Física Teórica 2 - Guía 4: Matriz densidad

Vladimir Daniel Rodríguez Chariarse

30 de abril de 2023

1. 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:

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

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

1.1. 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

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

1.2. 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.

2. 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 ($S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$)

Método 1: Siendo el estado puro calculamos

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

el primer resultado es directo pues $|\uparrow_x\rangle$ es autoestado de σ_x, los otros dos son triviales si recordamos que las bases son mutuamente no sesgadas. Alternativamente se puede reemplazar la expresión correspondiente a $|\uparrow_x\rangle$ en estas expresiones. Obteniéndose finalmente:

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

Método 2: Podemos usar que $\langle\sigma_i\rangle = tr(\sigma_i\rho)$:

$$\langle\sigma_i\rangle = tr(\sigma_i\rho)$$

Por ejemplo para $\langle\sigma_y\rangle$ $\langle\sigma_i\rangle = tr(\sigma_i\rho)$:

$$\begin{aligned}\langle\sigma_y\rangle &= tr(\sigma_y\rho)\\ &= tr\left(\sigma_y\frac{1}{2}\left(|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|\right)\right)\\ &= \frac{1}{2}tr\left(i\,|\downarrow\rangle\langle\uparrow| + i\,|\downarrow\rangle\langle\downarrow| - i\,|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + i\,|\uparrow\rangle\langle\downarrow|\right)\\ &= 0\end{aligned}$$

(b), (c) y d) se deja de ejercicio a les alumnes (alguno se explicó en clase).

(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

$$\langle \sigma_x \rangle = tr(\sigma_x \rho) = \frac{3}{10}$$
$$\langle \sigma_y \rangle = tr(\sigma_y \rho) = 0$$
$$\langle \sigma_z \rangle = \mathrm{tr}(\sigma_z \rho) = \frac{6}{10}$$

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:

$$\langle \boldsymbol{S} \rangle = \frac{3\hbar}{20}(\hat{x} + 2\hat{z})$$

3. 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 les alumnes 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 $\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_\rho$,

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

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.