ISSN (EN LINEA): 1850 - 1158

Determinación del estado cuántico a partir de distribuciones observables

D. Goyeneche* and A. C. de la Torre**
Departamento de Física,
Universidad Nacional de Mar del Plata
Funes 3350, 7600 Mar del Plata, Argentina
CONICET

En el presente trabajo estudiaremos el problema de la determinación del estado de un sistema a partir del conocimiento de distribuciones de observables físicos que pueden ser representados por matrices hermíticas de dimensión finita. Para ésto definiremos un algorítmo iterativo que mediante un análisis computacional nos permitirá determinar si existe un único estado o un conjuntos de estados compatibles con un conjunto de distribuciones observables. El algorítmo ha demostrado ser robusto y eficiente, y es capaz de generar numéricamente conjuntos completos de estados con idénticas distribuciones de observables.

Palabras claves: State, determination, reconstruction, unbiased.

I. INTRODUCCIÓN

El estado puro de un sistema debe cumplir con dos requisitos básicos: contener toda la información física relevante de un sistema; y dos estados diferentes deben corresponder a dos realidades distintas del sistema físico. Notamos así, que debe existir una relación unívoca entre el estado y el conjunto de todas las cantidades observables. En mecánica clásica la determinación del estado en función de cantidades observables no es un problema porque el estado en sí es observable. En mecánica cuántica, el estado es un elemento de un espacio de Hilbert de dimensión N que no puede ser observado. Las cantidades observables son distribuciones de probabilidad que dependen cuadráticamente del estado, más precisamente, si ψ es el estado del sistema, las distribuciones dependen de expresiones de la forma $\langle\psi, P\psi\rangle$, donde P es un proyector. Determinar el estado de un sistema cuántico a partir de la información contenida en un conjunto de distribuciones pertenecientes a d observables, involucra resolver $d(N-1)$ ecuaciones no lineales para determinar $2(N-1)$ números reales que determinan el estado. Cuando la solución de este sistema de ecuaciones no es única se obtiene más de un estado con idénticas distribuciones observables, conocidos como *partners de Pauli*, en honor a W. Pauli, quien fue el primero que se cuestionó la posible existencia de *partners* para los operadores de posición e impulso [1].
Se puede demostrar en forma muy sencilla que el estudio de *partners* depende solamente de las bases de autoestados de los operadores involucrados, y no de los autovalores, ya que las distribuciones observables dependen del módulo cuadrado del producto escalar del estado con los autovectores de la base. Por lo tanto, el conjunto de estados diferentes que contienen iguales distribuciones de los observables $A, B, C...$ es el mismo conjunto que para los observables $f(A), g(B), h(C)...$ cualquiera sean las funciones $f, g, h, ...$ Cabe destacar que el problema de la indeterminación del estado cuántico es un tema abierto de investigación.

II. BASES NO SESGADAS

Dos bases ortonormales $\{\varphi_x\}_{x=1...N}, \{\phi_p\}_{p=1...N}$ pertenecientes a un espacio de Hilbert de dimensión N son no sesgadas (BNS) si $|\langle\varphi_x, \phi_p\rangle|^2 = \frac{1}{N}\ \forall x, p = 1, N$.
Las bases no sesgadas son de significativa importancia en mecánica cuántica, ya que permiten definir operadores necesariamente incompatibles (que no conmutan) de forma tal que las bases de autovectores sean lo más diferente posibles. Una forma de entender la importancia de estas bases es notar que si dos observables A y B tienen bases mutuamente no sesgadas, la probabilidad de medir cualquier autovalor de A es $1/N$ si el sistema se encontraba inicialmente preparado en cualquier autoestado de B.
Como ejemplo de observables con BNS podemos mencionar la posición y el impulso, y el caso de tres componentes ortogonales de espín $1/2$ (matrices de Pauli).
Bases no sesgadas no sólo son de interés para estados puros. L. Wootters y Fields [2] demostraron que las mediciones experimentales provenientes de observables mutuamente no sesgados son óptimas para especificar completamente la matriz densidad de un sistema.

*Electronic address: dgoyene@mdp.edu.ar
**Electronic address: delatorre@mdp.edu.ar

III. OPERADOR DE IMPOSICIÓN FÍSICA

A continuación definimos un operador no lineal cuya finalidad es imponer a los elementos de su dominio una distribución $\{\rho_k\}$ de una determinada cantidad observable. Sea $A : \mathbb{H} \to \mathbb{H}$ un observable (dim $\mathbb{H} = N$); sea $\{\varphi_k\}_{k=1...N}$ su base de autovectores y sea $\{\rho_k\}$ una posible distribución del observable A en algún estado. Definimos el *Operador de Imposición Física*:

$$T_A\psi = \sum_{k=1}^{N} \sqrt{\rho_k} \frac{\langle\varphi_k, \psi\rangle}{|\langle\varphi_k, \psi\rangle|} \varphi_k \tag{1}$$

Notar que $T_A\Psi = \Psi$ cuando se aplica a elementos que ya tenían la distribución $\{\rho_k\}$. Este operador es claramente no lineal, idempotente, y puede demostrarse que preserva normas, esto es, $\|T_A\psi\| = \|\psi\| = 1$.

IV. DISTANCIA ENTRE ESTADOS CUÁNTICOS

La distancia inducida por la métrica $d(\phi, \psi) = \|\phi - \psi\|$ no es adecuada para estados cuánticos, por estar definidos a menos de una fase constante. Una buena definición de distancia, aunque no la única [3], se deduce al utilizar la noción de distancia entre conjuntos:

$$d(\psi, \phi) = \underset{\alpha\ ,\beta}{MIN} ||\psi e^{i\alpha} - \phi e^{i\beta}|| = \sqrt{2}\sqrt{1 - |\langle\psi, \phi\rangle|} \tag{2}$$

Puede demostrarse que (2) satisface las condiciones de métrica y que además es equivalente a la distancia de Hausdorff. Tener una distancia bien definida es fundamental si se pretende estudiar la convergencia de una sucesión de estados cuánticos. De otra forma la palabra convergencia carece de sentido.

V. DISTRIBUCIONES COMPATIBLES

Dado un conjunto de observables $A, B, C, ...$ que poseen bases ortonormales $\{\varphi_k\}, \{\phi_l\}, \{\eta_m\}, ...$ no es posible definir un conjunto *descorrelacionado* de distribuciones observables $\{\rho_k\}, \{\pi_l\}, \{\xi_m\}, ...$ respectivamente, ya que debe existir un estado ϕ que satisfaga las siguientes condiciones:

$$\begin{aligned} \rho_k &= |\langle\varphi_k, \phi\rangle|^2 \\ \pi_l &= |\langle\phi_l, \phi\rangle|^2 \\ \xi_m &= |\langle\eta_m, \phi\rangle|^2 \qquad k, l, m = 1...N \\ &\vdots \end{aligned}$$

En la siguiente sección necesitaremos generar conjuntos de distribuciones compatibles para diferentes observables. Con este fín, definiremos un estado prueba ϕ (*generador de distribuciones*), que será escogido al azar en el espacio de Hilbert. El interés en el estado ϕ radica sólamente en generar un conjunto compatible de distribuciones, y no tendrá presencia alguna en el algorítmo que definiremos. Será de nuestro interés analizar si a partir de distribuciones compatibles podemos reconstruir el estado ϕ o llegar a otros estados $\tilde{\phi}_j$ $(d(\tilde{\phi}_j, \phi) \neq 0)$ que tengan las mismas distribuciones que ϕ.

VI. ALGORÍTMO ITERATIVO

Es de interés en esta sección analizar si existe un único estado compatible con un conjunto de distribuciones o si hay un conjunto de estados *partners*. Con esta finalidad definimos la siguiente sucesión de elementos:

$$\Psi_n = (T_A T_B T_C...)^n\, \Psi_0 \tag{3}$$

donde Ψ_0 es un estado escogido al azar. Básicamente, en cada iteración $T_A T_B T_C...$ se le impone al estado las distribuciones de los diferentes observables $..., C, B, A$. Esta imposición consiste en reemplazar el módulo de cada componente del estado por la distribución deseada para el estado solución, sin alterar la fase. El efecto que producen las imposiciones es que se vaya acumulando en las fases información de todas las distribuciones relevantes, determinando así la convergencia de la sucesión.

A partir de un análisis numérico hemos encontrado que algunas veces la sucesión no converge a un elemento con idénticas distribuciones que ϕ. Esto no representa un problema para el algorítmo, pues sí se parte nuevamente de otro elemento inicial $\tilde{\Psi}_0$, que puede ser escogido ortogonal a Ψ_0 o bien al azar, hay convergencia. El número de veces que el algorítmo no es convergente con un Ψ_0 inicial aumenta con la dimensión del espacio de Hilbert y con la relación existente entre las bases de los observables. Pese a ésto, si se ejecuta numerosas veces el algorítmo para diferentes Ψ_0 iniciales, siempre se logra una convergencia exitosa.

Cuando decimos que no hay convergencia no nos referimos a una divergencia de la sucesión, sino a que el elemento Ψ_n es oscilante dentro de un conjunto finito de estados que no son *partners*. No sería posible la divergencia de la ec. 3 ya que el operador T preserva normas.

VII. APLICACIÓN A OPERADORES DE RELEVANCIA FÍSICA

El interés principal de este trabajo es estudiar la convergencia de la sucesión Ψ_n cuando los observables involucrados son de relevancia física: impulso angular, posición e impulso, bases no sesgadas, y también realizamos un estudio para operadores con bases ortonormales aleatorias. El algorítmo es eficiente y robusto en la determinación de *partners* para todo tipo de observables de relevancia física. Hemos encontrado que la eficiencia aumenta a medida que las bases de autoestados de los observables son más independientes (menos sesgadas). Como dijimos en la seccion 5, las distribuciones de observables serán escogidas al azar a partir de un estado generador al azar. En todos los casos que analizaremos a continuación existen distribuciones muy particulares, que llamaremos *casos patológicos*, para las cuales el conjunto de *partners* es diferente del que se obtiene al tomar un generador al azar. A continuación se detallan los resultados obtenidos en los diferentes tipos de observables:

a. *Impulso angular:*

Se han analizado diferentes conjuntos de distribuciones, correspondientes a dos o tres componentes de impulso angular en direcciones ortogonales. En general, los conjuntos de distribuciones son compatibles con un número finito de estados *partners*. Sin embargo, existen casos patológicos para los cuales no existen *partners* o existen infinitos (esto ultimo sólo para dos componentes de espín). En el caso particular de espín 1 (N=3), dadas tres distribuciones observables correspondientes a mediciones en un aparato de Stern-Gerlach en direcciones ortogonales, encontramos que en general no existen *partners* y que sólo en casos patológicos puede encontrarse hasta un máximo de 3 estados compatibles con el conjunto de distribuciones. También se estudió el caso de cuatro operadores de espín en diferentes direcciones aleatorias y se encontró que en general no hay *partners*, salvo posibles casos patológicos.

b. *Posición e impulso:*

Estos dos observables tienen bases mutuamente no sesgadas. El primer estudio que relacionó el problema de la determinación del estado con bases mutuamente no sesgadas fue dado por Ivanovic [4]. En ese trabajo aparece por primera vez una construcción explícita de un conjunto de bases mutuamente no sesgadas, cuando la dimensión N es prima. Usualmente se asocia a los observables de posición e impulso con operadores en un espacio de Hilbert de dimensión infinita. Sin embargo es posible definir estos operadores para una partícula que se encuentra en una red discreta de N sitios trabajando así en un espacio de dimensión N [5]

En nuestro análisis encontramos que en general existen *partners* independientemente de la dimensión del espacio y de las distribuciones generadoras, salvo casos patológicos donde la determinación es unívoca. Al ser observables con bases no sesgadas, la información que un conjunto de distribuciones brinda es lo más independiente posible. En nuestro trabajo hemos visto que una mínima información adicional ya alcanza para fijar el estado unívocamente. Por ejemplo, considerando como tercer observable a X+P ya no aparecen *partners*, ni tampoco aparecen definiendo un tercer observable aleatorio (salvo posibles casos patológicos).

Un caso particular interesante de estados *partners* es cuando ϕ genera distribuciones uniformes respecto de la posición y el impulso. A partir de un trabajo realizado por S. Bandyopadhyay *et al.* [6] puede demostrarse que cuando la dimensión del espacio N es un número primo, o potencia de un número primo, existen exactamente $N(N-1)$ *partners* que pueden determinarse analíticamente. Es más, éste resultado puede generalizarse para el caso de d operadores con bases mutuamente no sesgadas, encontrando una cantidad de $N(N+1-d)$ estados *partners.* Es interesante destacar que el algorítmo presentado en este trabajo brinda el conjunto completo de *partners* que se conocen en forma analítica, lo que demuestra la eficiencia del algorítmo. Los conjuntos de *partners* verificados en forma numérica son los correspondientes a $N = 3, 5, 7, 11, 13$ y 17, para lo que se requiere un tiempo de cálculo computacional muy breve.

Para cualquier conjunto de observables que se consideren, sesgados o no sesgados, siempre existen distribuciones patológicas para las cuales la cantidad de *partners* es diferente de la que se encuentra para distribuciones aleatorias. Es interesante notar que si se pretende evitar la presencia de *partners* en casos patológicos mediante la adición de nuevos observables, para bases no sesgadas se deberían tener en cuenta $d = N + 1$ observables. Como las bases no sesgadas forman el conjunto de observables más independiente posible, podemos inferir una cota sobre el número mínimo de observables d' necesarios para evitar casos patológicos de cualquier conjunto de observables ($d' \geq N + 1$).

Para finalizar, cabe destacar que la determinación analítica del conjunto de *partners* con distribuciones uniformes para operadores con bases mutuamente no sesgadas en un espacio N dimensional (para todo N) aún es un problema abierto. Con el algorítmo presentado es posible calcular numéricamente los partners existentes en cualquier conjunto de distribuciones de un gupo dado de observables.

c. *Observables aleatorios:*

En el caso de dos observables aleatorios encontramos que siempre existen partner de Pauli y en mayor número que en el caso de impulso angular y bases no sesgadas. Si bien podrían existir operadores aleatorios patológicos, con bases mutuamente no sesgadas o sesgadas como en el caso de impulso angular, se debe notar que estos casos tienen probabilidad nula de aparición, ya que las bases de autoestados se escogen aleatoriamente. Por otro lado, en ciertos casos hemos notado la existencia de un número inusualmente grande de *partners* que se diferencia del promedio, y esto es debido a que las bases de autoestados son cercanas entre sí. Para el caso de tres observables aleatorios, en general no se encuentran estados *partners* pero no se descarta que existan casos patológicos.

Cabe destacar que en el caso de observables aleatorios el porcentaje de veces que la sucesión de la ec. (3) converge es muy bajo, al contrario de lo que sucede en el caso de bases no sesgadas, impulso angular o posición e impulso.

En todos los casos que se encontraron *partners* de Pauli (independientemente del tipo de observables) la convergencia hacia cada partner era casi igualmente probable. Esto se puede entender a partir del hecho que en la definición de Ψ_n sólo hay dependencia de las distribuciones deseadas, y no existe un partner preferencial. También es importante destacar que los estados que no son unívocamente determinados por un conjunto de tres distribuciones forman un conjunto de medida nula en el espacio de Hilbert, independientemente del tipo de observables, y dimensión del espacio. Un caso particular de nuestro resultado está de acuerdo con un trabajo de J. Amiet y S. Weigert, quienes demostraron que sólo un conjunto de estados de medida nula en el espacio de Hilbert es compatible con tres distribuciones de impulso angular en direcciones ortogonales [7].

VIII. VELOCIDAD DE CONVERGENCIA

En general se observa que cuando la sucesión Ψ_n se encuentra cerca del elemento al cual va a converger, existe un acercamiento exponencial mientras que en zonas lejanas el acercamiento es mas lento. Hemos notado que la sucesión Ψ_n converge más rápido cuando más diferentes sean sus bases de autoestados, o sea, menos sesgadas. También la convergencia es más rápida cuando el elemento Ψ_n es cercano al limite de la sucesión, esto es, $d(\Psi_n, \Psi_m) \approx 0$, $m \to \infty$.
En la siguiente tabla se muestan valores típicos del factor de convergencia $F = d(\phi, \Psi_n)/d(\phi, \Psi_{n+1})$ para diferentes observables

bases	zonas lejanas	zonas cercanas
No sesgadas	2	3
Impulso angular	$1,5$	2
Aleatorias	–	$1,1$

En zonas lejanas, para observables con bases aleatorias, la presencia de un gran número de *partners* hace que el comportamiento de la sucesión Ψ_n sea complejo y no se vé un decaimiento definido para bajos valores de n. Este comportamiento tambien se observa en todo tipo de observables que presentan *partners* cuando la dimensión del espacio es relativamente alta ($N > 20$).

IX. CONCLUSIÓN

El algorítmo presentado ha resultado ser robusto y eficiente en todos los casos analizados: bases no sesgadas, posición e impulso, impulso angular y observables aleatorios. Hemos encontrado numéricamente, en el caso de observables con bases no sesgadas y distribuciones uniformes, el conjunto completo de *partners* en espacios de diferentes dimensiones, y se ha verificado que coincide con el conjunto conocido analíticamente, lo que nos induce a pensar que el algorítmo es capaz de determinar todos los partners existentes en el espacio de Hilbert para cualquier tipo de operadores y distribuciones. El algorítmo también resultó consistente con propiedades conocidas de *partners* en el caso de impulso angular.

X. AGRADECIMIENTOS

Queremos agradecer al Dr. H. de Pascuale por su colaboración en cuestiones matemáticas. Este trabajo recibe ayuda parcial del Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Argentina. Este trabajo forma parte de la tesis doctoral de DMG, cuya realización es posible gracias a una beca otorgada por CONICET.

[1] W. Pauli, Die allgemeine prinzipien de wellenmechanik, Handb. Phys. 24 (2), 83-272 (1933)
[2] W. Wootters, B. Fields, Optimal state-determination by mutually unbiased measurements. Annals of Physics, 191, no.2, pp. 363-381. (1989)
[3] J. Lee and M. Kim. Operationally Invariant Measure of the Distance between Quantum States by Complementary Measurements, Phys. Rev. Lett. 91, no 8, pp. 087902 (2003)
[4] I. D. Ivanovic. Geometrical description of quantum state determination, Journal of Phisics A, 14, no. 12, pp. 3241-3245. (1981)
[5] A. C. de la Torre, H. Mártin, D. Goyeneche. Quantum diffusion on a cyclic one-dimensional lattice. Physical review E 68, pp. 031103(2003)
[6] Somshubhro Bandyopadhyay, P. Oscar Boykin, Vwani P. Roychowdhury, Farrokh Vatan. A New Proof for the Existence of Mutually Unbiased Bases. Algorithmica 34(4): 512-528 (2002)
[7] J. P. Amiet, S. Weigert. Reconstructing a pure state of spin s through three Stern-Gerlach measurements. J. Phys. A, no 32, 2777-84 (1999).