\sin(\frac{R}{\hbar}t) = \begin{pmatrix} \cos(\frac{R}{\hbar}t) - di\frac{1}{R}\sin(\frac{R}{\hbar}t) & (-bi - c)\frac{1}{R}\sin(\frac{R}{\hbar}t) \\ (-bi + c)\frac{1}{R}\sin(\frac{R}{\hbar}t) & \cos(\frac{R}{\hbar}t) + di\frac{1}{R}\sin(\frac{R}{\hbar}t) \end{pmatrix}.$$

Y como $A$ es diagonal

$$e^{-itA/\hbar} = \begin{pmatrix} e^{-ita/\hbar} & 0 \\ 0 & e^{-ita/\hbar} \end{pmatrix} = e^{-ita/\hbar}I.$$

Resultando

$$e^H = e^{-ita/\hbar}e^{-itB/\hbar}.$$

Si lo aplicamos a una función de onda (con coeficientes $x, y$), y calculamos la probabilidad de que salga $|+\rangle$

$$\begin{aligned}
&\left|x\Big(\cos(\frac{R}{\hbar}t) - di\frac{1}{R}\sin(\frac{R}{\hbar}t)\Big) + y\Big((-bi - c)\frac{1}{R}\sin(\frac{R}{\hbar}t)\Big)\right|^2 = \\
&= \left|[x\cos(\frac{R}{\hbar}t) - yc\frac{1}{R}\sin(\frac{R}{\hbar}t)] - i[xd\frac{1}{R}\sin(\frac{R}{\hbar}t) + yb\frac{1}{R}\sin(\frac{R}{\hbar}t)]\right|^2 = \\
&= \left|[x\cos(\frac{R}{\hbar}t) - yc\frac{1}{R}\sin(\frac{R}{\hbar}t)] - i[(xd + yb)\frac{1}{R}\sin(\frac{R}{\hbar}t)]\right|^2.
\end{aligned}$$

Ahora calculamos el módulo

$$\Big[x^2\cos^2(\frac{R}{\hbar}t)+y^2c^2\frac{1}{R^2}\sin^2(\frac{R}{\hbar}t)-2xyc\frac{1}{R}\cos(\frac{R}{\hbar}t)\sin(\frac{R}{\hbar}t)\Big]+\Big[(xd+yb)^2\frac{1}{R^2}\sin^2(\frac{R}{\hbar}t)\Big].$$

Escribimos esta expresión en términos de $\cos^2(\frac{R}{\hbar}t)$, quedando

$$\Big[x^2\cos^2(\frac{R}{\hbar}t)+y^2c^2\frac{1}{R^2}\Big(1-\cos^2(\frac{R}{\hbar}t)\Big)+2xyc\frac{1}{R}\cos(\frac{R}{\hbar}t)\sin(\frac{R}{\hbar}t)\Big]+$$
$$+\Big[(xd+yb)^2\frac{1}{R^2}\Big(1-\cos^2(\frac{R}{\hbar}t)\Big)\Big].$$

La expresión está "llena" de $\cos^2(t)=\frac{1-\cos(2t)}{2}$. Por otro lado $\cos(t)\sin(t)=\frac{\sin(2t)}{2}$, que tiene el mismo periodo, $k\pi$, que $\cos^2(t)$, por tanto, el periodo es:

$$T=\frac{\pi\hbar}{R}.$$

Y la frecuencia, es el inverso de $T$. Llegamos a la misma conclusión si calculamos la probabilidad de $|-\rangle$. Se ha supuesto $x$, $y$ reales, pero en realidad tenemos todos los casos posibles. Si $x=1$, $y=0$ ($x=0$, $y=1$), tenemos que la función de onda es $|+\rangle$ ($|-\rangle$). El resto de casos son combinación de estos dos (como sabemos por la representación de Bloch), y esta combinación no depende de $t$, luego la frecuencia no cambia, sea cual sea la función de onda a la que le aplicamos $e^H$.

Por otra parte, cuando tenemos el problema $\vec{x}'(t)=A(t)\vec{x}(t)$, con A una matriz, en general, la solución **no** es $\vec{x}(t)=\exp\Big(\int_0^t A(u)\ du\Big)\vec{x}_0$. Son numerosos los ejemplos (o mejor dicho, contraejemplos) donde esa no es la solución. Sin embargo, una condición suficiente para que ocurra es que $A(t)$ y $A(\tau)$ conmuten para cualesquiera $t,\tau$.

De modo que, para nuestro caso, la ecuación de Schrödinger para sistemas de dos estados

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=H\Psi.$$

La solución, en general, no es la exponencial de la matriz $-itH/\hbar$, si $H$ depende del tiempo, porque no se garantiza la conmutatividad de $H(t)$ y $H(\tau)$. Sin embargo, tenemos un teorema que nos da la solución al problema (aunque $H$ no conmute), si se cumplen ciertas hipótesis.

**Teorema 2** *Sea una matriz $\widetilde{A}(t)$ tal que $\widetilde{A}(t)=-B^{-1}(t)B'(t)+B^{-1}(t)A(t)B(t)$, donde $B(t)$ es una matriz invertible. Si $[\widetilde{A}(t),\widetilde{A}(\tau)]=0$ para cualesquiera $t,\tau$. Donde $[P,Q]=QP-PQ$ es el conmutador. Entonces, la EDO $\vec{x}'(t)=A(t)\vec{x}(t)$, tiene como solución:*

$$\vec{x}(t)=B(t)\exp\Big(\int_0^t\widetilde{A}(u)\ du\Big)B^{-1}(0)\vec{x}_0.$$

Demostración: Primero, observamos que la integral se aproxima por una suma de Riemann. Tomamos el límite de la suma

$$\int_0^t \widetilde{A}(u)du = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \widetilde{A}(u_i).$$

Entonces, si $[\widetilde{A}(t), \widetilde{A}(\tau)] = 0$, para todo $t, \tau$

$$\widetilde{A}(t) \int_0^t \widetilde{A}(u)du = \widetilde{A}(t) \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \widetilde{A}(u_i) = \Big[ \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \widetilde{A}(u_i) \Big] \widetilde{A}(t) = \Big[ \int_0^t \widetilde{A}(u)du \Big] \widetilde{A}(t).$$

Es decir, obtenemos este resultado: si $[\widetilde{A}(t), \widetilde{A}(\tau)] = 0 \Rightarrow [\widetilde{A}(t), \int_0^t \widetilde{A}(u)\, du]$.

Una vez llegados a este punto, vamos a ver lo siguiente: $\vec{y}\,'(t) = \widetilde{A}(t)\vec{y}(t)$ tiene como solución $\vec{y} = \exp\Big(\int_0^t \widetilde{A}(u)\, du\Big)\vec{y}_0$. Aquí se usará la propiedad de que $[\widetilde{A}(t), \int_0^t \widetilde{A}(u)\, du] = 0$, en *, ya que, por ejemplo $(A^3)' = A'AA + AA'A + AAA'$, y si $[A, A'] = 0$, entonces $(A^3)' = 3A^2A'$, es decir, se preserva la regla de la cadena. Como suponemos que $[\widetilde{A}(t), \widetilde{A}(\tau)] = 0$, tenemos garantizada dicha propiedad.

$$\frac{d}{dt}\vec{y}(t) = \frac{d}{dt} \exp\Big(\int_0^t \widetilde{A}(u)\, du\Big)\vec{x}_0 = \frac{d}{dt} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Big(\int_0^t \widetilde{A}(u)\, du\Big)^n}{n!} \vec{x}_0 = \frac{d}{dt} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\Big(\int_0^t \widetilde{A}(u)\, du\Big)^n}{n!} \vec{x}_0 \stackrel{*}{=}$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n\widetilde{A}(t)\Big(\int_0^t \widetilde{A}(u)\, du\Big)^{n-1}}{n!} \vec{x}_0 = \widetilde{A}(t) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Big(\int_0^t \widetilde{A}(u)\, du\Big)^n}{n!} \vec{x}_0 = \widetilde{A}(t)\vec{y}(t).$$

Ahora, si hacemos el cambio de variables $\vec{x}(t) = B(t)\vec{y}(t) \Rightarrow \vec{x}_0 = B(0)\vec{y}_0$

$$\begin{aligned}
\vec{y}\,'(t) = \widetilde{A}(t)\vec{y}(t) &\Leftrightarrow B(t)\vec{y}\,'(t) = B(t)\widetilde{A}(t)\vec{y}(t) \\
&\Leftrightarrow B(t)\vec{y}\,'(t) = B(t)[-B^{-1}(t)B'(t) + B^{-1}(t)A(t)B(t)]\vec{y}(t) \\
&\Leftrightarrow B(t)\vec{y}\,'(t) = [-B'(t) + A(t)B(t)]\vec{y}(t) \\
&\Leftrightarrow B(t)\vec{y}\,'(t) + B'(t)\vec{y}(t) = A(t)B(t)\vec{y}(t) \\
&\Leftrightarrow (B(t)\vec{y}(t))' = A(t)B(t)\vec{y}(t) \\
&\Leftrightarrow \vec{x}\,' = A(t)\vec{x}.
\end{aligned}$$

Y además:

$$\vec{x}(t) = B(t) \exp\Big(\int_0^t \widetilde{A}(u)\, du\Big) B^{-1}(0)\vec{x}_0.$$

■

## 4.1. Resonancia magnética nuclear

A grandes rasgos, una resonancia magnética nuclear se sirve del movimiento de precesión de los protones, que poseen espín, al someterlos a un campo magnético intenso, junto con otro mucho más débil, pero variable (producido por ondas de radio). Esto hace que emitan ondas electromagnéticas que son detectables y permiten crear una imagen en blanco y negro. Por ejemplo, el campo magnético intenso puede estar en la dirección $z$, $\vec{B} = (0, 0, B_0)$ y el débil en el plano $xy$ oscilando armónicamente $\vec{B} = (B_1\cos(\omega t), -B_1\sin(\omega t), 0)$, con $\omega = cte > 0$.

Si tomamos la matriz $B(t) = e^{i\omega t\sigma_z/2}$, con lo que

$$\begin{aligned}\widetilde{A}(t) &= -B^{-1}(t)B'(t) + B^{-1}(t)A(t)B(t) = -\begin{pmatrix} e^{-i\omega t/2} & 0 \\ 0 & e^{i\omega t/2}\end{pmatrix}\frac{i\omega}{2}\begin{pmatrix} e^{i\omega t/2} & 0 \\ 0 & -e^{-i\omega t/2}\end{pmatrix} + \\ &+ \begin{pmatrix} e^{-i\omega t/2} & 0 \\ 0 & e^{i\omega t/2}\end{pmatrix}\frac{i}{2}\begin{pmatrix} v_0 & v_1 e^{i\omega t} \\ v_1 e^{-i\omega t} & -v_0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} e^{i\omega t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega t/2}\end{pmatrix} = \frac{-i\omega}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1\end{pmatrix} + \\ &+ \frac{i}{2}\begin{pmatrix} v_0 & v_1 \\ v_1 & -v_0\end{pmatrix} = \frac{-i\omega}{2}\sigma_z + \frac{i}{2}(v_0\sigma_z + v_1\sigma_x) = \frac{i}{2}(v_1\sigma_x + (v_0 - \omega)\sigma_z).\end{aligned}$$

Observamos que $\widetilde{A}$ no depende del tiempo. Entonces, el operador de evolución temporal es

$$\begin{aligned}U(t) &= B(t)\exp\Big(\int_0^t \widetilde{A}(u)\,du\Big)B^{-1}(0) = B(t)\exp(\widetilde{A}t)B^{-1}(0) = e^{i\omega t\sigma_z/2}\exp(\widetilde{A}t)I = \\ &= e^{i\omega t\sigma_z/2}\exp\left(i\Big(\frac{2}{iL}\widetilde{A}\Big)\Big(\frac{tL}{2}\Big)\right) \overset{*}{=} e^{i\omega t\sigma_z/2}\Big[I\cos(\frac{tL}{2}) + i\frac{2}{L}\widetilde{A}\sin(\frac{tL}{2})\Big] = \\ &= e^{i\omega t\sigma_z/2}\Big[I\cos(\frac{tL}{2}) + \frac{i}{L}(v_1\sigma_x + (v_0 - \omega)\sigma_z)\sin(\frac{tL}{2})\Big].\end{aligned}$$

Donde $L = \sqrt{v_1^2 + (v_0 - \omega)^2}$. En $*$ se usa que si $A^2 = I$, entonces se cumple que $e^{i\tau A} = I\cos\tau + iA\sin\tau$.

Ahora podemos hacer dos observaciones. Si $v_1 \ll v_0$ y $\omega \ll v_0$, entonces tenemos que $\frac{v_1}{L} \approx 0$ y que $\frac{v_0 - \omega}{L} \approx 1$, de modo que

$$\begin{aligned}U(t) &\approx e^{i\omega t\sigma_z/2}\Big[I\cos(\frac{tL}{2}) + i\sigma_z\sin(\frac{tL}{2})\Big] = e^{i\omega t\sigma_z/2}e^{iLt\sigma_z/2} = e^{i(\omega+L)t\sigma_z/2} = \\ &= I\cos\big(\frac{t}{2}(\omega + L)\big) + i\sigma_z\sin\big(\frac{t}{2}(\omega + L)\big) := U_1(t).\end{aligned}$$

Por otra parte, si $v_0 = \omega$ (que es cuando se produce resonancia), tenemos que $\frac{v_1}{L} \approx 1$ y que $\frac{v_0 - \omega}{L} \approx 0$, resultando

$$\begin{aligned} U(t) &\approx e^{iv_0 t\sigma_z/2}\Big[I\cos(\frac{tv_1}{2}) + i\sigma_x\sin(\frac{tv_1}{2})\Big] = \\ &= \Big(I\cos\big(\frac{v_0 t}{2}\big) + i\sigma_z\sin\big(\frac{v_0 t}{2}\big)\Big)\Big(I\cos\big(\frac{v_1 t}{2}\big) + i\sigma_x\sin\big(\frac{v_1 t}{2}\big)\Big) := U_2(t). \end{aligned}$$

Bajo estas hipótesis, podemos ver que

$$U_1(t)|+\rangle = \begin{pmatrix} e^{i\omega t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega t/2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\omega t/2} \\ 0 \end{pmatrix} = e^{i\omega t/2}|+\rangle + 0|-\rangle.$$

Lo que corresponde al vector $(0,0,1)$ en la esfera de Bloch. Por otra parte, con las condiciones de $t$ cercano a $\frac{\pi}{2v_1}$ y $v_0 t$ variando, llegamos a que

$$\begin{aligned} U_2(t)|+\rangle &= \begin{pmatrix} e^{iv_0 t/2} & 0 \\ 0 & e^{-iv_0 t/2} \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{iv_0 t/2} \\ ie^{-iv_0 t/2} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{iv_0 t/2}\begin{pmatrix} 1 \\ ie^{-iv_0 t} \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}e^{iv_0 t/2}\big(|+\rangle + ie^{-iv_0 t}|-\rangle\big) \end{aligned}$$

que en la esfera de Bloch corresponde a un vector que gira en el plano $XY$. Por una parte, que se encuentra en el plano $XY$ se debe a que la probabilidad tanto de $|+\rangle$ como de $|-\rangle$ es $\frac{1}{2}$, constante en el tiempo. Mientras que el giro se debe a las exponenciales, que dependen del tiempo (luego hay movimiento). Todo esto nos indica que cuando se produce resonancia, el estado $|+\rangle$ oscila fuertemente mientras que si no se produce resonancia, permanece casi constante.

# 5. Productos tensoriales y estados entrelazados

Sean dos espacios vectoriales $V$ y $W$ con bases $\{\vec{v}_j\}_{j=1}^n$ y $\{\vec{w}_j\}_{i=1}^m$, respectivamente. El espacio denotado por $V \otimes W$ con base $\{\vec{v}_j \otimes \vec{w}_i\}_{j,i=1}^{n,m}$ se denomina producto tensorial de $V$ y $W$. Aquí $\vec{v}_j \otimes \vec{w}_i$ es una expresión formal y solo se supone que $\otimes$ es bilineal. Las dos principales propiedades, que vamos usar para el *entrelazamiento* y la teleportación cuántica, son, la primera referida al producto escalar en $V \otimes W$: $(\vec{v} \otimes \vec{w}) \cdot (\vec{a} \otimes \vec{b}) = (\vec{v} \cdot \vec{a})(\vec{w} \cdot \vec{b})$, con $\vec{v}, \vec{a} \in V$ y $\vec{w}, \vec{b} \in W$. La segunda propiedad es que $\otimes$ es distributivo, es decir, $(\vec{v} + \vec{w}) \otimes \vec{a} = \vec{v} \otimes \vec{a} + \vec{w} \otimes \vec{a}$. Funciona igual si intercambiamos $\vec{a}$ y el paréntesis (y haciendo que pertenezcan al espacio que corresponda).

Esta estructura de producto tensorial explica bien lo que en la física cuántica se denomina *entrelazamiento*. Dos (o más) estados **no** están entrelazados si un cierto estado se corresponde con multiplicar esos estados independientes tensorialmente. Al contrario, si un estado **no** corresponde con multiplicar dos (o más) estados independientes tensorialmente, se dice que dichos estados están entrelazados (en cierto sentido, son inseparables). Veámoslo más claro con la siguiente proposición, referente a dos partículas.

**Proposición 1** *El estado* $|\Psi\rangle = a_{11}|+\rangle \otimes |+\rangle + a_{12}|+\rangle \otimes |-\rangle + a_{21}|-\rangle \otimes |+\rangle + a_{22}|-\rangle \otimes |-\rangle$ *está entrelazado si y solo si* $\det(a_{ij}) \neq 0$.

<u>Demostración:</u> Para ver que un estado no está entrelazado, multipliquemos dos partículas independientes, denotadas por $|\phi_1\rangle = a|+\rangle + b|-\rangle$ y $|\phi_2\rangle = c|+\rangle + d|-\rangle$. Esto es

$$|\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle = ac|+\rangle \otimes |+\rangle + ad|+\rangle \otimes |-\rangle + bc|-\rangle \otimes |+\rangle + bd|-\rangle \otimes |-\rangle.$$

Por tanto, si $|\Psi\rangle$ no está entrelazado, tendremos que: $\begin{cases} ac = a_{11} & ad = a_{12} \\ bc = a_{21} & bd = a_{22} \end{cases}$

Es fácil ver que $a_{11}a_{22} = (ac)(bd) = abcd = (ad)(bc) = a_{12}a_{21}$, o dicho de otra forma, $\det(a_{ij}) = 0$. De modo que $\det(a_{ij}) \neq 0 \Rightarrow |\Psi\rangle$ está entrelazado. Por otro lado, como solo hemos usado igualdades (ir de abajo a arriba para demostrar la otra implicación, también por el contrarrecíproco), es un si y solo si. Solo hace falta notar que, fijado por ejemplo $a$, podemos determinar $b$, $c$ y $d$ a partir de los $a_{ij}$. ■

Consideremos el estado $|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\vec{n}+\rangle \otimes |\vec{n}-\rangle + e^{i\varphi}|\vec{n}-\rangle \otimes |\vec{n}+\rangle)$, el cual representa la desintegración de una partícula con espín cero en dos partículas con espines opuestos. Este estado, que representa a dos partículas, tiene dos posibilidades: primera partícula con espín $+$ y la segunda con espín $-$, o a la inversa, $-$ y $+$. Por otra parte, dada la simetría entre las partículas, tenemos que $e^{i\varphi} = \pm 1$, ya que al intercambiar las partículas, tenemos que el estado $|s\rangle$ debería ser $\pm|s\rangle$. Por cuestiones de la física (principio de exclusión de Pauli), en este caso se elige $-$. Es más, podemos prescindir de la dirección $\vec{n}$. Veámoslo

$$
\begin{aligned}
|\vec{n}+\rangle \otimes |\vec{n}-\rangle &= \frac{1}{2}(|z-\rangle \otimes |z-\rangle - |z+\rangle \otimes |z+\rangle)e^{i\phi}\cos\theta + \\
&\quad + \cos^2\frac{\theta}{2}|z+\rangle \otimes |z-\rangle - \sin^2\frac{\theta}{2}|z-\rangle \otimes |z+\rangle \\
|\vec{n}+\rangle \otimes |\vec{n}-\rangle &= \frac{1}{2}(|z-\rangle \otimes |z-\rangle - |z+\rangle \otimes |z+\rangle)e^{i\phi}\cos\theta - \\
&\quad - \sin^2\frac{\theta}{2}|z+\rangle \otimes |z-\rangle + \cos^2\frac{\theta}{2}|z-\rangle \otimes |z+\rangle \\
\Rightarrow |s\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\vec{n}+\rangle \otimes |\vec{n}-\rangle - |\vec{n}-\rangle \otimes |\vec{n}+\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z+\rangle \otimes |z-\rangle - |z-\rangle \otimes |z+\rangle).
\end{aligned}
$$

Al estado

$$
|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \otimes |-\rangle - |-\rangle \otimes |+\rangle) \tag{7}
$$

se le llama singlet (obsérvese que podemos prescindir, y prescindimos, de dar una dirección $\vec{n}$). Además, por la proposición, vemos que $|s\rangle$ representa un estado entrelazado. Este tema del entrelazamiento cuántico lleva a dos temas que, junto a la interpretación de Copenhague, trataremos a continuación. En resumidas cuentas, la interpretación afirma que en situaciones de entrelazamiento, el colapso afecta a ambas partículas (por supuesto, 'ambas' el caso de que surjan dos partículas de espines opuestos a partir de una de espín cero).

## 5.1. Paradoja Einstein-Podolsky-Rosen (EPR)

Si tenemos una partícula de espín cero y se ha desintegrado en una partícula con espín $+$ y otra con espín $-$, si medimos el espín de una, el espín de otra queda determinado (el espín de la segunda partícula es la otra posibilidad de espín, ya que el momento angular se debe conservar). Recordemos que la interpretación de Copenhague postula que la medición produce el colapso de la función de onda. Esto es lo que lleva a los autores de la paradoja EPR [EPR35] a no creérselo y a sugerir *variables ocultas* que representarían propiedades físicas desconocidas y que explicarían la física cuántica de modo determinista, y que al no tenerlas en cuenta, son las que llevarían a la física cuántica a ser no determinista, es decir, a obtener resultados estadísticos. Por fortuna, Bell [Bel64], en 1964, ideó un experimento que niega la existencia de variables ocultas, el cual, en 1972, se llevó a la práctica, confirmando dicha hipótesis.

Recuperemos el singlet (7). Bell, en su experimento [Bel64], define $A(\vec{a}) = 1$ si al medir espín de la primera partícula en la dirección unitaria $\vec{a} \in \mathbb{R}^3$ resulta $+$ y $A(\vec{a}) = -1$ si resulta $-$. De igual modo, lo hace con $B(\vec{b}) = \pm 1$ para la segunda partícula. Todo esto nos permite calcular unas probabilidades. Fijemos en $|s\rangle$ la dirección $\vec{a}$ (ya hemos visto que da igual cual elegir), resultando $|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\vec{a}+\rangle \otimes |\vec{a}-\rangle - |\vec{a}-\rangle \otimes |\vec{a}+\rangle)$. Comencemos calculando la probabilidad de $A(\vec{a})B(\vec{b}) = 1$. Esto se da cuando la primera partícula tiene espín + en la dirección $\vec{a}$ y la segunda espín + en la dirección $\vec{b}$, o ambas tienen espín − en las direcciones respectivas.

$$(|\vec{a}+\rangle \otimes |\vec{b}+\rangle) \cdot |s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\underbrace{\langle \vec{a}+|\vec{a}+\rangle}_{=1}\langle \vec{b}+|\vec{a}-\rangle - \underbrace{\langle \vec{a}+|\vec{a}-\rangle}_{=0}\langle \vec{b}+|\vec{a}+\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle \vec{b}+|\vec{a}-\rangle$$

$$(|\vec{a}-\rangle \otimes |\vec{b}-\rangle) \cdot |s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\underbrace{\langle \vec{a}-|\vec{a}+\rangle}_{=0}\langle \vec{b}-|\vec{a}-\rangle - \underbrace{\langle \vec{a}-|\vec{a}-\rangle}_{=1}\langle \vec{b}-|\vec{a}+\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle \vec{b}-|\vec{a}+\rangle$$

$$\Rightarrow \mathbb{P}[A(\vec{a})B(\vec{b}) = 1] = |\frac{1}{\sqrt{2}}\langle \vec{b}+|\vec{a}-\rangle|^2 + |\frac{1}{\sqrt{2}}\langle \vec{b}-|\vec{a}+\rangle|^2 = \frac{1}{2}\sin^2\frac{\theta}{2} + \frac{1}{2}\sin^2\frac{\theta}{2} =$$
$$= \sin^2\frac{\theta}{2} = 1 - \cos^2\frac{\theta}{2} = 1 - \frac{1+\cos\theta}{2} = \frac{1-\cos\theta}{2} = \frac{1-\vec{a}\cdot\vec{b}}{2}.$$

Análogamente, para calcular la probabilidad de $A(\vec{a})B(\vec{b}) = -1$, llegamos a que

$$\mathbb{P}[A(\vec{a})B(\vec{b}) = -1] = |\frac{1}{\sqrt{2}}\langle \vec{b}-|\vec{a}-\rangle|^2 + |\frac{1}{\sqrt{2}}\langle \vec{b}+|\vec{a}+\rangle|^2 = \frac{1}{2}\cos^2\frac{\theta}{2} + \frac{1}{2}\cos^2\frac{\theta}{2} =$$
$$= \cos^2\frac{\theta}{2} = \frac{1+\cos\theta}{2} = \frac{1+\vec{a}\cdot\vec{b}}{2}.$$

Con estos resultados, es fácil calcular la esperanza

$$\mathbb{E}[A(\vec{a})B(\vec{b})] = 1 \cdot \frac{1-\vec{a}\cdot\vec{b}}{2} + (-1)\frac{1+\vec{a}\cdot\vec{b}}{2} = -\vec{a}\cdot\vec{b}. \tag{8}$$

Ahora, consideremos $\lambda$ como un parámetro continuo que representa las variables ocultas. Por tanto, tendríamos $A(\vec{a},\lambda)$ y $B(\vec{b},\lambda)$. Por otro lado, si $f(\lambda)$ es la función de densidad de $\lambda$, tenemos también que

$$\mathbb{E}[A(\vec{a},\lambda)B(\vec{b},\lambda)] = \int_\Lambda A(\vec{a},\lambda)B(\vec{b},\lambda)f(\lambda)d\lambda. \tag{9}$$

Es fácil ver que el mínimo, $-1$, se alcanza cuando $\vec{a} = \vec{b}$ si y solo si $A(\vec{a},\lambda) = -B(\vec{a},\lambda)$. Así que podemos reescribir (9) como

$$\mathbb{E}[-A(\vec{a},\lambda)A(\vec{b},\lambda)] = -\int_\Lambda A(\vec{a},\lambda)A(\vec{b},\lambda)f(\lambda)d\lambda.$$

Entonces, si $\vec{c}$ es otra dirección unitaria

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[-A(\vec{a},\lambda)A(\vec{b},\lambda)] - \mathbb{E}[-A(\vec{a},\lambda)A(\vec{c},\lambda)] &= -\int_\Lambda A(\vec{a},\lambda)A(\vec{b},\lambda) - A(\vec{a},\lambda)A(\vec{c},\lambda)f(\lambda)d\lambda = \\ &= \int_\Lambda A(\vec{a},\lambda)A(\vec{b},\lambda)[A(\vec{b},\lambda)A(\vec{c},\lambda) - 1]f(\lambda)d\lambda \\ \Rightarrow |\mathbb{E}[-A(\vec{a},\lambda)A(\vec{b},\lambda)] - \mathbb{E}[-A(\vec{a},\lambda)A(\vec{c},\lambda)]| &\leq \int_\Lambda [1 - A(\vec{b},\lambda)A(\vec{c},\lambda)]f(\lambda)d\lambda = \\ &= 1 + \mathbb{E}[-A(\vec{b},\lambda)A(\vec{c},\lambda)].\end{aligned}$$

Combinando lo anterior con (8), si todo fuera correcto (si las variables ocultas fueran la 'solución a la física cuántica'), llegaríamos a la expresión

$$1 - \vec{b}\cdot\vec{c} \geq |\vec{a}\cdot\vec{b} - \vec{a}\cdot\vec{c}| = |\vec{a}\cdot(\vec{b}-\vec{c})|.$$

Pero lo anterior no es cierto (es la llamada *desigualdad de Bell*, a veces, *teorema de Bell*, a pesar de ser falso). **Contraejemplo**: consideremos los vectores unitarios $\vec{a} = (0,0,1)$, $\vec{b} = (\sqrt{3}/2, 0, 1/2)$ y $\vec{c} = (\sqrt{3}/2, 0, -1/2)$. Claramente llegamos a una contradicción (¡¡¡ $\frac{1}{2} \geq 1$ !!!), luego no pueden existir variables ocultas, tal y como habíamos supuesto.

## 5.2. Teleportación cuántica

'Clásicamente' (o casi más bien en la ciencia ficción) el teletransporte consiste en que tenemos un objeto y de alguna manera desaparece de aquí y aparece en otro lugar, siendo el mismo objeto (o ser vivo, como una persona) el que aparece allí. Sin embargo, en la mecánica cuántica, la teleportación se parece más a la clonación (digamos, una clonación cuántica, ya que el original queda alterado, para diferenciarlo un poco de la clonación basada en el ADN) o incluso a un manual de instrucciones para montar un mueble o un libro de recetas de cocina. No se trata de transmitir materia ni energía a una cierta distancia, sino más bien se pretende recopilar la información (posición y estado de los átomos) del objeto de *aquí*, para posteriormente con esa información hacer un objeto de *allí* idéntico (sin llegar a ser estrictamente el mismo, aunque sea idéntico, ya que sería crearía con materia de *allí*). Para esta tarea, nos servimos del entrelazamiento cuántico para conseguirlo. Es decir, si lo usamos con objetos, podíamos copiar objetos, pero, por ejemplo, con personas, surgen los problemas, ya que (quizás) habría que eliminar al original...

Vamos con un ejemplo para ilustrar un poco la teleportación cuántica. Supongamos que tenemos una partícula 1, con estado de espín

$$|\Psi\rangle = a|+\rangle + b|-\rangle$$

y queremos transmitir la información necesaria para que alguien ponga una partícula 2 en el mismo estado. Como al medir $\Psi$ colapsa, hay que ingeniárselas para poder averiguar $a$ y $b$. Usaremos una partícula de espín cero como en (7), la cual desintegramos para obtener dos partículas de espines opuestos. Una nos la quedamos (será la parícula 0) y la otra la mandamos a donde queremos realizar la teleportación (será la partícula 2). Por tanto, el estado del sistema de tres partículas, 0, 1 y 2, es

$$|K\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \otimes |\Psi\rangle \otimes |-\rangle - |-\rangle \otimes |\Psi\rangle \otimes |+\rangle)$$

donde se supone que la partícula 1 es independiente de la 0 y la 2.

Ahora propondremos cuatro estados de las partículas 0 y 1, los cuales forman una base ortonormal del espacio de estados posibles entre dichas partículas

$$\begin{aligned} |B_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \otimes |-\rangle - |-\rangle \otimes |+\rangle), \qquad & |B_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \otimes |+\rangle - |-\rangle \otimes |-\rangle), \\ |B_2\rangle &= \frac{-i}{\sqrt{2}}(|+\rangle \otimes |+\rangle + |-\rangle \otimes |-\rangle), \qquad & |B_3\rangle &= \frac{-1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \otimes |-\rangle + |-\rangle \otimes |+\rangle). \end{aligned} \tag{10}$$

Intentamos reescribir $|K\rangle$ mediante los cuatro estados anteriores. Vamos a escribir $|B_j\rangle \otimes \sigma_j|\Psi\rangle$, $j = 0, 1, 2, 3$ y $\sigma_j$ son las matrices de Pauli:

$$\begin{aligned} &|B_0\rangle \otimes \sigma_0|\Psi\rangle = |B_0\rangle \otimes (a|+\rangle + b|-\rangle) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a|+\rangle \otimes |-\rangle \otimes |+\rangle - a|-\rangle \otimes |+\rangle \otimes |+\rangle + b|+\rangle \otimes |-\rangle \otimes |-\rangle - b|-\rangle \otimes |+\rangle \otimes |-\rangle), \\ &|B_1\rangle \otimes \sigma_1|\Psi\rangle = |B_1\rangle \otimes (b|+\rangle + a|-\rangle) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(b|+\rangle \otimes |+\rangle \otimes |+\rangle - b|-\rangle \otimes |-\rangle \otimes |+\rangle + a|+\rangle \otimes |+\rangle \otimes |-\rangle - a|-\rangle \otimes |-\rangle \otimes |-\rangle), \\ &|B_2\rangle \otimes \sigma_2|\Psi\rangle = |B_2\rangle \otimes i(-b|+\rangle + a|-\rangle) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-b|+\rangle \otimes |+\rangle \otimes |+\rangle - b|-\rangle \otimes |-\rangle \otimes |+\rangle + a|+\rangle \otimes |+\rangle \otimes |-\rangle + a|-\rangle \otimes |-\rangle \otimes |-\rangle), \\ &|B_3\rangle \otimes \sigma_3|\Psi\rangle = |B_3\rangle \otimes (a|+\rangle - b|-\rangle) = \\ &= \frac{-1}{\sqrt{2}}(a|+\rangle \otimes |-\rangle \otimes |+\rangle + a|-\rangle \otimes |+\rangle \otimes |+\rangle - b|+\rangle \otimes |-\rangle \otimes |-\rangle - b|-\rangle \otimes |+\rangle \otimes |-\rangle), \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \sum_{j=0}^{3} |B_i\rangle \otimes \sigma_j|\Psi\rangle = 2|K\rangle \Leftrightarrow \frac{1}{2}\sum_{j=0}^{3} |B_i\rangle \otimes \sigma_j|\Psi\rangle = |K\rangle.$$

Dado que (10) es una base, los estados formados por las partículas 0 y 1 pueden expresarse como $|E\rangle = \sum_{j=1}^{3} \alpha_j |B_j\rangle$. Ahora, si realizamos una medición sobre $|E\rangle$, este colapsará a un $|B_n\rangle$. Como consecuencia, el estado $|K\rangle$ colapsará a $|B_j\rangle \otimes \sigma_j|\Psi\rangle$. Ahora, es tan fácil como aplicar $\sigma_j$ a la partícula que esté *allí*, ya que $\sigma_j \sigma_j |\Psi\rangle = |\Psi\rangle$ (recordemos que $|\Psi\rangle$ es el estado original, el que queríamos conocer). Con todo esto, la partícula 2 (la de *allí*) ha adquirido el estado deseado, mientras que la partícula 0 (la de *aquí*) ha sido alterada (al medir), pero no ha desaparecido como en la ciencia ficción.

Para mayor detalle, para medir $|E\rangle$ y obtener $|B_n\rangle$, se usa un observable cuya matriz tiene los autovalores 0, 1, 2 y 3 (y el aparato de medida marcará uno de estos valores) y autofunciones (10). En la base dada por $\{|+\rangle \otimes |+\rangle, |+\rangle \otimes |-\rangle, |-\rangle \otimes |+\rangle, |-\rangle \otimes |-\rangle\}$, tenemos que la matriz $M$ del observable es $UDU^{-1} = M$, donde $U$ son las coordenadas de (10) con respecto a la base dada. Resulta

$$M = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & -i & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & -i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 & 0 \\ i & 0 & 0 & i \\ 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & -1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 3 & 3 & 0 \\ 0 & 3 & 3 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}.$$

En cuanto a algunos problemas que puedan surgir en la parte práctica, si el estado inicial evoluciona con el tiempo por la acción de un campo, es posible utilizar los campos adecuados para poder aplicar $\sigma_j$. Por otra parte, la medición en la base dada por (10) también es posible ([Cha15]). En particular, en la práctica se usan fotones y otras partículas subatómicas y se ha conseguido realizar la teleportación a más de 100 km.

# 6. La ecuación de Dirac: origen y relación con el espín.

En esta última parte se trata de ver un fundamento teórico para el espín. Para tal fin, empezamos introduciendo la siguiente fórmula relativista (muy popular si $\vec{p}=\vec{0}$)

$$E^2 = m^2c^4 + \|\vec{p}\|^2c^2 \tag{11}$$

donde $E$ es la energía, $m$ la masa, $c$ la velocidad de la luz en el vacío y $\vec{p}$ el momento. Esta fórmula para la energía conduce a la *ecuación de Klein-Gordon*:

$$\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} - \hbar^2c^2\Delta\Psi + m^2c^4\Psi = 0. \tag{12}$$

Algo de 'justificación' para esto sería pensar en que $e^{i(\vec{p}\cdot\vec{x}-Et)/\hbar}$, que combina las fórmulas de Planck ($E = h\nu$, $\nu$ es la frecuencia, $h$ constante de Planck) y de Broglie ($p = h/\lambda$, $\lambda$ es la longitud de onda), queremos que sea solución:

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = \frac{i^2E^2}{\hbar^2}\Psi = \frac{-m^2c^4 - \|\vec{p}\|^2c^2}{\hbar^2}\Psi \Leftrightarrow \hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = (-m^2c^4 - \|\vec{p}\|^2c^2)\Psi,$$
$$\Delta\Psi = \frac{i^2\|\vec{p}\|^2}{\hbar^2}\Psi \Leftrightarrow \hbar^2c^2\Delta\Psi = -c^2\|\vec{p}\|^2\Psi.$$

Si restamos la segunda expresión a la primera, obtenemos (12).

Schrödinger consiguió obtener (12) pero se quedó con la que ahora lleva su nombre. Dos problemas de (12) son que requiere de más condiciones iniciales para saber la evolución de $\Psi$ y que $\int|\Psi|^2$ no se conserva. Ante esta situación, Dirac trató de buscar una ecuación de primer orden que implicara (12), que es de segundo orden, y que resolviera estos problemas. Dirac propuso

$$\Big(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - i\hbar c\big(\alpha_1\frac{\partial}{\partial x} + \alpha_2\frac{\partial}{\partial y} + \alpha_3\frac{\partial}{\partial z}\big) + \alpha_4mc^2\Big)\Big(i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} -$$
$$-i\hbar c\big(\alpha_1\frac{\partial\Psi}{\partial x} + \alpha_2\frac{\partial\Psi}{\partial y} + \alpha_3\frac{\partial\Psi}{\partial z}\big) + \alpha_4mc^2\Psi\Big) = 0.$$

Se quedó con el segundo paréntesis

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} - i\hbar c\big(\alpha_1\frac{\partial\Psi}{\partial x} + \alpha_2\frac{\partial\Psi}{\partial y} + \alpha_3\frac{\partial\Psi}{\partial z}\big) + \alpha_4mc^2\Psi = 0 \tag{13}$$

con $\alpha_j$ constantes. Teniendo en mente la ecuación de Schrödinger, definimos el hamiltoniano (energía) como

$$H = i\hbar c\big(\alpha_1\frac{\partial}{\partial x} + \alpha_2\frac{\partial}{\partial y} + \alpha_3\frac{\partial}{\partial z}\big) - \alpha_4mc^2. \tag{14}$$

Para que todo lo anterior funcione e implique (12), debemos tener las siguientes relaciones

$$\alpha_j^2 = 1, \qquad (15)$$
$$\alpha_j\alpha_i + \alpha_i\alpha_j = 0.$$

con $i \neq j$ y $i, j \in \{1,2,3,4\}$. Pero (15) no tiene solución, ya que la primera condición exige, al menos, $\alpha_j \neq 0$ y la segunda condición nos exige que al menos un $\alpha_k = 0$ (son números complejos, conmutan, $2\alpha_i\alpha_j = 0$). Sin embargo, Dirac va más allá y sugiere que las $\alpha_j$ sean matrices (hermíticas, para que $H$ lo sea) $4 \times 4$, que es la dimensión para la que aparece la primera solución. Estas matrices no son únicas. A pesar de esto, hay dos elecciones famosas, y la que dio Dirac [Dir28] fue

$$\alpha_j = \begin{pmatrix} O & \sigma_j \\ \sigma_j & O \end{pmatrix}, \quad j = 1,2,3 \qquad \text{y} \qquad \alpha_4 = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & O \\ O & -\mathbb{I} \end{pmatrix}$$

donde $O$ es la matriz nula, $\mathbb{I}$ es la matriz identidad y $\sigma_j$, $j = 1,2,3$ son las matrices de Pauli, todas ellas de dimensión $2 \times 2$. Con esta elección, $\Psi$ toma valores en $\mathbb{C}^4$ y (13) es lo que se conoce como *ecuación de Dirac*. Vamos a ver que esta sí conserva la probabilidad. Denotamos por $A^\dagger$ a la matriz traspuesta conjugada de $A$. Entonces $\Psi^\dagger\Psi = \|\Psi\|^2$ y tenemos en cuenta que las matrices $\alpha_j$ son hermíticas ($\alpha_j^\dagger = \alpha_j$), primero tenemos, a partir de (13), que

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial t} + i\hbar c\Big(\frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial x}\alpha_1 + \frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial y}\alpha_2 + \frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial z}\alpha_3\Big) + mc^2\Psi^\dagger\alpha_4 = 0. \qquad (16)$$

Ahora hacemos la siguiente observación (teniendo en cuenta que las matrices $\alpha_j$ son constantes)

$$\frac{\partial(\Psi^\dagger\alpha_j\Psi)}{\partial t} = \frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial t}\alpha_j\Psi + \Psi^\dagger\alpha_j\frac{\partial\Psi}{\partial t}. \qquad (17)$$

Si despejamos las derivadas con respecto al tiempo en (13) y (16) y multiplicamos la primera (segunda) por la izquierda (derecha) por $\Psi^\dagger$ ($\Psi$), fácilmente obtenemos

$$\Psi^\dagger\frac{\partial\Psi}{\partial t} = c\Big(\Psi^\dagger\alpha_1\frac{\partial\Psi}{\partial x} + \Psi^\dagger\alpha_2\frac{\partial\Psi}{\partial y} + \Psi^\dagger\alpha_3\frac{\partial\Psi}{\partial z}\Big) - mc^2\Psi^\dagger\alpha_4\Psi/(i\hbar),$$
$$\frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial t}\Psi = c\Big(\frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial x}\alpha_1\Psi + \frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial y}\alpha_2\Psi + \frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial z}\alpha_3\Psi\Big) + mc^2\Psi^\dagger\alpha_4\Psi/(i\hbar).$$

Si sumamos las dos últimas expresiones y utilizamos la observación de (17), tenemos

$$\frac{\partial\|\Psi\|^2}{\partial t} = \frac{\partial\Psi^\dagger\Psi}{\partial t} = \Psi^\dagger\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \frac{\partial\Psi^\dagger}{\partial t}\Psi = c\Big(\frac{\partial(\Psi^\dagger\alpha_1\Psi)}{\partial x} + \frac{\partial(\Psi^\dagger\alpha_2\Psi)}{\partial y} + \frac{\partial(\Psi^\dagger\alpha_3\Psi)}{\partial z}\Big).$$

El miembro de la derecha es la divergencia de un campo. Por hipótesis, $\Psi$ decae adecuadamente en el infinito, así que si aplicamos el teorema de la divergencia en $\mathbb{R}^3$, tenemos que es igual a cero y por tanto $\int_{\mathbb{R}^3} \|\Psi\|^2$ es independiente de $t$ y se normaliza como uno.

Ahora vamos hacia la principal consecuencia de la ecuación de Dirac en relación con este trabajo: la existencia (teórica) del espín. Históricamente, el espín es anterior a una base teórica previa y fue el resultado de experimentos. Fue Dirac, más tarde, quien consiguió, a través de una teoría cuántica compatible con la relatividad, llegar al espín.

Para dicho fin, introducimos la definición de momento angular

$$\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p} = (yp_3 - zp_2, zp_1 - xp_3, xp_2 - yp_1)$$

que bajo fuerzas centrales o para partículas libres, se conserva (componente a componente). El operador momento $\vec{p} = (p_1, p_2, p_3)$ se define como

$$p_j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j}.$$

Se puede observar, inmediatamente, que aplicado a $e^{i(\vec{p}\cdot\vec{x}-Et)/\hbar}$, resulta $p_j$.

En mecánica cuántica, la conservación, en términos de operadores, se traduce en la conmutación con el hamiltoniano. Precisamente, en mecánica cuántica, las componentes de $\vec{L}$ son operadores que actúan sobre funciones de onda; y vamos a ver que la conservación del momento angular falla en la ecuación de Dirac. Veremos que ese 'fallo' nos conduce a la existencia del espín.

Podemos considerar la componente tercera, $L_z = xp_2 - yp_1 = x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}$. Para las otras componentes, los cálculos son análogos. Tenemos $H$ como en (14).

$$
\begin{aligned}
L_zH - HL_z = i\hbar cxp_2\Big(\sum_{j=1}^{3}\alpha_j\frac{\partial}{\partial x_i}\Big) - mc^2x\alpha_4p_2 - i\hbar cyp_1\Big(\sum_{j=1}^{3}\alpha_j\frac{\partial}{\partial x_i}\Big) + mc^2y\alpha_4p_1 - \\
- i\hbar c\alpha_1p_2 - i\hbar cx\Big(\sum_{j=1}^{3}\alpha_j\frac{\partial}{\partial x_i}\Big)p_2 + mc^2x\alpha_4p_2 + \\
+ i\hbar c\alpha_2p_1 + i\hbar cy\Big(\sum_{j=1}^{3}\alpha_j\frac{\partial}{\partial x_i}\Big)p_1 - mc^2y\alpha_4p_1 = \\
= i\hbar cxp_2\Big(\sum_{j=1}^{3}\alpha_j\frac{\partial}{\partial x_i}\Big) - i\hbar cyp_1\Big(\sum_{j=1}^{3}\alpha_j\frac{\partial}{\partial x_i}\Big) - \\
- i\hbar c\alpha_1p_2 - i\hbar cx\Big(\sum_{j=1}^{3}\alpha_j\frac{\partial}{\partial x_i}\Big)p_2 + i\hbar c\alpha_2p_1 + i\hbar cy\Big(\sum_{j=1}^{3}\alpha_j\frac{\partial}{\partial x_i}\Big)p_1 = (\star)
\end{aligned}
$$

continuamos cambiando $p_j$ por su definición y sacando factor común $\hbar^2c$

$$
\begin{aligned}
(\star) = \hbar^2c\Bigg[x\frac{\partial}{\partial y}\Big(\sum_{j=1}^{3}\alpha_j\frac{\partial}{\partial x_i}\Big) - y\frac{\partial}{\partial x}\Big(\sum_{j=1}^{3}\alpha_j\frac{\partial}{\partial x_i}\Big) - \\
- \alpha_1\frac{\partial}{\partial y} - x\Big(\sum_{j=1}^{3}\alpha_j\frac{\partial}{\partial x_i}\Big)\frac{\partial}{\partial y} + \alpha_2\frac{\partial}{\partial x} + y\Big(\sum_{j=1}^{3}\alpha_j\frac{\partial}{\partial x_i}\Big)\frac{\partial}{\partial x}\Bigg] = \\
= \hbar^2c\Bigg[\alpha_2\frac{\partial}{\partial x} - \alpha_1\frac{\partial}{\partial y}\Bigg] = i\hbar c(\alpha_2p_1 - \alpha_1p_2)
\end{aligned}
$$

que no es el operador nulo, luego $L_z$ y $H$ no conmutan.

A pesar de lo anterior, existe una matriz constante $S$ tal que $(L_z + S)H - H(L_z + S) = 0$, lo cual significa que para un electrón que regido por (13), existe un momento angular intrínseco (es propio del electrón, está en el electrón): el espín. Vamos a probar la existencia de tal $S$

$$\begin{aligned}
i\hbar c(\alpha_2 p_1 - \alpha_1 p_2) &= L_z H - H L_z = HS - SH = \\
&= S\Big[c\sum_{j=1}^{3}\alpha_j p_j + \alpha_4 mc^2\Big] - \Big[c\sum_{j=1}^{3}\alpha_j p_j + \alpha_4 mc^2\Big]S = \\
&= c\Big[\sum_{j=1}^{3} S\alpha_j p_j - \sum_{j=1}^{3}\alpha_j p_j S\Big] + \Big[S\alpha_4 - \alpha_4 S\Big]mc^2 = \\
&= c\Big[\sum_{j=1}^{3}(S\alpha_j - \alpha_j S)p_j\Big] + \Big[S\alpha_4 - \alpha_4 S\Big]mc^2.
\end{aligned}$$

Si comparamos el primer miembro con el último, fácilmente obtenemos las siguientes cuatro condiciones

$$\begin{aligned}
i\hbar\alpha_2 &= S\alpha_1 - \alpha_1 S, \\
-i\hbar\alpha_1 &= S\alpha_2 - \alpha_2 S, \\
0 &= S\alpha_3 - \alpha_3 S, \\
0 &= S\alpha_4 - \alpha_4 S.
\end{aligned}$$

La matriz constante $S = -\frac{1}{2}i\hbar\alpha_1\alpha_2$ es solución. Vamos a comprobar una condición, las otras son análogas. Veamos la segunda. Es útil recordar que tenemos las relaciones de (15), pero esta vez son en forma matricial.

$$\begin{aligned}
S\alpha_2 - \alpha_2 S &= -\frac{1}{2}i\hbar\alpha_1\alpha_2\alpha_2 - \alpha_2\frac{-1}{2}i\hbar\alpha_1\alpha_2 = -\frac{1}{2}i\hbar\alpha_1 - \alpha_2\frac{-1}{2}i\hbar(-\alpha_2\alpha_1) = \\
&= -\frac{1}{2}i\hbar\alpha_1 - \frac{1}{2}i\hbar\alpha_1 = -i\hbar\alpha_1.
\end{aligned}$$

También podemos ver que

$$\begin{aligned}
S &= -\frac{1}{2}i\hbar\alpha_1\alpha_2 = -\frac{1}{2}i\hbar\begin{pmatrix} O & \sigma_1 \\ \sigma_1 & O\end{pmatrix}\begin{pmatrix} O & \sigma_2 \\ \sigma_2 & O\end{pmatrix} = -\frac{1}{2}i\hbar\begin{pmatrix} \sigma_1\sigma_2 & O \\ O & \sigma_1\sigma_2\end{pmatrix} = \\
&= -\frac{1}{2}i\hbar\begin{pmatrix} i\sigma_3 & O \\ O & i\sigma_3\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} \sigma_3 & O \\ O & \sigma_3\end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Si lo anterior lo hubiéramos hecho con $L_x$ y $L_y$, nos saldría lo mismo pero con $\sigma_1$ y $\sigma_2$, respectivamente, en la diagonal. El resultado es significativo porque aparecen las matrices de Pauli en la diagonal, lo cual apunta en la dirección del espín. También el factor $\hbar/2$ lo es. Al resolver la ecuación de Schrödinger para el electrón del átomo de hidrógeno, se obtienen múltiplos, en cierto sentido, de $\hbar$, para los valores de los momentos angulares.

Por otra parte, en espectroscopía se obtenían niveles de energía que parecían corresponder a mitades de momentos angulares en presencia de campos magnéticos (efecto Zeeman anómalo). Esto es lo hizo sospechar que existía el espín.

Un último detalle sobre la ecuación de Dirac (13) es que también permitió a Dirac introducir y conjeturar la existencia de la antipartícula del electrón, el positrón. Si se escriben las soluciones explícitas de (13), se tienen dos tipos de términos [Kla13, Ch. 4], lo que llevó a Dirac a pensar en que (13) describe no a una sino a dos partículas. Más tarde se confirmó experimentalmente la existencia del positrón.

# Referencias


[Bel64] J. Bell. On the Einstein Podolsky Rosen Paradox. *Physics*, 1(3):195–200, 1964.

[Cha15] F. Chamizo. Un poco de física cuántica para chicos listos de primero (del grado de física o matemáticas). `http://www.uam.es/fernando.chamizo/physics/physics.html`, 2015.

[CopInt] *Copenhagen interpretation* `https://en.wikipedia.org/wiki/Copenhagen_interpretation`, 2016

[Dir28] P. A. M. Dirac. The quantum theory of the electron. *Proc. Royal Soc. London A*, 117(778):610–624, 1928.

[EPR35] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen. Can quantum mechanical description of physical reality be considered complete? *Phys.Rev.*, 47:777–780, 1935.

[Gato] *Gato de Schrödinger* `https://es.wikipedia.org/wiki/Gato_de_Schr%C3%B6dinger`, 2016

[Glen] I. Glendinning. *The Bloch Sphere* `http://www.vcpc.univie.ac.at/~ian/hotlist/qc/talks/bloch-sphere.pdf`, 2005.

[GP78] A. Galindo and P. Pascual. *Mecánica cuántica.* Alhambra, Madrid, 1978.

[Kak14] S. Kakani. *Modern Physics.* MV Learning, London, New Delhi, second edition, 2014.

[Kla13] R. D. Klauber. *Student Friendly Quantum Field Theory.* Sandtrove Press, second edition, 2013.

[NO08] M. Nakahara and T. Ohmi. *Quantum computing.* CRC Press, Boca Raton, FL, 2008. From linear algebra to physical realizations.

[PostMC] *Postulados de la mecánica cuántica* `https://es.wikipedia.org/wiki/Postulados_de_la_mec%C3%A1nica_cu%C3%A1ntica`, 2016

[SR05] J. M. Sánchez-Ron. *Historia de la física cuántica. vol. 1: El periodo fundacional (1860-1926).* Drakontos. Crítica, D.L.2001, Barcelona, 2005.

[Wey50] H. Weyl. *The theory of groups and quantum mechanics.* Dover Publications, Inc., New York, 1950. Translated from the second (revised) German edition by H. P. Roberton, Reprint of the 1931 English translation.