Física Teórica 2 - Guía 4: Matriz densidad

Vladimir Daniel Rodríguez Chariarse

28 de abril de 2022

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:

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

de donde obtenemos:

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

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:

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

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:

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

que significa que cada vez que se mide a_j con probabilidad $\text{Prob}(a_j|\rho)$ 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 3

Se fabrican dos haces parcialmente polarizados de partículas de spin 1, según las siguientes proporciones:

1. 50 % del autoestado $+\hbar$ en la dirección $\hat{\boldsymbol{z}}$, 50 % del autoestado $-\hbar$ en la dirección $\hat{\boldsymbol{z}}$.

2. 50 % del autoestado $+\hbar$ en la dirección $\hat{\boldsymbol{x}}$, 50 % del autoestado $-\hbar$ en la dirección $\hat{\boldsymbol{x}}$.

Muestre que ambos dan el mismo $\langle \boldsymbol{S} \rangle$, pero que las matrices densidad son distintas. Discuta cómo podría distinguirlos en un experimento.

Usaremos las base que diagonaliza $S_z = \hbar(|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|)$ y la que diagonaliza $S_x = \hbar(|+,x\rangle\langle+,x| + |-,x\rangle\langle-,x|)$. Para comparar las matrices densidad se las debe expresar en una misma base.

(a) $\rho_1 = \frac{1}{2}|+\rangle\langle+| + \frac{1}{2}|-\rangle\langle-|$, y su forma matricial en la base que diagonaliza S_z es:

$$\rho_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Para calcular los valores medios $\langle S_i \rangle$ es útil expresar $\rho_1 = \frac{1}{2}(\mathbb{I} - |0\rangle\langle 0|)$. Por lo que

$$\begin{aligned} \langle S_i \rangle =& tr(\rho_1 S_i) \\ =& \frac{1}{2} tr(S_i - S_i |0\rangle\langle 0|) \\ =& \frac{1}{2}(0 - \langle 0|S_i|0\rangle) = 0 \end{aligned}$$

Donde se usó que $\langle 0|S_i|0\rangle$ (usamos el apunte teórico o el enunciado de la entrega 2). Es útil verificar este resultado de un modo convencional.

(b) $\rho_2 = \frac{1}{2}|+,x\rangle\langle+,x| + \frac{1}{2}|-,x\rangle\langle-,x| = \frac{1}{2}(\mathbb{I} - |0,x\rangle\langle 0,x|)$. Podemos expresar en la base que diagonaliza S_z usando el autoestado $|0,x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle)$ (entrega 2):

$$\begin{aligned} \rho_2 &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{2}\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Para calcular los valores medios $\langle S_i|S_i \rangle$ es útil expresar $\rho_1 = \frac{1}{2}(\mathbb{I} - |0\rangle\langle 0|)$. Por lo que

$$\begin{aligned} \langle S_i \rangle =& tr(\rho_1 S_i) \\ =& \frac{1}{2} tr(S_i - S_i |0,x\rangle\langle 0,x|) \\ =& \frac{1}{2}(0 - \langle 0,x|S_i|0,x\rangle) = 0 \end{aligned}$$

Donde se usó que $\langle 0,x|S_i|0,x\rangle = \frac{1}{2}(\langle+|S_i|+\rangle - \langle+|S_i|-\rangle - \langle-|S_i|+\rangle + \langle-|S_i|-\rangle = 0$ (entrega 2).

Por lo que para dos matrices densidad distintas obtenemos los mismos resultados de valores medios en las tres componentes del vector spin$\vec{S}$. La forma de obtener resultados distintos (los sistemas cuánticos son distintos al tener distinta matriz densidad) es midiendo otros observables, como por ejemplo S_x^2 como es posible y útil verificar.