Física Teórica 2 - Guía 4: Matriz densidad de sistemas mixtos

Vladimir Daniel Rodríguez Chariarse

10 de mayo de 2021

1. Breve resumen: Matriz densidad y sistemas compuestos

Hemos visto que en un sistema compuesto, un vector de estado producto se expresa por ejemplo en sistemas de *spin* 1/2 en la forma:

$$|\Psi\rangle = |+\rangle_A \otimes |-\rangle_B \equiv |0\rangle_A \otimes |1\rangle_B \equiv |01\rangle$$

donde la última notación es útil para simplificar la notación y se entiende que el primer identificador corresponde al subsistema A y el segundo al subsistema B. El proyector sobre dicho estado se expresa como:

$$|\Psi\rangle\langle\Psi| =\equiv |+\rangle_A \otimes |-\rangle_B \langle +|_A \otimes \langle -|_B \equiv |0\rangle\langle 0|_A \otimes |1\rangle\langle 1|_B \equiv |01\rangle\langle 01|$$

Por lo que, por ejemplo una matriz densidad en el caso de dos susbsistemas A y B puede adoptar la forma

$$\rho_{AB} = \sum_{ij} p_{ij} \, |\psi_i\rangle_A \otimes |\phi_j\rangle_B \, \langle\psi_i|_A \otimes \langle\phi_j|_B \equiv \sum_{ij} p_{ij} \, |\psi_i\rangle\langle\psi_i|_A \otimes |\phi_j\rangle\langle\phi_j|_B \equiv p_{ij} \, |\psi_i\phi_i\rangle\langle\psi_j\phi_j|$$

Se ha introducido a la traza parcial del operador densidad de modo que el operador densidad reducido permite calcular todas la probabilidades de medir observables locales.

Por ejemplo sea $O_A = O_A \otimes \mathbb{I}_B$ un observable local en el subsistema A. La matriz densidad reducida al subsistema A, ρ_A es tal que:

$$\begin{aligned}
\langle O_A\rangle &= tr_{AB}(\rho_{AB}\, O_A \otimes \mathbb{I}_B) \\
&= \sum_{ij} p_{ij} tr_{AB}(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|_A \, O_A \otimes |\phi_j\rangle\langle\phi_j|_B \, \mathbb{I}_B \\
&= \sum_{ij} p_{ij} tr_A(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|_A \, O_A) tr_B(|\phi_j\rangle\langle\phi_j|_B) \\
&\equiv tr_A(\rho_A O_A)
\end{aligned}$$

donde la matriz densidad reducida al subsistema A se expresa en término de la traza parcial de la matriz densidad sobre el subsistema B:

$$\rho_A = tr_B(\rho_{AB}) = \sum_{ij} p_{ij} \left|\psi_i\right\rangle\!\left\langle\psi_i\right|_A tr_B(\left|\phi_j\right\rangle\!\left\langle\phi_j\right|_B)$$

en estas expresiones se usa la propiedad distributiva de la traza con respecto a la suma y que $tr(O_A \otimes O_B) = tr_A(O_A)tr_B(O_B)$.

2. Problema 11

Tres partículas distinguibles Considere un sistema compuesto por tres partículas distinguibles con *spin* $1/2$ y suponga que el estado del sistema está dado por la matriz densidad

$$\rho_{123} = \frac{1}{3}\left|\uparrow\uparrow\downarrow\right\rangle\!\left\langle\uparrow\uparrow\downarrow\right| + \frac{1}{3}\left|\uparrow\downarrow\uparrow\right\rangle\!\left\langle\uparrow\downarrow\uparrow\right| + \frac{1}{3}\left|\downarrow\uparrow\uparrow\right\rangle\!\left\langle\downarrow\uparrow\uparrow\right| + \frac{i}{3}\left|\uparrow\uparrow\downarrow\right\rangle\!\left\langle\uparrow\downarrow\uparrow\right| - \frac{i}{3}\left|\uparrow\downarrow\uparrow\right\rangle\!\left\langle\uparrow\uparrow\downarrow\right|,$$

con $\{\left|\uparrow\right\rangle, \left|\downarrow\right\rangle\}$ los autoestados de S_z con autovalor $\pm 1\hbar/2$.

(a) Calcule la matriz densidad reducida para la primer partícula. Usando esa expresión, calcule $\langle S_z\rangle_1$. Muestre que obtiene el mismo resultado calculando $\langle S_z \otimes \mathbb{I} \otimes \mathbb{I}\rangle_{123}$.

(b) Calcule el valor de expectación de la función de correlación $K(z, x, y) = \langle S_z \otimes S_x \otimes S_y\rangle_{123} - \langle S_z\rangle_1 \langle S_x\rangle_2 \langle S_y\rangle_3$.

(a) Usaremos una notación mas sencilla muy usada en información cuántica,

$$\left|\uparrow\right\rangle \equiv \left|0\right\rangle \qquad \left|\downarrow\right\rangle \equiv \left|1\right\rangle$$

por lo que la matriz densidad de las tres partículas se reescribe:

$$\rho_{123} = \frac{1}{3}\left|001\right\rangle\!\left\langle 001\right| + \frac{1}{3}\left|010\right\rangle\!\left\langle 010\right| + \frac{1}{3}\left|100\right\rangle\!\left\langle 100\right| + \frac{i}{3}\left|001\right\rangle\!\left\langle 010\right| - \frac{i}{3}\left|010\right\rangle\!\left\langle 001\right|,$$

Es útil verificar que la traza de este operador es uno:

$$tr(\rho_{123}) = \frac{1}{3}\underbrace{tr(\left|001\right\rangle\!\left\langle 001\right|)}_{1} + \frac{1}{3}\underbrace{tr(\left|010\right\rangle\!\left\langle 010\right|)}_{1} + \frac{1}{3}\underbrace{tr(\left|100\right\rangle\!\left\langle 100\right|)}_{1} + \frac{i}{3}\underbrace{tr(\left|001\right\rangle\!\left\langle 010\right|)}_{0} - \frac{i}{3}\underbrace{tr(\left|010\right\rangle\!\left\langle 001\right|)}_{\langle 010|001\rangle = 0} = 1$$

se puede verificar que la matriz densidad es hermítica. La matriz densidad en el subespacio generado por $\{\left|001\right\rangle, \left|010\right\rangle, \left|100\right\rangle\}$ se escribe como matriz:

$$\rho_{123} = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 & 0 & i \\ 0 & 1 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\rho_{123}^2 = \frac{1}{9}\begin{pmatrix} 2 & 0 & i \\ 0 & 1 & 0 \\ -i & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Podemos ver que el sistema no es puro pues $tr(\rho^2) = 2/3 < 1$.

Calculemos ahora la matriz densidad reducida al subsistema 1, ρ_1

$$\begin{aligned}\rho_1 &= tr_{23}(\rho_{123})\\ &= \frac{1}{3}\underbrace{tr_{23}(|001\rangle\langle 001|)}_{|0\rangle\langle 0|} + \frac{1}{3}\underbrace{tr_{23}(|010\rangle\langle 010|)}_{|0\rangle\langle 0|} + \frac{1}{3}\underbrace{tr_{23}(|100\rangle\langle 100|)}_{|1\rangle\langle 1|} + \\ &\quad \frac{i}{3}\underbrace{tr_{23}(|001\rangle\langle 010|)}_{|0\rangle\langle 0|\langle 01|10\rangle=0} - \frac{i}{3}\underbrace{tr_{23}(|010\rangle\langle 001|)}_{|0\rangle\langle 0|\langle 10|01\rangle=0}\end{aligned}$$

de donde:

$$\boxed{\rho_1 = \frac{2}{3}\,|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{3}\,|1\rangle\langle 1|}$$

Verificamos que $tr\rho_1 = 1$ y que $tr(\rho_1^2 = \frac{5}{9} < 1)$, por lo que el estado no es puro (es mixto), pero no es máximamente mixto pues no es igual a $\frac{1}{D_1} = \frac{1}{4}$.

Calculemos el valor de expectación del observable local S_{z1} :

$$\langle S_z\rangle_1 = tr_1(\rho_1 S_{z1}) == \frac{\hbar}{3}\underbrace{tr(S_z\,|0\rangle\langle 0|)}_{\langle 0|0\rangle=1} + \frac{\hbar}{6}\underbrace{tr(S_z\,|1\rangle\langle 1|)}_{-\langle 1|1\rangle=-1}$$

donde se usó: $S_z\,|0\rangle = |0\rangle$ y $S_z\,|1\rangle = -\,|1\rangle$, obteniendo

$$\boxed{\langle S_z\rangle_1 = \frac{\hbar}{6}}$$

En forma alternativa podríamos haber calculado usando ρ_{123}. Recordando que la extensión de un observable local en el subsistema 1 a $\mathcal{H}_{123}$ es $S_{z1} = S_{z1}\otimes\mathbb{I}_2\otimes\mathbb{I}_3$

$$\begin{aligned}\langle S_z\otimes\mathbb{I}_2\otimes\mathbb{I}_3\rangle &= tr(S_z\otimes\mathbb{I}_2\otimes\mathbb{I}_3\rho_{123})\\ &= \frac{\hbar}{2}(\frac{1}{3}\underbrace{tr(|001\rangle\langle 001|)}_{1} + \frac{1}{3}\underbrace{tr(|010\rangle\langle 010|)}_{1} - \frac{1}{3}\underbrace{tr(|100\rangle\langle 100|)}_{1} + \frac{i}{3}\underbrace{tr(|001\rangle\langle 010|)}_{0} - \\ &\quad \frac{i}{3}\underbrace{tr(|010\rangle\langle 001|)}_{\langle 010|001\rangle=0}\\ &= \frac{\hbar}{6}\end{aligned}$$

Por lo que vemos que el concepto de matriz densidad reducida permite hacer los cálculos de valores de expectación de observables locales, como si fuera un único subsistema, pero equivale al cálculo completo, siempre que el observable sea local.

(b) Definimos la función de correlación para la medición de tres observables (componentes S_j) como:

$$K(z,x,y) = \langle S_z\otimes S_x\otimes S_y\rangle_{123} - \langle S_z\rangle_1\,\langle S_x\rangle_2\,\langle S_y\rangle_3$$

Calculemos primero el valor medio del operador conjunto: $\langle S_z \otimes S_x \otimes S_y \rangle_{123}$ (se mide el producto de las proyecciones S_j en cada partícula)

$$\begin{aligned}
\langle S_z \otimes S_x \otimes S_y \rangle_{123} &= tr(S_z \otimes S_x \otimes S_y \rho_{123}) \\
&= \frac{\hbar^3}{8} tr[\sigma_z \otimes \sigma_x \otimes \sigma_y (\frac{1}{3} |001\rangle\langle 001| + \frac{1}{3} |010\rangle\langle 010| + \\
&\quad \frac{1}{3} |100\rangle\langle 100| + \frac{i}{3} |001\rangle\langle 010| - \frac{i}{3} |010\rangle\langle 001|)] \\
&= \frac{\hbar^3}{8} [\frac{1}{3}(-i) \underbrace{tr(|010\rangle\langle 001|)}_{0} + \frac{1}{3}(i) \underbrace{tr(|001\rangle\langle 010|)}_{0} + \\
&\quad \frac{1}{3}(-)(i) \underbrace{tr(|111\rangle\langle 100|)}_{0} + \frac{i}{3}(-i) \underbrace{tr(|010\rangle\langle 010|)}_{1} - \\
&\quad \frac{i}{3}(i) \underbrace{tr(|001\rangle\langle 001|)}_{1}]
\end{aligned}$$

entonces

$$\boxed{\langle S_z \otimes S_x \otimes S_y \rangle_{123} = \frac{\hbar^3}{12}}$$

Queda para les alumnes mostrar que

$$\boxed{\langle \mathbb{I} \otimes S_x \otimes \mathbb{I} \rangle_{123} = 0}$$

$$\boxed{\langle \mathbb{I} \otimes \mathbb{I} \otimes S_y \rangle_{123} = 0}$$

por lo que finalmente:

$$K(z, x, y) = \langle S_z \otimes S_x \otimes S_y \rangle_{123} - \langle S_z \rangle_1 \langle S_x \rangle_2 \langle S_y \rangle_3 = \frac{\hbar^3}{12}$$

indicando que estas mediciones están correlacionadas.

3. Problema 12

Fotones entrelazados. El resultado de la aniquilación de un electrón y un positrón que produce un par de fotones A y B, puede ser descripto mediante una matriz densidad de 4×4 dada por

$$\rho_{AB} = \frac{1}{4} (\mathbb{I}_A \otimes \mathbb{I}_B - \boldsymbol{\sigma}_A \cdot \boldsymbol{\sigma}_B),$$

donde $\mathbb{I}_X$ son las identidades, $\boldsymbol{\sigma}_X$ las matrices de Pauli de los respectivos sistemas $X = A, B$; y $\boldsymbol{\sigma}_A \cdot \boldsymbol{\sigma}_B = \sum_{i=1,2,3} \sigma_{iA} \otimes \sigma_{iB}$.

(a) Calcule la pureza del estado. ¿Es el estado mixto o puro?

(b) Calcule la matriz densidad reducida de A, $\rho_A = \mathrm{tr}_B(\rho_{AB})$. ¿Puede asegurar si el estado ρ_{AB} es entrelazado o no? Evalúe la polarización del fotón A tomando

$$\boldsymbol{P}_A = \mathrm{tr}\left(\rho_A \boldsymbol{\sigma}_A\right).$$

Interprete el resultado. Repita el cálculo para la polarización del fotón B.

(c) Suponga ahora que se tienen dos detectores, configurados para medir las polarizaciones $\boldsymbol{P}_A^{\mathrm{det}}$ y $\boldsymbol{P}_B^{\mathrm{det}}$, respectivamente, de forma tal que las mediciones están representadas por los proyectores

$$\Pi_X^{\mathrm{det}} = \frac{1}{2}\left(\mathbb{I}_X + \boldsymbol{P}_X^{\mathrm{det}} \cdot \boldsymbol{\sigma}_X\right), \qquad X = A, B.$$

Calcule el valor de expectación de las correlaciones entre detecciones en ambos detectores, es decir

$$\mathrm{tr}\left[\rho_{AB}(\Pi_A^{\mathrm{det}} \otimes \Pi_B^{\mathrm{det}})\right].$$

Interprete el resultado. ¿Qué ocurre si $\boldsymbol{P}_A^{\mathrm{det}}$ y $\boldsymbol{P}_B^{\mathrm{det}}$ son paralelos? ¿Y cuando son antiparalelos? ¿Qué conclusión puede sacar sobre la correlación entre las polarizaciones de los fotones A y B?

Recordemos la esfera de Bloch de las polarizaciones del fotón:

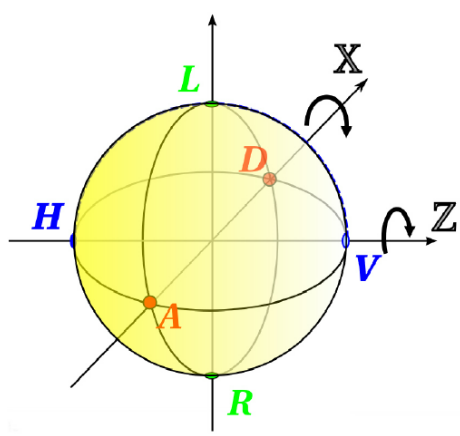

Figura 1: *Esfera de Bloch para polarización de fotones.*

En la base $\{|H\rangle, |V\rangle\}$, un estado puro con polarización arbitraria tiene la expresión:

$$\left|\hat{\boldsymbol{P}}\right\rangle = \cos(\theta/2)\,|H\rangle + e^{i\phi}\sin(\theta/2)\,|V\rangle$$

donde el vector que caracteriza el estado de polarización $\hat{\boldsymbol{P}}$ está dado por los ángulos en esféricas $\{\theta, \phi\}$. Por ejemplo para $\theta = \pi/2$, $\phi = \pm\pi/2$ obtenemos $|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle + i\,|V\rangle)$ y $|L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle - i\,|V\rangle)$.

Como vimos anteriormente el proyector sobre este estado es:

$$\Pi_{\hat{\boldsymbol{P}}} = \frac{1}{2}\left(\mathbb{I} + \hat{\boldsymbol{P}} \cdot \boldsymbol{\sigma}\right)$$

Ahora empecemos con el problema de dos fotones A y B (sistema compuesto), generados por aniquilación electrón-positrón, descripto por una matriz densidad:

$$\rho_{AB} = \frac{1}{4}\left(\mathbb{I}_A \otimes \mathbb{I}_B - \boldsymbol{\sigma}_A \cdot \boldsymbol{\sigma}_B\right),$$

$\boldsymbol{\sigma}_A \cdot \boldsymbol{\sigma}_B = \sum_i \sigma_{iA} \otimes \sigma_{iB}$.

(a) Verificaremos que $tr(\rho_{AB}) = 1$;

$$tr(\rho_{AB}) = \frac{1}{4}[tr(\mathbb{I}_A \otimes \mathbb{I}_B) - \sum_i tr(\sigma_{iA} \otimes \sigma_{iB})] = 1$$

donde solo contribuye el primer término pues $tr(\sigma_{iA} \otimes \sigma_{iB}) = 0$.

Calculamos la pureza:

$$\begin{aligned} tr(\rho_{AB}^2) &= \frac{1}{16}tr[(\mathbb{I}_A \otimes \mathbb{I}_B - \sum_i \sigma_{iA} \otimes \sigma_{iB})(\mathbb{I}_A \otimes \mathbb{I}_B - \sum_j \sigma_{j\,A} \otimes \sigma_{j\,B})] \\ &= \frac{1}{16}[tr(\mathbb{I}_A \otimes \mathbb{I}_B) - 2\sum_i tr(\sigma_{iA} \otimes \sigma_{iB}) + \sum_{i,j} tr(\sigma_{iA}\sigma_{j\,A} \otimes \sigma_{iB}\sigma_{j\,B})] \end{aligned}$$

usando que $\sigma_i \sigma_j = \epsilon_{ijk}\sigma_k + \delta_{ij}\mathbb{I}$ se obtiene:

$$tr(\rho_{AB}^2) = \frac{1}{16}(4 + 3 \times 4) = 1$$

Por lo que el estado es puro.

(b) Calculemos las matrices densidad reducidas. Por ejemplo $\rho_A = tr_B \rho_{AB}$

$$\rho_A = \frac{1}{4}[\mathbb{I}_A \underbrace{tr_B(\mathbb{I}_B)}_{2} - \sum_i \sigma_{iA} \underbrace{tr_B(\sigma_{iB})}_{0}] = \frac{\mathbb{I}_A}{2}$$

El estado es máximamente entrelazado pues ρ_A es máximamente mixto $tr(\rho_A^2) = \frac{1}{2} = \frac{1}{D_A}$.

La polarización del fotón A la definimos por:

$$\boldsymbol{P}_A = \mathrm{tr}\left(\rho_A \boldsymbol{\sigma}_A\right) = \boldsymbol{0}.$$

el fotón A no está polarizado en valor medio.

El cálculo de ρ_B y $\boldsymbol{P}_B$ es similar.

(c) Si medimos la polarización con detectores usaremos el proyector correspondiente al vector unitario $\hat{\boldsymbol{P}}_X^{\mathrm{det}}$ con autovalor uno:

$$\Pi_X^{\mathrm{det}} = \frac{1}{2}\left(\mathbb{I}_X + \hat{\boldsymbol{P}}_X^{\mathrm{det}} \cdot \boldsymbol{\sigma}_X\right), \qquad X = A, B.$$

Este proyector corresponde a medir un estado de polarización en la esfera de Bloch, dado por el vector $\hat{\boldsymbol{P}}_X^{\text{det}}$.

Calculemos el valor de expectación de las correlaciones entre detecciones en ambos detectores, es decir la probabilidad de medir una coincidencia del fotón A con polarización $\hat{\boldsymbol{P}}_A^{\text{det}}$ y el fotón B con polarización $\hat{\boldsymbol{P}}_B^{\text{det}}$ es

$$\begin{aligned}\operatorname{tr}\big[\rho_{AB}(\Pi_A^{\text{det}}\otimes\Pi_B^{\text{det}})\big] = tr[&\frac{1}{4}(\mathbb{I}_A\otimes\mathbb{I}_B - \sum_j \sigma_{j\,A}\otimes\sigma_{j\,B}\\ &\frac{1}{4}(\mathbb{I}_A\otimes\mathbb{I}_B + \hat{\boldsymbol{P}}_A^{\text{det}}\cdot\boldsymbol{\sigma}_A\otimes\mathbb{I}_B + \mathbb{I}_A\otimes\hat{\boldsymbol{P}}_B^{\text{det}}\cdot\boldsymbol{\sigma}_B +\\ &\hat{\boldsymbol{P}}_A^{\text{det}}\cdot\boldsymbol{\sigma}_A\otimes\hat{\boldsymbol{P}}_B^{\text{det}}\cdot\boldsymbol{\sigma}_B)].\end{aligned}$$

las contribuciones no nulas aparte del operador identidad, vienen de la sumatoria sobre j

$$\begin{aligned}\sigma_{j\,A}\otimes\sigma_{j\,B}(\hat{\boldsymbol{P}}_A^{\text{det}}\cdot\boldsymbol{\sigma}_A\otimes\hat{\boldsymbol{P}}_B^{\text{det}}\cdot\boldsymbol{\sigma}_B) &= tr[\sigma_{j\,A}\hat{\boldsymbol{P}}_A^{\text{det}}\cdot\boldsymbol{\sigma}_A\otimes\sigma_{j\,B}\hat{\boldsymbol{P}}_B^{\text{det}}\cdot\boldsymbol{\sigma}_B]\\ &= \sum_k tr[\sigma_{j\,A}P_{k\,A}^{\text{det}}\sigma_{k\,A}\otimes\sigma_{j\,B}P_{k\,B}^{\text{det}}\sigma_{k\,B}]\\ &= \sum_k P_{k\,A}^{\text{det}}P_{k\,B}^{\text{det}}tr(\mathbb{I}_A\otimes\mathbb{I}_B)]\end{aligned}$$

donde se usó que $\sigma_j\sigma_k = \delta_{jk}\mathbb{I} + i\epsilon jkl\sigma_l$, el término lineal en σ_l no contribuye a la traza.

Finalmente

$$\langle\Pi_A\otimes\Pi_B\rangle_{\rho AB} = \frac{1}{4}(1 - \hat{\boldsymbol{P}}_A^{\text{det}}\cdot\hat{\boldsymbol{P}}_B^{\text{det}})$$

- Si $\hat{\boldsymbol{P}}_A^{\text{det}}//\hat{\boldsymbol{P}}_B^{\text{det}}$ entonces $\langle\Pi_A\otimes\Pi_B\rangle_{\rho_{AB}} = 0$, la probabilidad de medir la misma polarización en una medición conjunta de ambos fotones es nula.
- Si $\hat{\boldsymbol{P}}_A = -\hat{\boldsymbol{P}}_B$ entonces $\langle\Pi_A\otimes\Pi_B\rangle_{\rho_{AB}} = \frac{1}{2}$,que es la probabilidad de medir polarizaciones ortogonales en una medición conjunta de ambos fotones. Intercambiando los casos y sumando, tenemos que siempre se mide con polarizaciones opuestas (ortogonales) a los dos fotones. Por ejemplo A sale en estado $|R\rangle$ entonces B sale en estado $|L\rangle$ o viceversa, con probabilidad 1. Del mismo modo para otros pares de polarizaciones ortogonales. Este estado entrelazado de fotones es similar al estado singlete del problema de dos spines $|\Psi^-\rangle$.