Guía 5: Matriz densidad y Entropía de von Neumann

Termodinámica Avanzada - 2°C 2020

Índice

1. Resumen del resumen

Muchas de las cosas que veremos a continuación serán las que usaremos a lo largo de estas notas y, además, las que se tendrán que usar para los ejercicios de la guía. Más que un resumen, en cierto modo es una especie de compendio de las ecuaciones y definiciones a tener en cuenta.

1.1. Matriz densidad

Hemos visto que la información sobre los **estados** viene dada por la matriz densidad ρ. A su vez, dicha noción de estado, en forma general, viene dada por un **ensamble** $\{|\psi_i\rangle, p_i\}$ donde $|\psi_i\rangle$ son los estados de dicho ensamble y p_i las probabilidades de los estados. En particular, si el ensamble consta de un solo ket, decimos que el estado es **puro**. Si consta de más de uno, decimos que es **mixto**.

Estado puro: Si el estado es puro $\longrightarrow \rho = |\psi\rangle \langle\psi|$ con $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$.

- $\operatorname{Tr}\rho = \sum_a \langle a|\rho|a\rangle = 1$
- $\operatorname{Tr}(\rho A) = \langle A\rangle$ (en general, no solo para estados puros)
- $\rho^2 = \rho \Longrightarrow \operatorname{Tr}\rho^2 = 1$

Estado mixto: Un método genera el estado $|\psi_i\rangle$ con probabilidad p_i tal que $\sum_i p_i = 1$ entonces $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i|$.

- $\mathrm{Tr}\,\rho = 1$
- $\rho^2 \neq \rho \Longrightarrow \mathrm{Tr}\,\rho^2 < 1$

En general,

$$\boxed{\mathrm{Tr}\,\rho^2 \leq 1} \tag{1}$$

1.2. Entrelazamiento

Consideremos un estado puro bipartito tal que $|\psi\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$.

Decimos que es **separable** o **producto** si $\exists\ |\psi_A\rangle \in \mathcal{H}_A$ y $|\psi_B\rangle \in \mathcal{H}_B$ tales que $|\psi\rangle \equiv |\psi_{AB}\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$

Si $\nexists$ decimos que el estado está **entrelazado**.

Consideremos ahora la matriz densidad del sistema bipartito ρ_{AB}. Definimos las matrices densidad reducidas según

$$\rho_A = \mathrm{Tr}_B\,\rho_{AB} \qquad\qquad \rho_B = \mathrm{Tr}_A\,\rho_{AB}$$

donde $\mathrm{Tr}_i\,\rho_{ij} = \sum_i \langle i|\,\rho_{ij}\,|i\rangle$.

Decimos que un estado puro $\rho_{AB} = |\psi_{AB}\rangle\langle\psi_{AB}|$ está **maximamente entrelazado** si

$$\rho_A = \mathrm{Tr}_B\,\rho_{AB} = \frac{\mathbb{1}}{\mathrm{dim}\mathcal{H}_A} \tag{2}$$

y análogo para ρ_B. A su vez,

$$|\psi\rangle\,\text{separable} \iff \rho_A\,\text{puro} \qquad\qquad |\psi\rangle\,\text{entrelazado} \iff \rho_A\,\text{mixto}$$

1.3. Entropía

Dado un estado $\rho \in \mathcal{H}$, definimos su **entropía de Von Neumann** según

$$S(\rho) = -\,\mathrm{Tr}\,(\rho\cdot\log\rho) = -\sum_i \lambda_i \log\lambda_i \tag{3}$$

con λ_i los autovalores de ρ. Esta entropía cuantifica el grado de mezcla de ρ; esto es, $S(\rho)$ es mínima si ρ es puro, y es máxima si ρ todos sus autovalores son iguales. Algunas propiedades que satisface dicha entropía son las siguientes:

- $S(\rho) \geq 0$ (y es $= 0$ sii ρ puro)
- Si $\mathrm{dim}\mathcal{H} = d$, entonces $S(\rho) \leq \log d$ (y es $= \log d$ sii $\rho = \mathbb{1}/d$)
- Si tenemos autovalores nulos, se define $S(0) = 0\log 0 = 0$

Si ahora queremos hablar de *entrelazamiento*, vamos a referirnos a las matrices densidad reducidas, y vamos a hablar de la **entropía de entrelazamiento** $S(\rho_A)$ (análogo $S(\rho_B)$) definida como la entropía de Von Neumann para el subsistema correspondiente, que satisface, entre otras cosas

- $S(\rho_A) = 0$ sii ρ_{AB} es separable
- $S(\rho_A)$ es máxima sii ρ_{AB} está máximamente entrelazado.

2. Ejercicio 3

Tenemos dos estados

$$|a\rangle \equiv |+\rangle\,, \qquad |b\rangle \equiv \frac{|+\rangle + |-\rangle}{\sqrt{2}} \tag{4}$$

ambos con probabilidad 1/2. La matriz densidad la calculamos, entonces, según

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{2}\,|a\rangle\,\langle a| \,+\, \frac{1}{2}\,|b\rangle\,\langle b| && (5)\\ &= \frac{1}{2}\,|+\rangle\,\langle +| \,+\, \frac{1}{4}\big(\,|+\rangle + \langle -|\,\big)\big(\,\langle +| + \langle -|\,\big) && (6)\\ &= \frac{3}{4}\,|+\rangle\,\langle +| \,+\, \frac{1}{4}\,|+\rangle\,\langle -| \,+\, \frac{1}{4}\,|-\rangle\,\langle +| \,+\, \frac{1}{4}\,|-\rangle\,\langle -| && (7) \end{aligned}$$

A su vez, podemos escribir la matriz densidad en forma matricial, en base $B = \{|+\rangle\,, |-\rangle\}$, lo cual nos resultará más sencillo y agradable a la vista:

$$\rho = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \tag{8}$$

Como queremos la entropía, lo que debemos hacer es calcular los autovalores de la matriz ρ. Para hacer eso vamos a calcular el determinante $\det(\rho - \lambda\mathbb{1})$. Pero para simplificar un poco más aún los cálculos, vamos a llamar $\tilde{\rho} = 4\rho$ de manera de deshacernos del factor 1/4. De esta manera,

$$\det(\tilde{\rho} - \tilde{\lambda}\mathbb{1}) = (3 - \tilde{\lambda})(1 - \tilde{\lambda}) - 1 \implies \tilde{\lambda}_{1,2} = 2 \pm \sqrt{2} \quad \implies \quad \lambda_{1,2} = \frac{2 \pm \sqrt{2}}{4} \tag{9}$$

y por lo tanto la entropía resulta

$$S(\rho) = -\lambda_1 \log \lambda_1 - \lambda_2 \log \lambda_2 \simeq 0.42 \tag{10}$$

Notemos que, como era de esperar, si calculamos la entropía de Shannon para este sistema (que es equiprobable), resulta

$$S(p) = \log 2 \simeq 0.69 \quad \implies \quad S(\rho) < S(p) \tag{11}$$

Por último, teniendo los autovalores, podríamos calcular los autovectores asociados para así obtener una nueva expresión para ρ en términos de los mismos. Esto es,

$$\rho = \lambda_1\,|v_1\rangle\,\langle v_1| \,+\, \lambda_2\,|v_2\rangle\,\langle v_2| \tag{12}$$

con $|v_i\rangle$ el autovector asociado al autovalor λ_i. Los mismos resultan

$$\lambda_1 \longrightarrow |v_1\rangle = (1 + \sqrt{2})\,|+\rangle \,+\, |-\rangle \qquad \lambda_2 \longrightarrow |v_2\rangle = (1 - \sqrt{2})\,|+\rangle \,+\, |-\rangle \tag{13}$$

y por lo tanto obtenemos así la expresión para la matriz densidad en términos de sus autovectores.

3. Ejercicio 5

Tenemos un estado puro de un sistema compuesto AB dado por

$$|\Psi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|0\rangle_A |1\rangle_B + |1\rangle_A |0\rangle_B \big) \qquad \Longrightarrow \qquad \rho_{AB} = |\Psi_{AB}\rangle \langle\Psi_{AB}| \tag{14}$$

Veamos, más explícitamente y en términos de los bra y kets, cómo se escribe ρ. Para eso, si expandimos y acomodamos $|\Psi_{AB}\rangle$ llegamos a que

$$\rho_{AB} = \frac{1}{2}\Bigg(|0\rangle\langle 0|_A \otimes |1\rangle\langle 1|_B + |0\rangle\langle 1|_A \otimes |1\rangle\langle 0|_B + |1\rangle\langle 0|_A \otimes |0\rangle\langle 1|_B + |1\rangle\langle 1|_A \otimes |0\rangle\langle 0|_B \Bigg) \tag{15}$$

en donde reescribimos $|i\rangle_A |j\rangle_B \equiv |i\rangle_A \otimes |j\rangle_B$ para poder hacer los productos adecuadamente. En forma matricial, naturalmente, resultará una manera menos disléxica de leer la matriz densidad:

$$\rho_{AB} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{16}$$

en donde utilizamos la base $B = \{|0\rangle_A |0\rangle_B , |0\rangle_A |1\rangle_B , |1\rangle_A |0\rangle_B , |1\rangle_A |1\rangle_B\}$.

b) Teniendo la matriz densidad ρ_{AB}, la siguiente pregunta que surge es cómo resultan las matrices reducidas para cada sistema A y B. Para ver eso, tenemos que *trazear* sobre el subsistema de no interés:

$$\rho_A = \mathrm{Tr}_B\, \rho_{AB} = {}_B\langle 0| \rho_{AB} |0\rangle_B + {}_B\langle 1| \rho_{AB} |1\rangle_B = \frac{1}{2}\big(|1\rangle\langle 1|_A + |0\rangle\langle 0|_A \big)$$

$$\Longrightarrow \rho_A = \frac{\mathbb{1}}{2} = \frac{\mathbb{1}}{\dim\mathcal{H}_A} \tag{17}$$

Y, análogamente,

$$\rho_B = \mathrm{Tr}_A\, \rho_{AB} = \frac{\mathbb{1}}{2} = \frac{\mathbb{1}}{\dim\mathcal{H}_B} \tag{18}$$

es decir que los estados están máximamente mezclados o, dicho de otra manera, las matrices densidades reducidas son mixtas.

c) Si ahora en vez de tener un estado dado por la ec. (14) tenemos algo como

$$|\Psi_{AB}\rangle = \frac{1}{2}\big(|1\rangle_A |1\rangle_B + |1\rangle_A |0\rangle_B + |0\rangle_A |1\rangle_B + |0\rangle_A |0\rangle_B \big) \tag{19}$$

veamos qué sucede con las matrices densidades reducidas.

En este caso no es muy difícil notar que el estado es separable:

$$|\Psi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|1\rangle_A + |0\rangle_A \big) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|1\rangle_B + |0\rangle_B \big) \equiv |\Psi\rangle_A \otimes |\Psi\rangle_B \tag{20}$$

y por lo tanto las matrices densidades resultan puras. Para ver la forma de las matrices densidades reducidas, notemos que al ser un estado separabable

$$\rho_{AB} = |\Psi_{AB}\rangle \langle\Psi_{AB}| = |\Psi\rangle \langle\Psi|_A \otimes |\Psi\rangle \langle\Psi|_B \tag{21}$$

y por ende

$$\rho_A \;=\; |\Psi\rangle \langle\Psi|_A \;=\; \frac{1}{2}\big(\,|0\rangle \langle 0| \,+\, |0\rangle \langle 1| \,+\, |1\rangle \langle 0| \,+\, |1\rangle \langle 1|\,\big) \tag{22}$$

$$\rho_B \;=\; |\Psi\rangle \langle\Psi|_B \;=\; \frac{1}{2}\big(\,|0\rangle \langle 0| \,+\, |0\rangle \langle 1| \,+\, |1\rangle \langle 0| \,+\, |1\rangle \langle 1|\,\big) \tag{23}$$

Pero veamos ahora que, aún sin notar que el estado es separable, llegamos a los mismos resultados.

Calculando la matriz densidad según $\rho_{AB} = |\Psi_{AB}\rangle \langle\Psi_{AB}|$ llegamos a que la misma se puede escribir, de forma matricial, según

$$\rho_{AB} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \tag{24}$$

Las matrices reducidas resultan

$$\rho_A \;=\; {}_B\langle 0|\,\rho_{AB}\,|0\rangle_B \,+\, {}_B\langle 1|\,\rho_{AB}\,|1\rangle_B \;=\; \frac{1}{2}\big(\,|0\rangle \langle 0| \,+\, |0\rangle \langle 1| \,+\, |1\rangle \langle 0| \,+\, |1\rangle \langle 1|\,\big) \tag{25}$$

$$\rho_B \;=\; \frac{1}{2}\big(\,|0\rangle \langle 0| \,+\, |0\rangle \langle 1| \,+\, |1\rangle \langle 0| \,+\, |1\rangle \langle 1|\,\big) \tag{26}$$

O escritas matricialmete

$$\rho_X = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \tag{27}$$

en donde se ve fácilmente que $\rho^2 = \rho$.

d) Teniendo las matrices densidades, veamos ahora cuánto resultan las entropías de entrelazamiento para cada caso.

Sin hacer ninguna cuenta, ya podemos percatarnos que, en el primer caso al tratarse de máximo entrelazamiento, la entropía dará $S(\rho_A) = S(\rho_B) = \log 2$ donde usamos que $\dim\mathcal{H}_X$=2. A su vez, en el segundo caso al tratarse de un estado puro, $S(\rho_A) = S(\rho_B) = 0$. Al igual que antes, si no nos percatamos de esto, podemos calcular los autovalores y ver explícitamente que las entropías dan en efecto esto:

$$\rho_X = \frac{\mathbb{1}}{2} \quad\longrightarrow\quad \lambda_{12} = \frac{1}{2} \quad\Longrightarrow\quad S(\rho_A) = S(\rho_B) = \log 2 \tag{28}$$

$$\rho_X = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad\longrightarrow\quad \lambda_{12} = \{0, 1\} \quad\Longrightarrow\quad S(\rho_A) = S(\rho_B) = 0 \tag{29}$$

e) Como último ítem del ejercicio veamos que se cumple la propiedad de subaditividad, esto es, $S(\rho_{AB}) \leq S(\rho_A) + S(\rho_B)$. Para eso, vamos a tener que comparar las entropías de los subsistemas con la entropía del sistema total. Como las entropías de los subsistemas ya las tenemos, veamos cuánto dan las entropías totales:

$$\rho_{AB}^{a)} \longrightarrow \lambda_i = \{1,0,0,0\} \qquad \Longrightarrow \qquad S(\rho_{AB}) = 0 \leq S(\rho_A) + S(\rho_B) = \log 2 \tag{30}$$

$$\rho_{AB}^{c)} \longrightarrow \lambda_i = \{1,0,0,0\} \qquad \Longrightarrow \qquad S(\rho_{AB}) = 0 \leq S(\rho_A) + S(\rho_B) = 0 \tag{31}$$