Física Teórica 2 - Guía 4: Matriz densidad

Vladimir Daniel Rodríguez Chariarse

1 de mayo de 2021

1. Breve resumen: Matriz densidad

En Mecánica Clásica hay situaciones donde el estado inicial de un sistema sólo puede ser definido por un ensemble (un conjunto de condiciones iniciales). Esto puede pasar aún con muy pocos grados de libertad en sistemas dinámicos no lineales.

Hasta ahora en Mecánica Cuántica, tenemos como descripción de estado del sistema al vector de estado, que pertenece un espacio de Hilbert $\mathcal{H}$, por ejemplo $|\psi\rangle$. Siempre hay un observable cuya medición nos da un valor con certeza, por ejemplo medir $\lambda\,|\psi\rangle\langle\psi|$ que nos dá λ al medirlo sobre el estado $|\psi\rangle$.

También tenemos observables $\{A, B, C..\}$, que son operadores hermíticos sobre $\mathcal{H}$, con autovalores reales, que son los posibles valores obtenidos al medir estos observables, por ejemplo $\{a_j\}$ para el observable A.

Todo lo que se se puede obtener de un dado estado $|\psi\rangle$ también es obtenible con el operador de proyección sobre dicho estado $|\psi\rangle\langle\psi|$:

- Probabilidad de medir A y obtener un valor particular a_j:

$$\boxed{(a_j|\,|\psi\rangle) = tr(\Pi_{|\psi\rangle}\,|a_j\rangle\langle a_j|) = tr(\Pi_{|\psi\rangle}\Pi_{a_j})}$$

- Estado en el que queda luego de medir A y obtener a_j:

$$\boxed{|\psi'\rangle) = \frac{\Pi_{a_j}}{\sqrt{\langle\psi|\,\Pi_{a_j}\,|\psi\rangle}}}$$

- Valor medio obtenido al medir A:

$$\boxed{\langle A\rangle_{|\psi\rangle} = \langle\psi|\,A\,|\psi\rangle = tr(\Pi_{|\psi\rangle}A)}$$

- El proyector $|\psi\rangle\langle\psi|$ es incluso mejor que el estado $|\psi\rangle$, pues el proyector no depende de la fase: $|\psi\rangle$ y $e^{i\varphi}\,|\psi\rangle$ poseen el mismo proyector. No es necesario aclarar que el estado está definido a menos de una fase global.

Volvamos a la noción de conjunto estadístico. Hemos ya visto situaciones donde se prepara no un estado particular sino un conjunto de estados cada uno con una probabilidad dada. En el protocolo BB84 de intercambio cuántico de claves, Alice manda a Bob un conjunto de estados $\{|\pm, z\rangle, |\pm, x\rangle\}$ con probabilidad 1/4 cada uno. Mas aún, hemos visto que en ciertos estados compuestos, la medición de cualquier observable local parece no depender del observable. Midiendo observables locales no obtenemos información de dichos estados. Para mediciones locales, el sistema se muestra como un conjunto estadístico, en estos caso dando como resultado valores equiprobables.

Para describir ambas situaciones se usa el concepto de matriz densidad ρ. Este concepto busca describir un conjunto estadístico de estados $\{|\phi\rangle_k\}$ que se prepara cada uno con una probabilidad $_k$. Ciertamente no es necesario que los $\{|\phi_k\rangle\}$ formen una base, ni que sean ortogonales, su número no está limitado por la dimensión de $\mathcal{H}$. La probabilidad de medir el autovalor a_j de un observable A es:

$$\begin{aligned}\mathrm{Prob}(a_j|\rho) &= \sum_k p_k \,\mathrm{Prob}(a_j|\,|\phi_k\rangle) \\ &= \sum_k p_k tr(|\phi_k\rangle\langle\phi_k|\,|a_j\rangle\langle a_j|) \\ &= tr\left((\sum_k p_k \,|\phi_k\rangle\langle\phi_k|)\Pi_{a_j} \right)\end{aligned}$$

de donde obtenemos:

$$\boxed{\mathrm{Prob}(a_j|\rho) = tr(\rho\Pi_{a_j})}$$

donde se definió la matriz densidad (operador densidad):

$$\boxed{\rho = \sum_k p_k \,|\phi_k\rangle\langle\phi_k|}$$

Del mismo modo se puede ver que el valor medio de una medición del observable A está dado por:

$$\boxed{\rho = \sum_j a_j \underbrace{\mathrm{Prob}(a_j|\rho)}_{tr(\rho|a_j\rangle\langle a_j|)} = tr(\rho A)}$$

El estado luego de una medición del observable $A = \sum_j a_j \Pi_{a_j}$ está definido por una matriz densidad ρ' dada por:

$$\rho' = \sum_j \underbrace{\mathrm{Prob}(a_j|\rho)}_{\langle a_j|\rho|a_j\rangle} \Pi_{a_j} = \sum_j |a_j\rangle\langle a_j|\,\rho\,|a_j\rangle\langle a_j|$$

que significa que cada vez que se mide a_j con probabilidad $\mathrm{Prob}(a_j|\rho)$ queda en el proyector del estado $|a_j\rangle$. La última igualdad es un reordenamiento usando la notación de Dirac. Por lo que obtenemos la fórmula para la matriz densidad luego de la medición del observable A:

$$\boxed{\rho' = \sum_j \Pi_{a_j} \rho \, \Pi_{a_j}}$$

donde $\Pi_{a_j} = |a_j\rangle\langle a_j|$ es el proyector sobre el subespacio de autovalor a_j.

El paso de un estado mixto ρ a un estado puro se realiza recordadndo que ρ es hermítico y por consiguiente diagonalizable. Si el operador densidad posee solo un autovalor no nulo (que debe ser 1), entonces ese es un estado puro dado por el autovector correspondiente, por ejemplo $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$. En este caso se satisface la ecuación $\rho = \rho^2$, por lo que la traza de ρ^2 es 1. Se define la pureza de un estado cuántico ρ a:

$$\gamma = tr(\rho^2)$$

Probaremos que su valor máximo es 1 (estado puro) su menor valor es $1/D$, donde D es la dimensión de $\mathcal{H}$.

2. Problema 6

Pureza. Sea ρ la matriz densidad que representa el estado de un sistema cuántico. Se llama *pureza* del estado ρ a la cantidad $\operatorname{tr}\left(\rho^2\right)$.

(a) Mostrar que $\frac{1}{D} \leq \operatorname{tr}\left(\rho^2\right) \leq 1$, donde D es la dimensión del espacio de Hilbert.

(b) Muestre que si el estado es puro, entonces $\rho^2 = \rho$ y por lo tanto la pureza es máxima, $\operatorname{tr}\left(\rho^2\right) = 1$. Muestre que vale también la vuelta, es decir que si la pureza es máxima, $\operatorname{tr}\left(\rho^2\right) = 1$, entonces necesariamente ρ es un estado puro.

(c) Mostrar que para un estado mixto, $\operatorname{tr}\left(\rho^2\right) < 1$.

(d) Se llama *estado máximamente mixto* al estado $\rho = \frac{1}{D}\mathbb{I}$. Verifique que esta definición satisface todas las condiciones necesarias para ser un estado cuántico. Muestre que el estado máximamente mixto tiene pureza mínima, $\operatorname{tr}\left(\rho^2\right) = 1/D$.

(a) Busquemos las cotas para la pureza definida por $tr(\rho^2)$. Para ello usamos que como ρ es hermítico, es diagonalizable. Usemos ρ en la base que lo diagonaliza:

$$\rho = \begin{pmatrix} p_1 & 0 & 0 & 0... & 0 \\ 0 & p_2 & 0 & 0... & 0 \\ 0 & 0 & p_3 & .... & 0 \\ . & . & . & .... & . \\ 0 & 0 & 0 & ... & p_{_D} \end{pmatrix}$$
$$\rho^2 = \begin{pmatrix} p_1^2 & 0 & 0 & 0... & 0 \\ 0 & p_2^2 & 0 & 0... & 0 \\ 0 & 0 & p_3^2 & .... & 0 \\ . & . & . & .... & . \\ 0 & 0 & 0 & ... & p_{_D}^2 \end{pmatrix}$$

2.1. cota superior

Queremos ver que $tr(\rho^2) = \sum_j p_j^2 \leq 1$. Usaremos que $tr(\rho) = \sum_j p_j = 1$. Elevando al cuadrado esto tenemos:

$$1 = \sum_j pj \sum_k p_k = \underbrace{\sum_j p_j^2}_{tr(\rho^2)} + \underbrace{\sum_{j \neq k} p_j p_k}_{\Delta \geq 0}$$

por lo que

$$tr(\rho^2) \leq 1$$

2.2. cota inferior

Queremos ver que $tr(\rho^2) = \sum_j p_j^2 \geq \frac{1}{D}$, donde D es la dimensión de $\mathcal{H}$. Usaremos que $p_j = \langle p \rangle + \delta_j$. Donde

$$\langle p \rangle = \frac{1}{D} \sum_j pj = \frac{1}{D}$$
$$\sum_j p_j = \underbrace{\sum_j \langle p \rangle}_{1} + \sum_j \Delta_j = 1$$

por lo que

$$\sum_j \Delta_j = 0$$

Evaluemos la pureza:

$$\begin{aligned} tr(\rho^2) &= \sum_j p_j^2 \\ &= \sum_j (\langle p \rangle + \Delta_j)^2 = \sum_j (\langle p \rangle^2 + 2 \langle p \rangle \Delta_j + \Delta_j^2) \\ &= \underbrace{D \langle p \rangle^2}_{\frac{1}{D}} + \underbrace{\sum_j \Delta_j^2}_{\geq 0} \end{aligned}$$

por consiguiente

$$tr(\rho^2) \geq \frac{1}{D}$$

Finalmente la pureza está en el rango:

$$\boxed{\frac{1}{D} \leq tr(\rho^2) \leq 1}$$

Es claro que el estado puro posee uno solo de las p_j no nulo, y su valor es la unidad. En este caso $\rho = |\phi_l\rangle\langle\phi_l|$, que es un proyector simple y cumple $\rho^2 = \rho$.

En el otro extremo, el estado máximamente mixto posee $p_j = \frac{1}{D}$ para todo j.

Algunos detalles adicionales de los items (b), (c) y (d) quedan como ejercicio para les alumnes.

3. Problema 7

Considere un sistema de *spin* 1/2. Para cada uno de los siguientes estados calcule la pureza, y los valores medios del spin en las tres direcciones cartesianas. Para el caso en que el estado es puro, encuentre el estado $|\psi\rangle$ tal que $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$.

(a) $\rho = \frac{1}{2} (|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|)$,

(b) $\rho = \frac{1}{2} (|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|)$,

(c) $\rho = \frac{9}{10} |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + \frac{3}{10} |\uparrow\rangle\langle\downarrow| + \frac{3}{10} |\downarrow\rangle\langle\uparrow| + \frac{1}{10} |\downarrow\rangle\langle\downarrow|$,

(d) $\rho = \frac{1}{3} |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + \frac{2}{3} |\downarrow\rangle\langle\downarrow|$,

(e) $\rho = \frac{8}{10} |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + \frac{3}{10} |\uparrow\rangle\langle\downarrow| + \frac{3}{10} |\downarrow\rangle\langle\uparrow| + \frac{2}{10} |\downarrow\rangle\langle\downarrow|$,

donde $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ son los autoestados de σ_z con autovalor ± 1 respectivamente.

(a) Podemos escribir la matriz del operador en la base de autoestados de σ_z:

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + \sigma_x)$$
$$\rho^2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}$$

La igualdad $\rho^2 = \rho$ nos indica que el estado es puro. Para encontrar que estado particular es, veamos los autovectores de ρ, que son los autoestados de σ_x:

$$|{\uparrow_x}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|{\uparrow}\rangle + |{\downarrow}\rangle) \qquad |{\downarrow_x}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|{\uparrow}\rangle - |{\downarrow}\rangle)$$

los correspondientes autovalores se obtiene aplicando ρ sobre estos autovectores:

$$\rho\,|{\uparrow_x}\rangle = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + \sigma_x)\,|{\uparrow_x}\rangle = |{\uparrow_x}\rangle \qquad \rho\,|{\downarrow_x}\rangle = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + \sigma_x)\,|{\downarrow_x}\rangle = 0$$

por lo que en esa base:

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}$$

que corresponde al estado puro $|\psi\rangle = |{\uparrow_x}\rangle$, y $\rho = |{\uparrow_x}\rangle\langle{\uparrow_x}|$. Todos sus autovalores de ρ son nulos excepto uno.

En forma alternativa, vemos que el estado ρ puede factorizarse en la forma

$$\rho = \frac{1}{\sqrt{2}}(|{\uparrow}\rangle + |{\downarrow}\rangle)\frac{1}{\sqrt{2}}(\langle{\uparrow}| + \langle{\downarrow}|) = |\psi\rangle\langle\psi|$$

Valor medio del spin Siendo el estado puro calculamos

$$\langle\sigma_x\rangle = \langle{\downarrow_x}|\,\sigma_x\,|{\uparrow_x}\rangle = \frac{\hbar}{2}$$
$$\langle\sigma_y\rangle = \langle{\uparrow_x}|\,\sigma_y\,|{\uparrow_x}\rangle = 0$$
$$\langle\sigma_y\rangle = \langle{\downarrow_x}|\,\sigma_z\,|{\uparrow_x}\rangle = 0$$

el cálculo se puede hacer reemplazando la expresión correspondiente a $|{\uparrow_x}\rangle$ en estas expresiones. Obteniéndose finalmente:

$$\langle\boldsymbol{\sigma}_x\rangle = \frac{\hbar}{2}\hat{x}$$

(b) y (c) se deja de ejercicio a les alumnes.

(e) Escribimos la matriz de ρ y hacemos el cálculo de ρ^2

$$\rho = \frac{1}{10}\begin{pmatrix}8 & 3\\ 3 & 2\end{pmatrix}$$
$$\rho^2 = \frac{1}{100}\begin{pmatrix}73 & 30\\ 30 & 13\end{pmatrix}$$

La pureza es $tr(\rho^2) = \frac{86}{100} < 1$, por lo que ρ es un estado mixto (no puro).

Valor medio del spin Siendo el estado mixto calculamos

$$\begin{aligned}\langle \sigma_x \rangle &= tr(\sigma_x \rho) = \frac{3\hbar}{10} \\ \langle \sigma_y \rangle &= tr(\sigma_y \rho) = 0 \\ \langle \sigma_y \rangle &= \mathrm{tr}(\sigma_x \rho) = \frac{3\hbar}{10}\end{aligned}$$

el cálculo se puede hacer reemplazando la expresión correspondiente de ρ en estas expresiones y operando con σ_j. Alternativamente se puede multiplicar las matrices de los operadores y hallar la traza. Obteniendo finalmente:

$$\langle \boldsymbol{\sigma}_x \rangle = \frac{3\hbar}{10}(\hat{x} + \hat{z})$$

4. Problema 8

Bola de Bloch Considere un sistema de *spin* 1/2.

(a) Muestre que la matriz densidad se puede siempre escribir en la forma

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

donde $\mathbb{I}$ es el operador identidad, y $\boldsymbol{P} \in \mathbb{R}^3$. (Sugerencia: use los resultados ya mostrados en las guías anteriores; en particular use que el operador hermítico más general posible en dimensión 2 es de la forma $A = a_0\mathbb{I} + \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma}$, con $a_0 \in \mathbb{R}$, $\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^3$).

(b) Calcule la pureza de ρ y encuentre cómo se relaciona con $\boldsymbol{P}$. En particular, ¿qué satisface $\boldsymbol{P}$ si el estado es puro? ¿y si es mixto? Relacione esto con la representación en la esfera de Bloch para estados de *spin*1/2. (Ayuda: recordar las propiedades que satisfacen las matrices de Pauli)

(c) Calcule $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$. ¿Cuál es la interpretación física de $\boldsymbol{P}$?

(d) Suponga que se sabe que se tiene un ensamble de spin 12 en un estado puro y suponga que se mide $\langle S_z \rangle$ y $\langle S_x \rangle$. ¿Puede terminar unívocamente el estado del sistema? ¿Cuánto vale $\langle S_y \rangle$? Si ahora en cambio el sistema puede estar en un estado mixto, ¿basta con conocer $\langle S_z \rangle$ y $\langle S_x \rangle$ para determinar el estado del sistema?

(a) Partamos de la matriz densidad mas general posible en sistemas de dimensión 2 (por ejemplo spin 1/2). Sabemos que ρ debe ser hermítica y de traza unidad. Por eso planteamos:

$$\rho = \begin{pmatrix} \alpha & \gamma - i\delta \\ \gamma + i\delta & \beta \end{pmatrix}$$

Esta matriz representa un operador hermítico pues $\rho = \rho^{t*}$, siendo los cuatro parámetros reales. Como la traza es unidad: $\alpha + \beta = 1$. Tratemos de extraer de esta matriz los operadores $\{\mathbb{I}, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$. Para ello usemos que:

$$\alpha = \frac{1}{2}(\alpha + \beta) + \frac{1}{2}(\alpha - \beta)$$
$$\beta = \frac{1}{2}(\alpha + \beta) - \frac{1}{2}(\alpha - \beta)$$

de los primeros términos sale la matriz $\mathbb{I}$ y de los segundos términos sale σ_z. Del mismo modo en los elementos fuera de la diagonal el primer término da lugar a una σ_x y el segundo a σ_y, por consiguiente obtenemos:

$$\rho = \frac{1}{2}(\alpha + \beta)\mathbb{I} + \frac{1}{2}(\alpha - \beta)\sigma_z + \gamma\sigma_x + \delta\sigma_y$$

Ahora basta con renombrar los parámetros: $\alpha - \beta = P_z$, $2\gamma = P_x$, $2\delta = P_y$ y usando que $\alpha + \beta = 1$ obtenemos:

$$\boxed{\rho = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + \boldsymbol{P} \cdot \boldsymbol{\sigma})}$$

Se deja a los alumnos usar la sugerencia del problema.

(b) Recordemos que la pureza es $tr(\rho^2)$,

$$tr(\rho^2) = tr[\frac{1}{2}(\mathbb{I} + \boldsymbol{P} \cdot \boldsymbol{\sigma})\frac{1}{2}(\mathbb{I} + \boldsymbol{P} \cdot \boldsymbol{\sigma})] = \frac{1}{4}tr[\mathbb{I} + 2\boldsymbol{P} \cdot \boldsymbol{\sigma} + |\boldsymbol{P}|^2 \underbrace{(\hat{\boldsymbol{P}} \cdot \sigma)^2}_{\mathbb{I}}]$$

donde se usó que $tr(\sigma_j) = 0$. Como $tr(\mathbb{I}) = 2$, la pureza es:

$$\boxed{tr(\rho^2) = \frac{1}{2}(1 + |\boldsymbol{P}|^2)}$$

Para el estado puro sabemos que la pureza es máxima y de valor unidad, por lo que: $|\boldsymbol{P}|^2 = 1$ y $\boldsymbol{P} = \hat{\boldsymbol{P}}$. La matriz densidad es el proyector sobre el autoestado de $\hat{\boldsymbol{P}} \cdot \sigma$ con autovalor 1. La representación en la esfera de Bloch es un punto sobre la superficie (de radio unidad), en la dirección del vector $\hat{\boldsymbol{P}}$.

El caso de estados mixtos corresponde a $|\boldsymbol{P}|^2 < 1$. El estado se puede representar como un punto al interior de la esfera de Bloch, dado por el vector $\boldsymbol{P}$.

El caso límite de mezcla de estados se da cuando $|\boldsymbol{P}|^2 = 0$, todos estos estados están representados por el punto central de la esfera de Bloch, y la pureza es $1/D = 1/2$.

(c) Calculemos $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_\rho$,

$$
\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_\rho &= tr(\rho \boldsymbol{\sigma}) \\
&= tr[\frac{1}{2}(\mathbb{I} + \boldsymbol{P} \cdot \boldsymbol{\sigma})\boldsymbol{\sigma}] \\
&= \frac{1}{2}[\underbrace{tr(\boldsymbol{\sigma})}_{\mathbf{0}} + \underbrace{tr(P_x \sigma_x \boldsymbol{\sigma})}_{2P_x\hat{x}} + \underbrace{tr(P_y \sigma_y \boldsymbol{\sigma})}_{2P_y\hat{y}} + \underbrace{tr(P_z \sigma_x \boldsymbol{\sigma})}_{2P_z} \hat{z}]
\end{aligned}
$$

donde se usa que que $tr(\sigma_j \sigma) = tr(\sigma_j \sigma_x \hat{x} + \sigma_j \sigma_y \hat{y} + \sigma_j \sigma_z \hat{z})) = tr(\sigma_j^2 \hat{j}) = 2\hat{j}$, la única contribución viene de la componente j, pues en los otros casos los productos de matrices de Pauli dan otra matriz de Pauli con traza nula. Por lo que obtenemos:

$$\boxed{\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_\rho = \boldsymbol{P}}$$

Vemos que $\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{P}$ da el valor medio del spin del electrón.

(d) Con el resultado anterior, se deja a les alumnes este punto.