Teoría Avanzada de la Termodinámica – 2do cuatrimestre de 2020

Guía 5: *Matriz densidad y Entropía de von Neumann*

1. El estado de un sistema formado por un solo fotón se define del siguiente modo: con probabilidad $1/2$ el fotón es producido en el estado de polarización lineal según x, llamado $|X\rangle$, y con probabilidad $1/2$ en el estado con polarización lineal según y, llamado $|Y\rangle$. Los estados $|X\rangle$ y $|Y\rangle$ son ortogonales.

   a) Usando los proyectores $|X\rangle\langle X|$ y $|Y\rangle\langle Y|$, escribir el operador matriz densidad ρ que corresponde al mecanismo de producción antes detallado. Dar la representación matricial de este operador en la base ortonormal compuesta por los vectores $|X\rangle$ y $|Y\rangle$.

   b) Calcular la entropía de von Neumann del estado descripto por ρ.

   El fotón se emite ahora con una probabilidad $1/2$ en el estado de polarización circular derecha, $|R\rangle$, y con probabilidad $1/2$ en el estado con polarización circular izquierda, $|L\rangle$, donde

   $$|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|X\rangle + i\,|Y\rangle\right), \qquad\qquad |L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|X\rangle - i\,|Y\rangle\right).$$

   c) Escribir el operador matriz densidad de los fotones generados mediante este mecanismo, primero en términos de los proyectores sobre los estados $|R\rangle$ y $|L\rangle$, y luego en términos de los proyectores sobre los estados con polarización lineal $|X\rangle$ y $|Y\rangle$. Asimismo, escribir las matrices del operador matriz densidad en estas dos bases.

   d) Si sus cálculos son correctos, habrá notado que los dos mecanismos de producción generan el mismo estado. Demostrar que en cualquier base ortonormal, el método de producción puede describirse como una mezcla 50 % – 50 % de cada elemento de la base.

2. Un polarizador perfecto emite partículas de espín $1/2$ con proyección del espín $+1/2$ según un versor $\hat{n}$ definido por los ángulos polares θ y φ, es decir, $\hat{n} = \sin\theta\cos\varphi\,\hat{x} + \sin\theta\sin\varphi\,\hat{y} + \cos\theta\,\hat{z}$. En términos de la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ asociada al operador s_z, las partículas emitidas por el polarizador están en el estado

   $$|\Psi_{\hat{n}}\rangle = \cos\tfrac{\theta}{2}\, e^{-i\varphi/2}\,|+\rangle + \sin\tfrac{\theta}{2}\, e^{i\varphi/2}\,|-\rangle\,.$$

   a) Escriba la matriz densidad del estado $|\Psi_{\hat{n}}\rangle$ en la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$.

   b) Muestre que la matriz densidad puede escribirse como $\rho = \frac{1}{2}\left(\mathbb{I} + \boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{n}\right)$, donde $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, con σ_i las matrices de Pauli.

   c) Muestre que si el sistema no se encuentra necesariamente en un estado puro, su matriz densidad puede también escribirse como $\rho = \frac{1}{2}\left(\mathbb{I} + \boldsymbol{\sigma}\cdot\vec{r}\right)$, donde ahora $|\vec{r}| \leq 1$.

   d) Muestre que $|\vec{r}| = 1$ si y sólo si el estado es puro. Observe entonces que todo estado puro puede representarse como un vector sobre la superficie de la llamada esfera de Bloch, y los estados mixtos como puntos en el interior de la esfera.

   e) ¿Cuál es la entropía de von Neumann asociada a la matriz densidad general? Relacione su resultado con la pureza del estado.

f) Un horno emite partículas de espín un medio, sin favorecer ninguna dirección en particular. Es decir, la densidad de probabilidad de que una partícula sea emitida con polarización positiva según la dirección de cualquier versor $\hat{n}$ es constante e igual a $1/4\pi$. Puede decirse entonces que el estado cuántico de este ensamble de partículas es una mezcla estadística homogénea de los estados $|\Psi_{\hat{n}}\rangle$. Escribir la matriz densidad del ensamble de partículas emitidas por el horno y calcular su entropía de von Neumann.

g) Calcular los valores medios de los operadores s_x, s_y y s_z en el estado descripto en el ítem anterior.

3. Un estado mezcla de una partícula de espín 1/2 se define del siguiente modo: con probabilidad 1/2 la partícula es preparada en el estado $|+\rangle$, y con probabilidad 1/2 en el estado $(|+\rangle + |-\rangle)/\sqrt{2}$. Escribir la matriz densidad en la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ y calcular la entropía. Dar la composición del estado mezcla en términos de los autovectores de la matriz densidad.

4. Los estados estacionarios de un espín 1/2 en un campo magnético $\mathbf{B} = B_0\,\hat{z}$ son los autovectores $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ del operador s_z. Sus autoenergías son $E_\pm = \pm\hbar\omega_0/2$, con $\omega_0 = -\gamma B_0$, donde γ es el factor giromagnético. En equilibrio a temperatura T, el operador matriz densidad es

$$\rho = \frac{e^{-H/k_\mathrm{B}T}}{Z},$$

donde H es el Hamiltoniano del sistema y Z es la función de partición, definida de tal modo que ρ tenga traza unidad:

$$Z = \mathrm{Tr}\, e^{-H/k_\mathrm{B}T}$$

Escriba la representación del operador matriz densidad en la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ y calcule los valores medios de los operadores s_x, s_y y s_z. Calcule la entropía de von Neumann y relaciónela con lo que esperaría obtener clásicamente.

5. La base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ describe un sistema elemental de dos niveles. Un sistema consta de dos de estos sistemas elementales. El estado del sistema compuesto es el estado puro

$$|\Psi\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\,|0\rangle_A\,|1\rangle_B + |1\rangle_A\,|0\rangle_B\,\big),$$

donde las letras A y B distinguen a cada subsistema elemental.

a) Escribir la matriz densidad del sistema compuesto, ρ_{AB}.

b) Escribir las matrices reducidas de cada sistema, ρ_A y ρ_B. ¿Se trata de matrices que corresponden a estados puros o mezcla?

c) Ídem para el estado compuesto

$$|\Psi\rangle_{AB} = \frac{1}{2}\big(\,|1\rangle_A\,|1\rangle_B + |1\rangle_A\,|0\rangle_B + |0\rangle_A\,|1\rangle_B + |0\rangle_A\,|0\rangle_B\,\big).$$

d) En ambos casos, calcule la entropía de entrelazamiento del estado ρ_{AB}, definida como la entropía de von Neumann de cualquiera de sus subsistemas.

e) Compare la entropía de los subsistemas con la entropía del sistema total, y muestre que verifica la propiedad de subaditividad.

6. (Peres 9.11) Tres métodos de preparación diferente para una partícula de espín $\frac{1}{2}$ están representados por los estados:

$$|\Psi_1\rangle = |-\rangle \qquad |\Psi_2\rangle = -\frac{1}{2}\left(|-\rangle - \sqrt{3}|+\rangle\right) \qquad |\Psi_3\rangle = -\frac{1}{2}\left(|-\rangle + \sqrt{3}|+\rangle\right),$$

donde $|\pm\rangle$ son los autoestados de σ_z con autovalor ± 1. Si los tres estados son equiprobables, calcule la entropía de Shannon y la entropía de von Neumann. Muestre que si hay n partículas preparadas de esta manera (todas en el mismo estado, de forma que sigue habiendo sólo tres estados posibles para todo el sistema) la entropía de von Neumann tiende asintóticamente a la entropía de Shannon cuando $n \to \infty$. **Sugerencia:** considere tres vectores reales y unitarios u_i que formen ángulos iguales: $u_i \cdot u_j = c$ si $i \neq j$, y muestre que los autovalores no nulos de $\sum u_i u_i^T$ son $1 - c$, $1 - c$, y $1 + 2c$.

7. El campo electromagnético (EM) cuantizado dentro de una cavidad puede describirse como un oscilador armónico cuántico. Consideramos un único modo del campo EM que interactúa con un átomo que puede ser descripto como un sistema de dos niveles, con estados $|g\rangle$ y $|e\rangle$. La interacción entre el campo EM y el átomo puede resultar en un estado en el que ambos grados de libertad se encuentran entrelazados, por ejemplo

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|g\rangle \otimes |\alpha\rangle + |e\rangle \otimes |-\alpha\rangle\right),$$

donde $|\alpha\rangle$ es el estado coherente tal que $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$, donde a es el operador de destrucción correspondiente al modo del campo EM que estamos considerando, y α es un número complejo que representa el desplazamiento del paquete Gaussiano respecto del estado de vacío. Más explícitamente,

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle,$$

donde $|n\rangle$ son los autoestados del operador número, $a^\dagger a\,|n\rangle = n|n\rangle$.

a) Escriba la matriz densidad del sistema en el estado $|\psi\rangle$.

b) Obtenga la matriz densidad reducida para el sistema atómico.

c) Calcule la pureza del sistema atómico, y analice los límites $|\alpha| \to \infty$ y $|\alpha| \to 0$. Interprete sus resultados en función del entrelazamiento del estado inicial.

d) Calcule la entropía de entrelazamiento y grafíquela en función de $|\alpha|$. Analice los mismos límites que en el ítem anterior e interprete.

8. Igual que la entropía de Shannon, la entropía de von Neumann cumple la propiedad de subaditividad fuerte,

$$S(\rho_{ABC}) + S(\rho_B) \leq S(\rho_{AB}) + S(\rho_{BC}).$$

Sin embargo, a diferencia del caso de Shannon, esta propiedad es difícil de probar en el caso de von Neumann (para hacerse una idea, la propiedad fue conjeturada en 1966 y no fue hasta 1973 que se pudo probar). Este problema, pensado para hacer en la computadora, es para convencerse numéricamente de que la propiedad se cumple.

a) Genere una matriz densidad 2×2 al azar. Para hacer eso, genere primero una matriz 2×2 compleja X al azar, y defina

$$\rho = \frac{XX^\dagger}{\mathrm{Tr}(XX^\dagger)}.$$

Genere muchas de estas matrices densidad, y compruebe que todo anda bien calculando los autovalores y viendo que son positivos y suman 1. Calcule la entropía de estas matrices densidad, y verifique que queda siempre entre 0 y $\log 2$.

b) Vuelva a generar matrices densidad al azar, pero esta vez 8×8. Vamos a interpretarlas como estados de un sistema de tres qubits, los qubits A, B y C. Calcule las matrices densidad reducidas

$$\rho_{AB} = \sum_{i=1}^{2} (\mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes e_i)\, \rho\, (\mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes e_i)^T$$

$$\rho_{BC} = \sum_{i=1}^{2} (e_i \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1})\, \rho\, (e_i \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1})^T$$

$$\rho_{B} = \sum_{i,j=1}^{2} (e_i \otimes \mathbb{1} \otimes e_j)\, \rho\, (e_i \otimes \mathbb{1} \otimes e_j)^T,$$

donde $\mathbb{1}$ es la identidad 2×2 y $e_i \in \mathbb{R}^2$ es el vector **fila** de componentes $(e_i)_j = \delta_{ij}$. Los productos tensoriales se pueden calcular en Python con la función numpy.kron, que ya los expresa en la forma matricial adecuada. Calcule la entropía de todas estas matrices densidad y compruebe que se cumple la subaditividad fuerte.