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

Vladimir Daniel Rodríguez Chariarse

26 de abril de 2023

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

$$\rho_{AB} = \sum_{ij,kl} \rho_{ij,kl} |\psi_i\rangle_A \otimes |\phi_j\rangle_B \langle\psi_k|_A \otimes \langle\phi_l|_B \equiv \sum_{ij,kl} \rho_{ij,kl} |\psi_i\rangle\langle\psi_k|_A \otimes |\phi_j\rangle\langle\phi_l|_B$$

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:

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

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

$$\rho_A = tr_B(\rho_{AB}) = \sum_{ij,kl} \rho_{ij,kl} |\psi_i\rangle\langle\psi_k|_A \underbrace{tr_B(|\phi_j\rangle\langle\phi_l|_B)}_{\langle\phi_l|\phi_j\rangle}$$

en estas expresiones se usa la propiedad distributiva de la traza con respecto a la suma y que $tr_{AB}(Q_A \otimes R_B) = tr_A(Q_A) tr_B(R_B)$. De igual modo se define $\rho_B = tr_A(\rho_{AB})$.

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

$$\begin{aligned}\rho_1 &= tr_{23}(\rho_{123}) \\ &= \frac{1}{3}\underbrace{tr_{23}(\left|0\right\rangle\!\left\langle 0\right| \otimes \left|01\right\rangle\!\left\langle 01\right|)}_{\left|0\right\rangle\left\langle 0\right|} + \frac{1}{3}\underbrace{tr_{23}(\left|0\right\rangle\!\left\langle 0\right| \otimes \left|10\right\rangle\!\left\langle 10\right|)}_{\left|0\right\rangle\left\langle 0\right|} + \frac{1}{3}\underbrace{tr_{23}(\left|1\right\rangle\!\left\langle 1\right| \otimes \left|00\right\rangle\!\left\langle 00\right|)}_{\left|1\right\rangle\left\langle 1\right|} + \\ &\quad \frac{i}{3}\underbrace{tr_{23}(\left|0\right\rangle\!\left\langle 0\right| \otimes \left|01\right\rangle\!\left\langle 10\right|)}_{\left|0\right\rangle\left\langle 0\right|\langle 01|10\rangle = 0} - \frac{i}{3}\underbrace{tr_{23}(\left|0\right\rangle\!\left\langle 0\right| \left|10\right\rangle\!\left\langle 01\right|)}_{\left|0\right\rangle\left\langle 0\right|\langle 10|01\rangle = 0}\end{aligned}$$

de donde:

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

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 es mayor a $\frac{1}{D_1} = \frac{1}{2}$.

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 $S_{z1} = S_{z1} \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \mathbb{I}_3$

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

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, y 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)

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

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

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

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:

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:

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

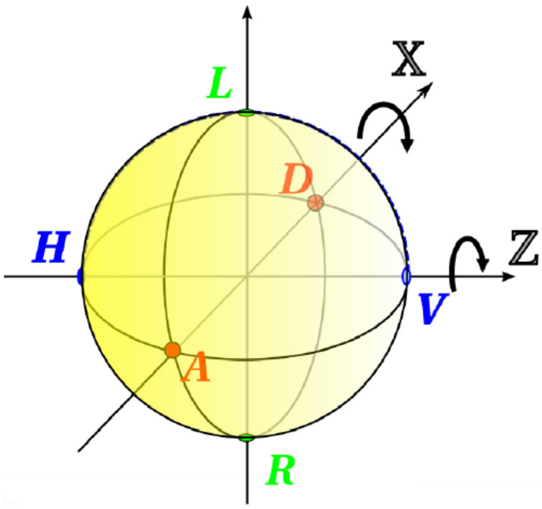

Figura 1: *Esfera de Bloch para polarización de fotones.*

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

(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:

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

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:

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

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 $|\Psi^-\rangle$.