

Operador densidad. Postulados en esta formulación, propiedades y mecánica cuántica estadística

José Adrián Castelo Martínez;
Universidad de Murcia, España

Índice

1. Postulados de la mecánica cuántica en el formalismo de la matriz densidad	2
1.1. Aspectos mecánicos	2
1.2. Aspectos Estadísticos	2
1.3. Condiciones sobre el operador densidad	3
2. Preparaciones	4
2.1. Preparaciones completas	4
2.2. Preparaciones incompletas. Mezclas estadísticas	5
2.2.1. Preparación incompleta de mezcla estadística	5
2.3. Mezclas estadísticas	5
3. Operador densidad	6
3.1. Pureza	7
3.2. Evolución	8
4. Mecánica estadística cuántica	10
4.1. Cuantizando la mecánica estadística clásica	10
4.2. Colectivo canónico	11
4.3. Entropía	12
5. Matriz densidad cuando el espacio de Hilbert es \mathbb{C}^2	12
5.1. Esfera de Bloch	12
5.2. Matrices de Pauli	13
5.3. Matriz densidad	14
5.3.1. Entropía como función de la impureza	15
A. Postulados de la mecánica cuántica	15

Antes de empezar con el tema, hagamos una pequeña digresión que será de ayuda. Una teoría física es la conjunción de tres cosas:

- Conceptos físicos básicos
- Un formalismo matemático
- Un conjunto de reglas de correspondencia que *mapean* conceptos físicos en objetos matemáticos

Una vez formulamos un problema en forma matemática, su resolución no depende de los aspectos físicos de éste. Obviamente debemos usar las reglas del 3er punto para poder interpretar el resultado en términos físicos y darlo por admisible.

La pregunta entonces sería: ¿Qué aspectos requieren de formulación matemática en la mecánica cuántica? Diferenciaremos dos: aspectos mecánicos y aspectos estadísticos.

1. Postulados de la mecánica cuántica en el formalismo de la matriz densidad

1.1. Aspectos mecánicos

En la física clásica las magnitudes físicas se representaban por variables dinámicas que evolucionaban en el tiempo. Necesitamos una regla que nos formalice matemáticamente eso para poder operar. Experimentalmente encontramos que los valores de las variables dinámicas pueden aparecer cuantizados (espectros atómicos) o no (por ejemplo, energía radiada por un electrón acelerado). Postulamos pues:

Postulado 1

A cada variable dinámica (concepto físico) le corresponde un operador lineal (objeto matemático). Los posibles valores de la variable dinámica se corresponden a los autovalores del operador.

Estos valores estarán cuantizados si el espectro del operador es discreto, pero no tiene por qué ocurrir siempre.

1.2. Aspectos Estadísticos

Para introducir esta parte, lo más ilustrativo es ver un ejemplo. Supongamos una fuente de partículas (idénticas) que las acelera y colima, dirigiéndolas hacia un objetivo que las dispersa. Tras él, situamos detectores para las partículas dispersadas, que miden el ángulo entre el haz y el punto de llegada. Lo que experimentalmente obtenemos es pues un histograma de partículas para un cierto intervalo del ángulo de dispersión respecto a las totales (es decir, una fracción o frecuencia relativa) en función del ángulo: $N_\theta/N = f(\theta)$.

Aunque repitamos las condiciones iniciales del experimento de forma idéntica, los resultados diferirán: si la irreproducibilidad se debe a indeterminaciones en la naturaleza o a limitaciones (prácticas o teóricas) no es algo que podamos o necesitamos responder.

Lo importante es que en el límite de medidas tendiendo a infinito obtenemos que la distribución alcanza estabilidad. Esto es una característica importante de la mecánica cuántica: las experiencias individuales son irreproducibles, pero hay un límite estable de las frecuencias relativas.

Como podemos ver, el experimento (estadístico) se divide en dos fases independientes: preparación y medida. Ninguna de ellas aporta información ni influye sobre la otra. Lo que sí ocurre es que una preparación específica determina las probabilidades de las medidas.

He aquí la relevancia de la preparación y su relación con el concepto de estado. El estado del sistema se da mediante la especificación de una distribución de probabilidad para cada observable. Cualquier proceso repetible que nos brinde probabilidades bien definidas para todos los observables del sistema se conoce como proceso de preparación de estado.

Si dos procesos generan el mismo conjunto de probabilidades son equivalentes, por lo que corresponden al mismo estado. Es decir, un estado se asocia a un conjunto (virtual) de sistemas preparados de forma similar tal que brinden el mismo conjunto de probabilidades para los observables. *Estado* se puede tomar como abreviación de *proceso de preparación de estado*. Es más, la interpretación usual del estado $|\psi\rangle$ como un elemento real puede conducir a contradicciones (aunque aquí no serán discutidas)¹

Postulado 2

A cada estado le corresponde un único vector de estado u operador de estado. Para la variable dinámica \mathcal{A} cuyo observable asociado es A , en el conjunto virtual de eventos que pueden resultar de un proceso de preparación de estado en el mismo estado que representamos por ρ , su valor esperado viene dado por:

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \frac{\text{Tr}(\rho A)}{\text{Tr}(\rho)} \quad (1)$$

El operador ρ es conocido también como operador de estado, operador densidad o matriz densidad.

1.3. Condiciones sobre el operador densidad

Todo operador de estado u operador densidad debe cumplir una serie de condiciones para ser tal.

- Por conveniencia se suele exigir la normalización de éste, es decir, que sea de traza unitaria $\text{Tr}(\rho) = 1$
- Para que los valores esperados (que son nuestra forma de conectar el formalismo matemático con los conceptos físicos) sean reales, se exige que los operadores densidad sean hermíticos, pues por ejemplo supongamos que un operador asociado a una magnitud física es un proyector: $P_u = |u\rangle\langle u|$. Entonces $\langle P_u \rangle = \text{Tr}(\rho P_u) = \langle u|\rho|u\rangle$, que es real sí y solo sí el operador densidad es hermítico (la demostración se realizará más adelante).
- Son definidos positivos, es decir: $\langle u|\rho|u\rangle \geq 0 \quad \forall |u\rangle$

Estas tres condiciones se deben añadir al postulado 2 para estar completo.

Consideremos que el estado del sistema viene representado por el ket $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, con \mathcal{H} el espacio de estados del sistema. Asumamos el estado normalizado por simplicidad. Consideremos un caso especial de operador densidad, que escribimos como $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$. Dicho operador densidad satisface los tres requerimientos anteriores. Demostremoslo:

Sea $\{|u_n^i\rangle\}$ una base del espacio de Hilbert. Expandimos el vector de estado en ella como:

$$|\psi\rangle = \sum_{n,i} c_n^i |u_n^i\rangle$$

Por estar normalizado, $\sum_{n,i} |c_n^i|^2 = 1$. Veamos cuanto vale la traza del operador densidad:

$$\text{Tr}(\rho) = \sum_{n,i} \langle u_n^i | \rho | u_n^i \rangle = \sum_{n,i} \langle u_n^i | \psi \rangle \langle \psi | u_n^i \rangle = \sum_{n,i} c_n^i (c_n^i)^* = 1 \quad (2)$$

Obviamente el operador así definido es hermítico de forma trivial:

$$\rho^\dagger = (|\psi\rangle\langle\psi|)^\dagger = |\psi\rangle\langle\psi| = \rho \quad (3)$$

También es directo que sea definido positivo. Sea $|\phi\rangle$ un vector cualquiera de nuestro espacio de Hilbert. Hacemos:

$$\langle \phi | \rho | \phi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle \langle \psi | \phi \rangle = |\langle \psi | \phi \rangle|^2 \in \mathbb{R}^+ \quad (4)$$

¹Esto se conoce como interpretación de conjuntos o de colectividades, o por su nombre en inglés *ensemble interpretation*. Una descripción más detallada se puede encontrar en [1].

Por otro lado, si queremos que las medidas sean reales (más adelante discutiremos sobre esto) los operadores asociados a las magnitudes físicas han de ser hermíticos:

$$\text{Tr}(\rho A) = \langle \psi | A | \psi \rangle \in \mathbb{R} \Leftrightarrow A = A^\dagger \quad (5)$$

Condición que ha de ser añadida al postulado 1 para estar completo.

Demostración: Es útil verla pues el segundo requerimiento del operador densidad también hacía uso de esta prueba.

- Si $\langle \psi | A | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle^*$ para todo $|\psi\rangle$ se sigue que $\langle \phi_1 | A | \phi_2 \rangle = \langle \phi_2 | A | \phi_1 \rangle^*$, es decir, que el operador A es hermítico.

Sea $|\psi\rangle = a|\psi_1\rangle + b|\psi_2\rangle$. Entonces:

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = |a|^2 \langle \phi_1 | A | \phi_1 \rangle + |b|^2 \langle \phi_2 | A | \phi_2 \rangle + a^* b \langle \phi_1 | A | \phi_2 \rangle + b^* a \langle \phi_2 | A | \phi_1 \rangle$$

Al suponer que lo anterior es igual a su conjugado complejo, damos por hecho que es un número real. Dado que los dos primeros términos son reales por definición, necesitamos ocuparnos de los dos últimos. Dando los valores $a = b = 1$ e igualando al complejo conjugado de esa ecuación se obtiene que:

$$\langle \phi_1 | A | \phi_2 \rangle + \langle \phi_2 | A | \phi_1 \rangle = \langle \phi_1 | A | \phi_2 \rangle^* + \langle \phi_2 | A | \phi_1 \rangle^*$$

Para $a = 1, b = i$ se obtiene:

$$i \langle \phi_1 | A | \phi_2 \rangle - i \langle \phi_2 | A | \phi_1 \rangle = -i \langle \phi_1 | A | \phi_2 \rangle^* + i \langle \phi_2 | A | \phi_1 \rangle^*$$

Cancelando la unidad imaginaria en esta última y sumando se obtiene lo que se buscaba demostrar.

Como pequeña digresión, fijémonos que exigir que sean hermíticos tiene relevancia por el hecho de asegurar que posean representación espectral, más que por tener autovalores reales o no, pues medir las magnitudes físicas con números reales es una convención: podríamos agrupar magnitudes relacionadas en un número complejo y llamarlas como una sola magnitud y la física sería la misma. Tener representación espectral es lo que nos permite calcular valores medios de los operadores, y como esa es la conexión entre nuestra teoría matemática y nuestras medidas experimentales, es lo que les exigimos.

Estamos dando por hecho que ser hermítico implica ser observable, pero fijémonos que en los postulados originales (ver apéndice) lo incluimos aparte. Existen operadores hermíticos cuyo conjunto de autovalores no forma base del espacio de Hilbert en el que se encuentran, luego no son observables propiamente dichos. Discusión aparte merece el hecho de reservar la palabra observable únicamente para las magnitudes físicas, y no para sus operadores asociados, para evitar confusiones típicas en la literatura.

Antes de seguir necesitamos hacer más comentarios sobre aspectos estadísticos. Los restantes postulados se introducirán en su momento.

2. Preparaciones

Ya hemos hablado algo acerca de que es la preparación de estados y su equivalencia con estado (en sentido abstracto) del sistema. Dentro de las preparaciones podemos distinguir entre completas e incompletas.

2.1. Preparaciones completas

Equivale a medir el Conjunto Completo de Observables que Conmutan (CCOC) del sistema. Sea por ejemplo A un operador asociado a una magnitud física del sistema. Por definición es observable, luego sus autovectores forman base. Supongamos que B es el operador asociado a otra magnitud física, y sea tal que conmute con A . Es un resultado conocido que entonces se puede encontrar una base de autovectores común. Pero esta base no tendría por qué ser única, es decir, supongamos que la medida de los dos observables simultánea nos arroja los autovalores a y b . Que la base no sea única quiere decir que a esa medida se le pueden asociar autovectores distintos, *hay degeneración*. Si estos dos juntos no poseyeran una

base única, añadimos un tercero C que conmute con ambos y estudiamos si ahora sí. El mínimo conjunto de operadores que consigue esto se denomina CCOC. Asociado a este tenemos el conjunto completo de variables (dinámicas) compatibles.

Que la preparación sea completa pues quiere decir que hemos determinado completamente el estado (de forma inequívoca) por haber medido todos los operadores de nuestro CCOC. Por tanto, conocemos todo acerca del estado.

Un experimento físico se iniciaría de forma ideal mediante este proceso de preparación completa. En tal caso hablamos de un caso puro.

Pero esto se realiza en la práctica raras veces, lo que nos da pie a introducir las preparaciones incompletas.

2.2. Preparaciones incompletas. Mezclas estadísticas

Lo usual en un experimento es que las variables medidas no sean un conjunto completo de variables compatibles. Luego el estado no se conoce exactamente, hay degeneración por los observables no medidos y necesitamos usar métodos estadísticos. No tenemos un estado dinámico determinado, sino una mezcla estadística de estados y en lugar de una función de onda determinada tenemos asociada una mezcla estadística de funciones de onda caracterizada por pesos estadísticos. Para fijar ideas, supongamos que nuestro CCOC fueran los operadores A, B y C , y medimos las variables dinámicas \mathcal{A} y \mathcal{B} . El estado se escribiría:

$$|\psi\rangle = \sum_j \lambda_j |a_{i_0}, b_{i_0}, c_j\rangle$$

es decir, hay degeneración en la variable no medida.

Seamos más concretos. El sistema, preparado a tiempo t_0 , tendrá asociado el conjunto de vectores de estado $\{|\psi_k(t)\rangle\}$ cada uno con pesos estadísticos p_k . Obviamente, una medida del valor medio de una variable dinámica será la suma pesada de los valores medios en cada estado asociado de la mezcla:

$$\langle A \rangle = \sum_k p_k \langle A \rangle_k \quad (6)$$

2.2.1. Preparación incompleta de mezcla estadística

Reinterpretamos lo anterior. Podemos decir que cuando la información sobre el sistema es incompleta, tenemos ciertas probabilidades $p_1, p_2, \dots, p_m, \dots$ de estar en los estados $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |m\rangle, \dots$ respectivamente. En nuestra interpretación de estado como proceso de preparación de estados, para poder medir y obtener distribuciones de probabilidad lo que hacemos es preparar N sistemas de igual forma y medir sobre unos cuantos ciertos observables, sobre otros; otros, etc. y hacer estadística con eso. Lo podemos extrapolar entonces diciendo que las probabilidades de tener un cierto estado son realmente *pesos estadísticos* o *frecuencias relativas*, es decir, $p_i = N_i/N$.

Estos sistemas son los que nos interesan. Trivialmente medir en ellos satisface la ecuación 6

Pasemos a estudiar las mezclas estadísticas más a fondo.

2.3. Mezclas estadísticas

Se distinguen entre: estacionarias; $w_i \neq w_i(t)$ y no estacionarias; $w_i = w_i(t)$.

Dentro de las estacionarias, tenemos varios tipos según la forma de los pesos:

- Si los pesos son constantes:

$$\sum_m p_m = N \cdot \text{constante} = 1 \longrightarrow p_m = \frac{1}{N} \quad (7)$$

Tal tipo de mezcla estadística, si además los estados del sistema son autoestados todos de energía E , se conoce con el nombre de colectivo microcanónico (pues todos los estados accesibles del sistema tienen misma energía y probabilidad de aparición).

- Ahora nuestros estados son autoestados del hamiltoniano pero de energías diferentes (pudiendo haber degeneración). En este caso, definimos los pesos como:

$$p_m = \frac{e^{-\beta E_m}}{Z}, \quad Z = \sum_m e^{-\beta E_m} \quad (8)$$

por pura conveniencia (aunque se puede formalizar, ver sección 4), pues a tal mezcla sabemos que se le debe corresponder el colectivo canónico.

Para seguir estudiando más a fondo las mezclas estadísticas necesitamos estudiar de nuevo el operador densidad y su relevancia en las mezclas estadísticas.

3. Operador densidad

Ya hemos visto en los postulados cómo se define de forma general un operador densidad y sus propiedades básicas. Veamos ahora un tipo concreto: los operadores densidad que son "mezclas estadísticas".

Definición

Un operador densidad se dice que es una "mezcla estadística" si tiene la forma

$$\rho = \sum_m p_m |m\rangle\langle m| \quad (9)$$

tal que $\sum_m p_m = 1$, y $p_m \geq 0$. Los vectores $|m\rangle$ los asumimos normalizados pero no tienen que ser necesariamente ortogonales, aunque a efectos prácticos sí los supondremos así. Lo anterior no es más que la representación espectral de ρ , y por tanto los pesos estadísticos son sus autovalores.

Obviamente recuperamos lo que vimos anteriormente para los valores esperados de observables del sistema:

$$\text{Tr}(\rho A) = \sum_m p_m \text{Tr}(|m\rangle\langle m| A)$$

Démonos cuenta de que $|m\rangle\langle m|$ es un operador densidad puro, que denotaremos por P_m . Por tanto, como $P_m = P_m^2$ y $\text{Tr}(P_m^2 A) = \text{Tr}(P_m A P_m)$ obtenemos:

$$\text{Tr}(\rho A) = \sum_m p_m \text{Tr}(|m\rangle\langle m| A |m\rangle\langle m|) = \sum_m p_m \langle A \rangle_m \text{Tr}(P_m)$$

Pero por ser un operador densidad, $\text{Tr}(P_m) = 1$ luego recuperamos:

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A) = \sum_m p_m \langle A \rangle_m \quad (10)$$

Podríamos repetir el razonamiento anterior para cualquier función de dicho operador, y obtendríamos:

$$\langle F(A) \rangle = \text{Tr}(\rho F(A)) \quad (11)$$

Dado que ρ contiene toda la información del sistema pues es suficiente para obtener todas las cantidades físicamente medibles (valores medios, distribuciones de probabilidad, etc), consideraremos idénticas dos mezclas estadísticas con el mismo operador densidad.

Nos podemos preguntar: ¿qué ocurre con el operador densidad tras realizar una medida? Es decir, concretando: ¿qué forma tiene el postulado de evolución acausal en la formulación de la matriz densidad?.

Postulado 3

Si tras realizar la medida en el tiempo t_0 del observable A encontramos el autovalor a_n con subespacio de vectores propios asociado $\{|u_n^i\rangle\}$ (caso discreto), y sea $P_a = \sum_i |u_n^i\rangle\langle u_n^i|$ el proyector asociado a tal subespacio, tras la medida el operador $\rho_i(t_0)$ pasa a ser:

$$\rho_f(t_0 + \varepsilon) = \frac{P_D \rho_i(t_0) P_D}{\text{Tr}(P_D \rho_i(t_0) P_D)} \quad (12)$$

que como vemos, tiene traza unitaria por haber normalizado ²

3.1. Pureza

Ya estuvimos discutiendo un caso particularmente conveniente de operador densidad, que era aquel de la forma $\rho = |u\rangle\langle u|$ con $|u\rangle$ normalizado. En tal caso es trivial comprobar que $\rho^2 = \rho$, es decir, es un proyector. A tales operadores densidad (aquellos que cumplen ser iguales a su cuadrado, es decir, son proyectores) se les llama *puros*. Es más, damos por definición de operador densidad puro aquel que se puede escribir así, conociéndose entonces $|\psi\rangle$ como vector de estado. Es obvio que esto coincide con el caso de preparación completa. Conocemos el estado del sistema y por tanto el operador densidad de éste se forma sólo con este vector de estado.

La simplicidad de este operador es sólo aparente: si cambiamos de base, el estado $|u\rangle$ se escribiría:

$$|u\rangle = \sum_i c_i |v_i\rangle \longrightarrow \langle u| = \sum_i c_i^* \langle v_i|$$

con lo que

$$\rho = \sum_i \sum_j c_i c_j^* |v_i\rangle\langle v_j|$$

y seguiría siendo puro.

Además, se puede demostrar que si un operador es puro, existe un vector de estado tal que se pueda escribir como el proyector asociado a tal estado, aunque usualmente no sea fácil encontrar tal vector.

Podemos dar dos criterios para reconocer si un operador es puro:

- Para que un operador densidad que está escrito en la forma general de la ecuación 9 sea puro basta con (es condición necesaria y suficiente) que todos los vectores $|m\rangle$ sean iguales entre ellos salvo una fase. Así representan el mismo estado dinámico, y operador va asociado a un solo estado luego es puro.

Demostración

Restrinjámonos al caso en que los estados son ortogonales por simpleza. Veamos que es condición suficiente.

Dado que son todos iguales salvo fases relativas, escribimos:

$$\{|1\rangle, |2\rangle, \dots, |m\rangle, \dots\} \longrightarrow \{e^{i\theta_1}|a\rangle, e^{i\theta_2}|a\rangle, \dots, e^{i\theta_m}|a\rangle, \dots\}$$

con $|a(t)\rangle$ un vector de estado dado. Tenemos que:

$$\rho^2 = \sum_m \sum_n p_m p_n |m\rangle\langle m|n\rangle\langle n| = \sum_m \sum_n p_m p_n \langle m|n\rangle |m\rangle\langle n|$$

²Una explicación más detallada de este postulado se puede encontrar en [2], con referencias a estudios más profundos sobre porqué este postulado es equivalente al de evolución acausal de nuestra formulación original.

Pero $|m\rangle = e^{i\theta_m}|a\rangle$ y $|n\rangle = e^{i\theta_n}|a\rangle$ (y sus correspondientes formas duales). De ahí, $\langle m|n\rangle = e^{i(\theta_n - \theta_m)}$ luego:

$$\begin{aligned}\rho^2 &= \sum_m \sum_n p_m p_n e^{i(\theta_n - \theta_m)} |a\rangle \langle a| e^{-i(\theta_n - \theta_m)} \\ &= |a\rangle \langle a| \sum_m \sum_n p_m p_n = |a\rangle \langle a|\end{aligned}\quad (13)$$

donde en el último paso, se ha usado que (como las sumas se desacoplan) $\sum_i p_i = 1$. Esto es obviamente ρ pues:

$$\rho = \sum_m p_m e^{i\theta} |a\rangle \langle a| e^{-i\theta} = |a\rangle \langle a|\quad (14)$$

Demos ahora un ejemplo de lo que ocurriría en un caso general ³. De no ser así los vectores, supongamos que son distintos y como dijimos ortogonales dos a dos por simplicidad. En tal caso, $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$ Entonces:

$$\rho^2 = \sum_m \sum_n p_m p_n \delta_{mn} |m\rangle \langle n| = \sum_m p_m^2 |m\rangle \langle m|$$

Para ser igual ρ^2 a ρ , se debe satisfacer que:

$$\sum_m (p_m^2 - p_m) |m\rangle \langle m|\quad (15)$$

y por tanto $p_m = 0$ ó $p_m = 1$. Pero se debe cumplir que la suma de los pesos estadísticos sea 1, luego solo es posible que $p_m = 1, p_{j \neq m} = 0$. Es necesario pues que sean como dijimos (de hecho, la interpretación es sencilla: para ser puro, debe estar asociado a un único estado). Fijémonos que hemos demostrado la afirmación que hicimos al inicio: de ser puro, existe un estado $|a\rangle$ tal que el operador densidad se puede escribir como el proyector asociado a él.

- Dado que $\text{Tr}(\rho) = 1$, si es puro debe ser que $\text{Tr}(\rho^2) = 1$ también. De forma general, $\text{Tr}(\rho^2) \leq 1$ (pues si $p_m \leq 1 \rightarrow p_m^2 \leq p_m$ y entonces $\text{Tr}(\rho^2) = \sum p_m^2 \leq \sum p_m = 1$. Solo será $\text{Tr}(\rho^2) = 1$ cuando $p_m^2 = p_m$ y entonces repetimos el argumento del párrafo anterior).

3.2. Evolución

Si nos fijamos en los postulados enunciados hasta ahora, tenemos todo lo que en los postulados originales salvo una ecuación para la evolución causal del sistema.

Postulado 4

El operador densidad evoluciona siguiendo:

$$i\hbar \frac{d\rho}{dt} = [H, \rho]\quad (16)$$

Demostración

Sea $\rho(t_0) = \sum_m p_m(t_0) |m(t_0)\rangle \langle m(t_0)|$ una mezcla estadística. Al evolucionar en el tiempo tendremos que $\rho(t) = \sum_m p_m(t) |m(t)\rangle \langle m(t)|$. Entonces:

$$i\hbar \frac{d\rho(t)}{dt} = \sum_m \left[i\hbar \frac{dp_m}{dt} |m\rangle \langle m| + p_m i\hbar \frac{d|m\rangle}{dt} \langle m| + p_m |m\rangle i\hbar \frac{d\langle m|}{dt} \right]$$

³Una demostración más rigurosa se puede encontrar en [1], capítulo 2, pág.52

Pero como los estados $|m(t)\rangle$ cumplen la ecuación de Schrödinger $i\hbar \frac{d|m\rangle}{dt} = H|m\rangle$, $-i\hbar \frac{d\langle m|}{dt} = \langle m|H$, obtenemos:

$$i\hbar \frac{d\rho}{dt} = \sum_m i\hbar \frac{dp_m}{dt} |m\rangle\langle m| + [H, \rho] \quad (17)$$

Si nos restringimos a mezclas estadísticas estacionarias (que son las de interés en estadística para los casos de equilibrio) obtenemos la ecuación enunciada, pues los pesos estadísticos son constantes en la evolución.

Otra forma (y deducción posible) de la ecuación de evolución pasa por ver que los estados accesibles del sistema evolucionan con el operador evolución, luego

$$\begin{aligned} \rho(t) &= \sum_m p_m |m(t)\rangle\langle m(t)| \\ &= \sum_m p_m U(t, t_0) |m(t_0)\rangle\langle m(t_0)| U^\dagger(t, t_0) \\ &= U(t, t_0) \rho(t_0) U^\dagger(t, t_0) \end{aligned}$$

es decir,

$$\rho(t) = U(t, t_0) \rho(t_0) U^\dagger(t, t_0) \quad (18)$$

Ahora bien, la ecuación de evolución para el operador evolución es:

$$i\hbar \frac{dU}{dt} = HU \leftrightarrow -i\hbar \frac{dU^\dagger}{dt} = U^\dagger H$$

Si derivamos en 18 respecto al tiempo e introducimos lo anterior recuperamos 16.

Como comentario, que el operador densidad evolucione siguiendo la ecuación enunciada no tiene que ver con la imagen de Heisenberg, pues de hecho, el operador tal como lo usamos está en la imagen de Schrödinger. Para pasarlo a la imagen de Heisenberg hay que aplicar

$$\rho_H(t) = U^\dagger \rho(t) U = U^\dagger U \rho(t_0) U^\dagger U = \rho(t_0) \quad (19)$$

por lo que el operador densidad no evoluciona en la imagen de Heisenberg.

Hemos *demostrado* el postulado, haciendo uso de los postulados originales. Pero de igual forma podríamos *demostrar* los postulados originales dando esta evolución del operador densidad como postulado, y por tanto las descripciones son equivalentes.

Por último, demostremos que **la evolución conserva la pureza de un operador densidad**. Si ρ_0 es puro, existe $|a\rangle$ tal que $\rho = |a_0\rangle\langle a_0|$. En su evolución:

$$\rho_t = U(t, t_0) \rho_0 U^\dagger(t, t_0) = U(t, t_0) |a_0\rangle\langle a_0| U^\dagger(t, t_0) = |a_t\rangle\langle a_t| \quad (20)$$

que sigue siendo un operador densidad puro. Más aún, la traza de ρ o de su cuadrado; que luego veremos es de interés, es invariante:

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\rho^2(t)) &= \text{Tr}(U(t, t_0) \rho^2(t_0) U^\dagger(t, t_0)) \\ &= \text{Tr}(\rho^2(t_0) U(t, t_0) U^\dagger(t, t_0)) \\ &= \text{Tr}(\rho^2(t_0)) \end{aligned} \quad (21)$$

donde en el último paso se ha usado que $\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA)$. Por tanto, un sistema en un estado puro no puede dejar de estar en él al evolucionar (causalmente) (y viceversa).

Ejemplo: 1 Partícula en 0D con espín 1/2

En este caso, nuestro espacio de estados es $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ y nuestros operadores son matrices 2x2 sobre el cuerpo \mathbb{C} . Las bases cuentan de dos estados, que denotaremos como $\{|+\rangle, |-\rangle\}$.

Sea nuestro sistema una colección de partículas como las enunciadas, por ejemplo electrones, y estén la fracción p_+ de éstas con el espín hacia arriba (es decir, en el estado $|+\rangle$) y la fracción p_- con espín hacia abajo $|-\rangle$. Obviamente $p_+ + p_- = 1$. Nuestro operador densidad será:

$$\rho = p_+|+\rangle\langle+| + p_-|-\rangle\langle-|$$

Es trivial ver que para que este operador densidad fuera puro, p_+ ó p_- habrían de ser nulas dado que nuestros estados son linealmente independentes (y de hecho, ortogonales pues son autoestados de un operador hermítico S_z).

Sea A un operador asociado a la variable dinámica \mathcal{A} que queremos medir. Tenemos que:

$$\langle \mathcal{A} \rangle = p_+ \langle +|A|+ \rangle + p_- \langle -|A|-\rangle$$

A la izquierda, tendríamos una cantidad experimental: un promedio de alguna variable medible, mientras que a la derecha un resultado teórico.

Este resultado es interesante porque nos aporta una forma de medir los pesos estadísticos (la fracción de espines con una dirección dada en este caso). De la ecuación que los liga: $p_- = 1 - p_+$. Por tanto:

$$p_+ = \frac{\langle \mathcal{A} \rangle - \langle A \rangle_-}{\langle A \rangle_+ + \langle A \rangle_-} \quad (22)$$

Para lo anterior nos hemos puesto en el caso más favorable: unos espines estaban en un estado y otros en otro, siendo estos linealmente independientes. De hecho, cada espín podría estar en una combinación lineal de estos dos estados, lo que complicaría nuestro desarrollo.

4. Mecánica estadística cuántica

En esta sección estudiaremos la aplicación del formalismo de la matriz densidad a la mecánica estadística, revelándose como una gran herramienta. Para una exposición general de mecánica estadística ver [4], y para una exposición más formal y extensa sobre el uso de la matriz densidad en ésta ver [3].

4.1. Cuantizando la mecánica estadística clásica

Ya vimos algún ejemplo en el apartado de preparaciones sobre mecánica estadística cuántica y la relación del factor de Boltzmann con los pesos estadísticos. El uso de la matriz densidad se hace especialmente relevante y útil en sistemas tratables mediante la mecánica estadística, pues cumplen lo relativo a que el estado del sistema tiene accesibles un conjunto de estados de autoenergías dadas (espacio fásico). Además, la interpretación de la sección 1 se conoce como *ensemble interpretation*, donde *ensemble* se puede traducir como colectivo (aunque a veces se puede encontrar como ensamble), misma palabra que la que aparece al estudiar la física estadística (en la formulación de Gibbs de colectividades). Formalicemos algo más lo visto.

La mecánica estadística clásica se fundamenta en la mecánica analítica. Un estado dinámico es un punto en el espacio de fases. Una mezcla estadística de estados se representa mediante un fluido en el espacio de fases cuya densidad ρ_c (el subíndice indica *clásica*) en un punto es igual a la probabilidad de encontrar al sistema en el estado definido por ese punto.

Las propiedades de tal densidad (en el espacio de fases) son:

- Su integral a todo el espacio de fases es la unidad:

$$\int \rho_c d^N q d^N p = 1 \quad (23)$$

- Si $A_c(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_n)$ es una función de las variables dinámicas q_i y p_i , entonces:

$$\langle A_c \rangle = \int \rho_c A_c d^N q d^N p \quad (24)$$

con la integral extendida a todo el espacio de fases.

- La evolución de la densidad viene regida por la ecuación

$$\frac{d\rho_c}{dt} = [H, \rho]_{\mathcal{P}} \quad (25)$$

donde $[,]_{\mathcal{P}}$ son los corchetes de Poisson. Tal ecuación no debe confundirse con la de evolución de nuestro operador densidad (para la densidad clásica se deriva del hecho de que el espacio de fases evoluciona como un fluido incompresible -Teorema de Liouville-).

La analogía es clara entre ambas "densidades". Unas reglas útiles y socorridas para cuantizar sistemas con análogo clásico son: las magnitudes físicas ordinarias se sustituyen por observables, los corchetes de Poisson por conmutadores (divididos por $i\hbar$) y además, por analogía, añadimos que la integración a todo el espacio de fases pasa a ser la traza.

4.2. Colectivo canónico

Para un sistema en equilibrio térmico, regido por un Hamiltoniano H_c , en mecánica estadística clásica veíamos que la probabilidad de encontrarnos en el estado de energía E_i era $p_i = e^{-\beta E_i}/Z$, con Z un factor para la normalización: $Z = \sum_i e^{-\beta E_i}$

Al pasar a mecánica estadística cuántica, tenemos que nuestro sistema se rige por un hamiltoniano (que ahora es un operador, y no una función de las variables dinámicas q y p) H . El sistema tiene acceso a una colección de estados $|\psi_i\rangle$ de autoenergía E_i . Los pesos estadísticos asociados a cada estado serán como antes: $p_i = e^{-\beta E_i}/Z$

De todo lo anterior, el operador densidad será:

$$\rho = \sum_i \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad (26)$$

Pero fijémonos que $\frac{e^{-\beta E_i}}{Z} |\psi_i\rangle = \frac{e^{-\beta H}}{Z} |\psi_i\rangle$, por lo que podemos escribir:

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z} \quad (27)$$

donde $Z = \text{Tr}(e^{-\beta H})$. El último paso se ha realizado porque al estar el operador densidad expandido en la base de autovectores de H , lo que teníamos en la expresión eran los elementos de la diagonal del hamiltoniano.

¿Qué propiedades tiene tal operador densidad? Pues la primera reseñable, es que los pesos estadísticos (factores de Boltzmann) surgen ahora como sus autovalores. Veamos que es un operador densidad legítimo. Es hermítico pues el hamiltoniano lo es, su traza es unitaria por dividir por la traza del numerador, y es definido positivo pues dado $|u\rangle$ un estado arbitrario, podemos expandirlo en la base de H como $|u\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle$. Haciendo:

$$\langle u|\rho|u\rangle = \frac{1}{Z} \sum_m \sum_n c_n c_m^* e^{-\beta E_n} \langle \psi_m|\psi_n\rangle = \frac{1}{Z} \sum_n |c_n|^2 e^{-\beta E_n}$$

que por ser suma de numeros positivos es mayor o igual que cero, por lo que queda demostrado que es un operador densidad legítimo.

Es obvio que es impuro, pues su cuadrado no coincide con él mismo.

Además, es directo ver que es estacionario, pues dado que es función del operador hamiltoniano, conmuta con él mismo. Por eso podemos decir que el sistema está en equilibrio.

Fijémonos que sale de forma natural que, dada la magnitud física \mathcal{A} y su operador asociado A ,

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \text{Tr}(\rho A) = \sum_n \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \langle A \rangle_n \quad (28)$$

Concretamente, para la energía

$$\langle E \rangle = \sum_n \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} E_n \quad (29)$$

que con poco trabajo se puede ver que es $\langle E \rangle = \frac{-\partial \log Z}{\partial \beta}$

4.3. Entropía

Dado un operador densidad de nuestro sistema, **definimos** (en unidades en las que $k_B = 1$)

$$S = -\log(\rho) \quad (30)$$

A este operador lo denominamos *operador entropía*.

La entropía del sistema se encuentra entonces como

$$\langle S \rangle = \text{Tr}(\rho S) = -\text{Tr}(\rho \log \rho) \quad (31)$$

¿Qué propiedades inmediatas podemos extraer? Si el operador densidad es puro, $\langle S \rangle = 0$ pues $\log(\rho) = 0$ (pues si $\rho^2 = \rho \rightarrow 2 \log(\rho) = \log \rho$, lo que solo puede ser si $\log(\rho) = 0$). Esto se entiende como que la entropía de un estado puro es nula.

Supongamos que no fuera puro. De forma general $\rho = \sum_m p_m |m\rangle \langle m|$. Dado que $\text{Tr}(Af(A)) = \sum_i a_i f(a_i)$ encontramos que⁴:

$$\langle S \rangle = - \sum_{\{i:p_i \neq 0\}} p_i \log p_i \quad (32)$$

Donde se ha usado que ρ es diagonal. La expresión anterior es obviamente mayor que cero, pues $p_i \leq 1 \forall i$ por lo que el logaritmo da un resultado negativo.

Por otro lado, como $S = -\log(\rho) = \beta H + \log Z$, obtenemos que:

$$\langle S \rangle = \beta \langle E \rangle + \log Z = -\beta \frac{\partial \log Z}{\partial \beta} + \log Z \quad (33)$$

que también coincide con la archiconocida fórmula para este colectivo en física estadística.

5. Matriz densidad cuando el espacio de Hilbert es \mathbb{C}^2

5.1. Esfera de Bloch

Para un sistema de 1 partícula en 0 dimensiones con espín un medio, ya hemos dicho que el espacio de Hilbert asociado es $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$. Sea $B = \{|i\rangle\}$ una base ortonormal, con $i = 0, 1$. Un estado se escribirá de forma general como

$$|\psi\rangle = \alpha_0 |0\rangle + \alpha_1 |1\rangle$$

⁴ La demostración es directa, pues la traza es un invariante luego podemos escoger la base que queramos para calcularla, escogemos aquella en la que expandimos A en forma de proyectores asociados a cada autovalor. Además, usamos que si $A|u_m\rangle = a_m|u_m\rangle$, entonces $f(A)|u_m\rangle = f(a_m)|u_m\rangle$ (también directo de la definición de función de un operador como una expansión de Taylor)

con $\alpha_i \in \mathbb{C}$. Por ello, hacemos:

$$|\psi\rangle = |\alpha_0|e^{i\theta_0}|0\rangle + |\alpha_1|e^{i\theta_1}|1\rangle$$

Como es sabido, lo que importa es la fase relativa entre las componentes de $|\psi\rangle$, por lo que podríamos absorber una fase dentro de la otra y escribir:

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta e^{i\phi}|1\rangle$$

Donde $\alpha, \beta, \phi \in \mathbb{R}$. Dado que $|\psi\rangle$ tiene por módulo a la unidad, y se puede escribir $\beta e^{i\phi} = x + iy$ con $x, y \in \mathbb{R}$:

$$\alpha^2 + x^2 + y^2 = 1$$

Lo anterior define una esfera unitaria en el espacio de coordenadas (x, y, α) . Esto sugiere que utilicemos esféricas para nuestro problema:

$$\begin{aligned} x &= \sin \theta \cos \phi \\ y &= \sin \theta \sin \phi \\ \alpha &= \cos \theta \end{aligned}$$

Insertándolo en nuestro estado:

$$|\psi\rangle = \cos \theta |0\rangle + \sin \theta e^{i\phi} |1\rangle$$

Pero si nos fijamos, a partir de $\theta/2$ repetimos estados por la periodicidad de las funciones trigonométricas (es más, dos puntos opuestos en la esfera corresponden a estados de signo contrario). Esto sugiere que basta con que θ recorra el intervalo $[0, \pi/2]$, o equivalentemente podemos escribir:

$$|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + e^{i\phi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle \quad (34)$$

con $0 \leq \theta < \pi$ y $0 \leq \phi < 2\pi$. Tales ángulos siguen la definición habitual de coordenadas esféricas. Así, $|\psi\rangle$ es un vector unitario que, conforme varían los ángulos (θ, ϕ) recorre una esfera unitaria, coincidiendo el polo norte con $|0\rangle$ y el polo sur con $|1\rangle$. Tal esfera se conoce como *esfera de Bloch*. Resaltemos el hecho que de los cuatro parametros iniciales que especificamos para definir el estado, 2 eran redundantes pues el estado final se describe mediante únicamente la especificación de dos parámetros. Otra propiedad interesante es que puntos opuestos de la esfera son ortogonales, es decir: $\langle \psi(\pi - \theta, \pi + \phi) | \psi(\theta, \phi) \rangle = 0$. La demostración pasa por usar que $\cos(\pi/2 - x) = \sin(x)$, $\sin(\pi/2 - x) = \cos(x)$ y que $e^{i\pi} = -1$ y sale directo.

5.2. Matrices de Pauli

Las matrices de Pauli son un conjunto de tres matrices que junto con la identidad (que se suele denotar como σ_0) forman base del conjunto de matrices 2x2 sobre el cuerpo \mathbb{C} . Éstas son:

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (35)$$

y se puede demostrar que cumplen una serie de propiedades muy útiles:

- $\sigma_j^2 = \mathbb{I} = -i\sigma_1\sigma_2\sigma_3, j = 0, 1, 2, 3$
- $\det(\sigma_i) = -1$
- $\det(\vec{a} \cdot \vec{\sigma}) = -|\vec{a}|^2$
- $\vec{a} = \frac{1}{2} \text{Tr}\{(\vec{a} \cdot \vec{\sigma})\vec{\sigma}\}$
- $[\sigma_a, \sigma_b] = 2i\varepsilon_{abc}\sigma_c$
- $\{\sigma_a, \sigma_b\} = 2\delta_{ab}\mathbb{I}$
- $\sigma_a\sigma_b = i\varepsilon_{abc}\sigma_c + \delta_{ab}\mathbb{I}$
- $(\vec{a} \cdot \vec{\sigma})(\vec{b} \cdot \vec{\sigma}) = (\vec{a} \cdot \vec{b})\mathbb{I} + i(\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{\sigma}$

5.3. Matriz densidad

Por formar base del espacio de matrices 2x2 sobre el cuerpo complejo, podemos expandir nuestro operador densidad cuando trabajemos en $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ como:

$$\rho = a_0\sigma_0 + a_i\sigma^i \quad (36)$$

donde $a_i\sigma^i = \vec{a} \cdot \vec{\sigma}$ (usamos el convenio de suma sobre índices repetidos de Einstein). Dado que las matrices de Pauli tienen traza nula, para ser un operador densidad es inmediato que:

$$a_0\text{Tr}(\sigma_0) = 1 \leftrightarrow a_0 = \frac{1}{2} \quad (37)$$

Por otro lado, para ser $\rho = \rho^\dagger$

$$a_0^*\sigma_0 + a_i^*(\sigma^i)^\dagger = a_0\sigma_0 + a_i\sigma^i$$

Como son linealmente independientes, tal igualdad solo se satisface si $a_i = a_i^*$. Los coeficientes son reales por tanto.

Veamos que ocurre si exigimos que sea un operador densidad puro.

$$\rho^2 = (a_0\sigma_0 + a_i\sigma^i)(a_0\sigma_0 + a_j\sigma^j) = a_0^2\mathbb{I} + 2a_0a_i\sigma^i + a_i a_j \sigma^i \sigma^j$$

Pero por las propiedades de las matrices de Pauli, dado que lo último corresponde a $(\vec{a} \cdot \vec{\sigma}) \cdot (\vec{a} \cdot \vec{\sigma})$, obtenemos:

$$\rho^2 = (a_0^2 + |\vec{a}|^2)\mathbb{I} + 2a_0a_i\sigma^i \quad (38)$$

como $a_0 = 1/2$, igualando a ρ término a término (pues las matrices de Pauli son linealmente independientes) obtenemos que:

$$|\vec{a}| = \frac{1}{2} \quad (39)$$

De hecho, lo usual es absorber a_0 ya que siempre vale $1/2$, y escribiríamos:

$$\rho = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + \vec{a} \cdot \vec{\sigma}) \quad (40)$$

Por lo que repitiendo lo anterior, ahora encontraríamos $|\vec{a}| = 1$.

De forma general $|\vec{a}| \leq 1$. Esto es porque los autovalores de ρ son $\frac{1}{2}(1 \pm |\vec{a}|)$, y como deben ser positivos (para ser el operador densidad definido positivo) de forma general el módulo de \vec{a} debe cumplir tal inecuación. Para valores menores que uno, la matriz ρ deja de ser un operador densidad puro. En el límite $|\vec{a}| \rightarrow 0$, tenemos que $\text{Tr}(\rho^2) \rightarrow 1/2$, por lo que en general:

$$\text{Tr}(\rho^2) = \frac{1}{2}(1 + |\vec{a}|^2) \in \left[\frac{1}{2}, 1 \right] \quad (41)$$

De aquí vemos podemos definir $\gamma = \text{Tr}(\rho^2)$, y así disponemos de un parametro que nos da una idea de la impureza del estado. A un estado con $\gamma = 1/2$ se le llama *mezcla estadística maximal*.

Notemos que el vector \vec{a} , cuando su modulo es unitario, define una esfera unitaria en la que el operador densidad es puro. Esta esfera es una esfera de Bloch, que no es más que para un sistema cuyo espacio de estados sea \mathbb{C}^2 el conjunto de los estados puros. Por eso cada punto de la esfera de Bloch se asocia a un vector de estado y solo uno, y por tanto tenemos un estado puro.

5.3.1. Entropía como función de la impureza

Estudiamos si $\langle \mathcal{S} \rangle$ es función del parámetro de impureza y cómo varía con él. Para eso, usamos que los autovalores de la matriz densidad son $p_{\pm} = \frac{1}{2}(1 \pm a)$ (escribimos por simplicidad a para $|\vec{a}|$). Como $\langle \mathcal{S} \rangle = -\sum p_i \log p_i$, con $p_i = p_{\pm}$, nos queda:

$$\langle \mathcal{S} \rangle = -(p_+ \log p_+ + p_- \log p_-) \quad (42)$$

Expandiendo

$$\langle \mathcal{S} \rangle = -\frac{1}{2} \left[\log(1 - a^2) + a \log \left(\frac{1+a}{1-a} \right) - 2 \log 2 \right] \quad (43)$$

y dado que $a = \sqrt{2\gamma - 1}$

$$\langle \mathcal{S} \rangle = -\frac{1}{2} [-\log 2 + f(\gamma)] \quad (44)$$

con $f(\gamma) = \log(2 - 2\gamma) + \sqrt{2\gamma - 1} \log \left(\frac{1 + \sqrt{2\gamma - 1}}{1 - \sqrt{2\gamma - 1}} \right)$.

$\langle \mathcal{S} \rangle$ resulta ser una función monótona y decreciente con γ . Lo que era de esperar, pues si γ representa la impureza del sistema, siendo más puro conforme mayor es γ , la entropía debe decrecer si crece tal parámetro. Es más, la entropía del sistema estará entre los límites $\langle \mathcal{S} \rangle \in [\log 2, 0)$ conforme el parámetro de impureza pasa de $1/2$ a 1 . La entropía decrece si crece la pureza del estado del sistema.

A. Postulados de la mecánica cuántica

A continuación, pondremos los postulados usando el operador de evolución unitario $U(t, t_0)$ extraídos textualmente de [5].

Postulado 1

A cada sistema físico se le asocia un espacio lineal de estados, un espacio de Hilbert \mathcal{H} sobre el cuerpo \mathbb{C} . En un tiempo fijo t_0 , el estado del sistema se define completamente especificando un vector de dicho espacio $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$. Podemos escoger estados normalizados $\langle \psi | \psi \rangle = 1$

Postulado 2

Cada magnitud física medible \mathcal{A} es descrita por un operador A lineal del espacio de estados, hermítico y observable:

$$\begin{aligned} A : \mathcal{H} &\longrightarrow \mathcal{H} \\ |\psi\rangle &\longrightarrow A|\psi\rangle = |\psi'\rangle \end{aligned} \quad (45)$$

Postulado 3

Los únicos resultados posibles de la medición de una magnitud física \mathcal{A} son los autovalores de su operador asociado A .

Postulado 4

La probabilidad de medición de uno u otro de los valores posibles de \mathcal{A} viene determinada por el estado del sistema. La probabilidad $P(a_n)$ de obtener $a_n \in \text{spec}(A)$ es:

- $P(a_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2$ cuando $A|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle$
- $P(a_n) = |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2$ cuando $A|u_n^i\rangle = a_n|u_n^i\rangle$, $i = 1, \dots, g_n$.
- $dP(\alpha) = |\langle u_\alpha | \psi \rangle|^2 d\alpha$ en el caso continuo.

Postulado 5. Evolución acausal

Si la medida de la magnitud \mathcal{A} del sistema en $|\psi\rangle$ ha dado el resultado a_n , entonces el estado del sistema inmediatamente tras la medida es:

$$|\psi_f\rangle = \frac{P_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}} \quad (46)$$

donde P_n es el proyector al subespacio propio \mathcal{E}_n de a_n .

Postulado 6. Evolución Causal

La evolución en el tiempo del estado de un sistema $|\psi\rangle(t)$ viene dada por un operador unitario y lineal $U(t, t_0)$

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad (47)$$

Postulado 7. Simetrización

Si un sistema contiene N partículas idénticas:

- Sus estados son, con respecto al grupo S_N de las permutaciones de esas partículas:
 - o bien todos simétricos.
 - o bien todos antisimétricos.
- El carácter de simetría o antisimetría se aplica solo dependiendo de la naturaleza de la partícula y no de su situación en un momento dado.
- Las partículas con espín entero (bosones) tienen solo estados simétricos.
- Las partículas solo con espín semientero (fermiones) tienen solo estados antisimétricos.

Postulado 8. Principio de correspondencia

Es posible dar reglas para la construcción de observables A en sistemas con análogo clásico. En sistemas con límite clásico debemos recuperar las expresiones clásicas para números cuánticos grandes.

Referencias

- [1] BALLENTINE, L.E., *Quantum Mechanics: A Modern Development*. World Scientific Pub Co Inc (1998)
- [2] MESSIAH, A., *Quantum Mechanics*. Dover Publications Inc. (2014)
- [3] FEYNMAN, R.P., *Statistical Mechanics: A Set of Lectures*. Advanced Book Program (1998)
- [4] PATHRIA, R.K., *Statistical Mechanics*. Academic Press (2011)
- [5] TORRENTE, E.L., *Conceptos básicos de mecánica cuántica*. Ed. Diego Marín Librero Editor (2010)