Física Teórica 2 - Guía 4: Matriz densidad

Vladimir Daniel Rodríguez Chariarse

29 de abril de 2024

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

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

(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:

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

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

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

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:

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

Por ejemplo para $\langle\sigma_y\rangle$:

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

donde se usa la linealidad de la traza y que $tr(|\alpha\rangle\langle\beta| = \langle\beta|\alpha\rangle)$.
(b) Este estado es formado por autoestados del spin S_z con igual probabilidad. Vemos que en esa base: $\rho = \mathbb{I}/2$. Luego tendremos que los valores medios del espín en las tres direcciones se anula (usando que la traza de las matrices de Pauli son cero).
(c) Deben verificar que el estado es puro, y por inspección pueden encontrar por facturación dicho estado. Obtengan los valores medios de las componentes del espín usando la traza correspondiente.
d) 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 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 espín $S = 1/2$ 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:

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{2}(\alpha + \beta) + \frac{1}{2}(\alpha - \beta) \\ \beta &= \frac{1}{2}(\alpha + \beta) - \frac{1}{2}(\alpha - \beta) \end{aligned}$$

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. Por ello se le llama vector de polarización del estado. Dado ese vector es suficiente para determinar la matriz densidad del estado. Midiendo los valores medios del espín se obtiene en $d = 2$ el estado del sistema.

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