Termo avanzada
Guía 5: Matriz densidad, entropía de von Neumann

Repaso relámpago de cuántica

Postulados

- **Estados.** Los estados de un sistema cuántico se representan como vectores unitarios $|\psi\rangle$ en un Hilbert $\mathcal{H}$.
- **Observables.** Los observables se representan como operadores hermíticos sobre $\mathcal{H}$.
- **Medida.** Los resultados posibles de la medida de un observable A son sus autovalores. La probabilidad de observar un autovalor a, con autovector correspondiente $|a\rangle$, en un estado $|\psi\rangle$ es $P_\psi(a) = |\langle a|\psi\rangle|^2$

  $$\begin{aligned}\Rightarrow \langle A\rangle_\psi &= \sum_a a P_\psi(a) = \sum_a a\langle\psi|a\rangle\langle a|\psi\rangle = \sum_a \langle\psi|A|a\rangle\langle a|\psi\rangle \\ &= \langle\psi|A|\psi\rangle\end{aligned}$$

  Después de medir a, el sistema pasa al estado $|a\rangle$.
- **Evolución:** ecuación de Schrödinger.

El sistema más simple

Qubit: sistema con un Hilbert de dimensión 2.

El espacio de todos los operadores sobre $\mathcal{H}$ tiene dimensión 4. Una base la forman la identidad $\mathbb{1}$ y las **matrices de Pauli**,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Matrices de Pauli

Propiedades de las matrices de Pauli:

- hermíticas y de traza 0
- $[\sigma_i, \sigma_j] \equiv \sigma_i\sigma_j - \sigma_j\sigma_i = 2i\sum_k \epsilon_{ijk}\sigma_k$
- $\{\sigma_i, \sigma_j\} \equiv \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{ij}\mathbb{1}$

Las relaciones de conmutación de $s_i \equiv \sigma_i/2$ coinciden con las de las componentes del momento angular de una partícula $\vec{L} = i\vec{r} \times \nabla$,

$$[L_i, L_j] = i\sum_k \epsilon_{ijk}L_k$$

$\Rightarrow \vec{s} = (s_x, s_y, s_z)$ se interpreta como un momento angular (el spin)

Matrices de Pauli

Para cualquier versor $\hat{n} = \sin\theta\cos\varphi\,\hat{x} + \sin\theta\sin\varphi\,\hat{y} + \cos\theta\,\hat{z}$, el observable $\hat{n}\cdot\vec{s}$ tiene autovalores $\pm 1/2$, y los autovectores son

$$
\begin{aligned}
|+_{\hat{n}}\rangle &= e^{-i\varphi/2}\cos\theta/2\,|+\rangle + e^{i\varphi/2}\sin\theta/2\,|-\rangle \\
|-_{\hat{n}}\rangle &= e^{-i\varphi/2}\sin\theta/2\,|+\rangle - e^{i\varphi/2}\cos\theta/2\,|-\rangle
\end{aligned}
$$

donde $|+\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$, $|-\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$.

Matriz densidad

Matriz densidad

Noción más general de estado: ensamble $\{|\psi_i\rangle, p_i\}$. Si el ensamble tiene un solo ket, se dice que el estado es **puro**; si tiene más de uno, es **mixto**.

Valor de expectación de un observable O:

$$\langle O\rangle = \sum_i p_i \langle\psi_i|O|\psi_i\rangle = \sum_i p_i \,\mathrm{Tr}(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|O)$$

Definiendo la **matriz densidad**

$$\rho \equiv \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$$

tenemos $\langle O\rangle = \mathrm{Tr}(\rho O) \Rightarrow$ **Toda la física del ensamble está caracterizada por su matriz densidad**.

Propiedades

(i) $\rho^\dagger = \rho$

(ii) $\langle\psi|\rho|\psi\rangle \geq 0$

(iii) $\mathrm{Tr}\,\rho = 1$

Recíprocamente, cualquier operador ρ con estas tres propiedades es una matriz densidad:

(i) $\Rightarrow \exists$ base ortonormal $\{|i\rangle\}$ propia de ρ,

$$\rho = \sum_i \lambda_i |i\rangle\langle i|,$$

y los autovalores λ_i son reales.

(ii) $\Rightarrow \lambda_i \geq 0$

(iii) $\Rightarrow \sum_i \lambda_i = 1$

$\Rightarrow$ podemos interpretar los λ_i como probabilidades, y ρ es la matriz densidad correspondiente al ensamble $\{|i\rangle, \lambda_i\}$.

Indistinguibilidad entre ensambles

En general, **puede haber más de un ensamble que dé lugar a la misma matriz densidad** $\Rightarrow$ Esos ensambles son físicamente indistinguibles.

Por ejemplo, si el ensamble $\{|\psi_i\rangle, p_i\}$ tiene matriz densidad ρ, entonces otro ensamble con la misma matriz densidad es $\{|i\rangle, \lambda_i\}$ (autovectores y autovalores de ρ).

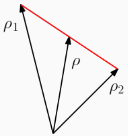
Excepción: estado puro. Supongamos $|\psi\rangle\langle\psi| = \sum_i p_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$. Entonces para cualquier $|\phi\rangle$ ortogonal a $|\psi\rangle$,

$$0 = \langle\phi|\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle = \sum_i p_i|\langle\phi|\psi_i\rangle|^2$$

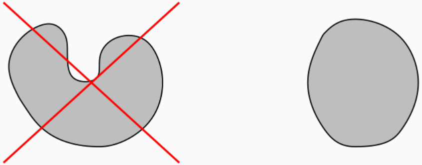
$\Rightarrow \langle\phi|\psi_i\rangle = 0 \Rightarrow |\psi_i\rangle = |\psi\rangle$.

Geometría

ρ_1 y ρ_2 matrices densidad, $\lambda \in [0, 1] \Rightarrow \rho \equiv \lambda\rho_1 + (1 - \lambda)\rho_2$ matriz densidad.



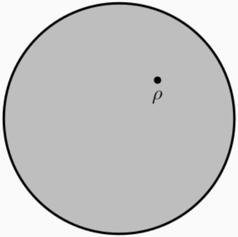
$\Rightarrow$ el conjunto de matrices densidad es convexo.



ρ puro $\Leftrightarrow$ no admite descomposición no trivial.

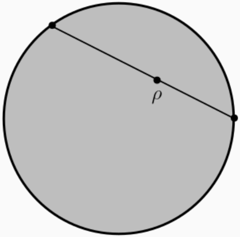
Esfera de Bloch

Si $\dim \mathcal{H} = 2$, el conjunto de todas las matrices densidad es una bola de radio 1 en $\mathbb{R}^3$, llamada la **esfera de Bloch**. Los estados puros son los que están sobre la superficie.



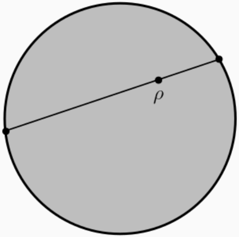
Esfera de Bloch

Si $\dim \mathcal{H} = 2$, el conjunto de todas las matrices densidad es una bola de radio 1 en $\mathbb{R}^3$, llamada la **esfera de Bloch**. Los estados puros son los que están sobre la superficie.



Esfera de Bloch

Si $\dim \mathcal{H} = 2$, el conjunto de todas las matrices densidad es una bola de radio 1 en $\mathbb{R}^3$, llamada la **esfera de Bloch**. Los estados puros son los que están sobre la superficie.



Entropía de von Neumann

Pureza

Pureza de un estado ρ:

$$\operatorname{Tr}\rho^2 = \sum_i \lambda_i^2 \leq 1$$

Cuantifica el grado de mezcla de ρ: la igualdad sólo se da si ρ es puro.

Entropía de von Neumann

Entropía de von Neumann de un estado ρ:

$$S(\rho) \equiv -\operatorname{Tr}(\rho \log \rho) = -\sum_i \lambda_i \log \lambda_i$$

(es la entropía de Shannon de los autovalores de ρ).

Cuantifica el grado de mezcla de ρ: $S(\rho)$ mínima si ρ puro, máxima si todos los autovalores son iguales.

Von Neumann vs Shannon

$S(\rho)$ es la mínima entropía de Shannon de entre todos los ensambles asociados a ρ.

Ejemplo: ensamble formado por los estados

$$|\psi_1\rangle = |+\rangle \qquad |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$$

con $p_1 = p_2 = 1/2$.

Entropía de Shannon: $S(p) = \log 2$

Autovalores de ρ: $\lambda_{\pm} = (1 \pm 1/\sqrt{2})/2$. No son iguales $\Rightarrow S(\rho) < S(p)$.

Entropía e información

Compresión clásica. Una fuente emite caracteres independientes con distribución de probabilidad p ($p(x)$ es la probabilidad del caracter x).

$$\text{Mensaje} = x_1 x_2 \ldots x_n$$

Shannon 1948: cuando $n \to \infty$, el número mínimo de bits por caracter para codificar el mensaje es $S(p)$.

Entropía e información

Compresión cuántica. Una fuente emite estados cuánticos independientes al azar, de acuerdo con una matriz densidad ρ.

$$\text{Mensaje} = |\psi_1\rangle|\psi_2\rangle \dots |\psi_n\rangle$$

Schumacher 1995: cuando $n \to \infty$, el número mínimo de qubits por caracter para codificar el mensaje es $S(\rho)$.

Entrelazamiento

Producto tensorial

El **producto tensorial** de dos Hilberts $\mathcal{H}_A$ y $\mathcal{H}_B$ es un Hilbert $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ junto con un mapa bilineal

$$\begin{aligned} \otimes : \mathcal{H}_A \times \mathcal{H}_B &\to \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \\ (|\psi\rangle, |\phi\rangle) &\mapsto |\psi\rangle \otimes |\phi\rangle \equiv |\psi\rangle|\phi\rangle \equiv |\psi\,\phi\rangle \end{aligned}$$

con las siguientes propiedades:

- $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ está generado por los vectores de la forma $|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle$
- $\langle \psi_1\,\phi_1 | \psi_2\,\phi_2 \rangle = \langle \psi_1|\psi_2\rangle\langle\phi_1|\phi_2\rangle$

Consecuencia: si $\{|i\rangle\}$ y $\{|\alpha\rangle\}$ son bases ortonormales de $\mathcal{H}_A$ y $\mathcal{H}_B$, entonces $\{|i\,\alpha\rangle\}$ es base ortonormal de $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$.

Producto tensorial

Ejemplo:

- $\mathcal{H}_A = \mathcal{H}_B = \mathbb{C}^2$
- $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ espacio de matrices complejas 2×2 con el producto interno $\langle M, N \rangle = \mathrm{Tr}(M^\dagger N)$
- $v \otimes w = \begin{pmatrix} v_1 w_1 & v_1 w_2 \\ v_2 w_1 & v_2 w_2 \end{pmatrix}$

Producto tensorial de operadores. Si O y P son operadores sobre $\mathcal{H}_A$ y $\mathcal{H}_B$ respectivamente, $O \otimes P$ es el operador sobre $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ definido por

$$(O \otimes P)(|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle) = (O|\psi\rangle) \otimes (P|\phi\rangle)$$

y extendido al resto de $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ por linealidad.

Entrelazamiento

Consideremos dos sistemas cuánticos A y B. Si $\mathcal{H}_A$ y $\mathcal{H}_B$ son los Hilberts respectivos, entonces el Hilbert del sistema global AB es $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$.

Un estado $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ es **separable** si existen $|\psi_A\rangle \in \mathcal{H}_A$ y $|\psi_B\rangle \in \mathcal{H}_B$ tales que

$$|\psi\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle.$$

Si $|\psi\rangle$ no es separable, entonces está **entrelazado**.

Entrelazamiento

Ejemplo: dos qubits.

- $|\psi\rangle = |++\rangle$ es separable.
- $|\psi\rangle = (|++\rangle + |--\rangle)/\sqrt{2}$ está entrelazado: si $|\psi\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$ entonces

$$\begin{aligned}\frac{1}{\sqrt{2}}(|++\rangle + |--\rangle) &= (\psi_{A+}|+\rangle + \psi_{A-}|-\rangle) \otimes (\psi_{B+}|+\rangle + \psi_{B-}|-\rangle) \\ &= \psi_{A+}\psi_{B+}|++\rangle + \psi_{A-}\psi_{B-}|--\rangle \\ &\quad + \psi_{A+}\psi_{B-}|+-\rangle + \psi_{A-}\psi_{B+}|-+\rangle\end{aligned}$$

$\Rightarrow \psi_{A+}\psi_{B-} = \psi_{A-}\psi_{B+} = 0 \Rightarrow$ Contradicción.

- $|\psi\rangle = (|++\rangle + |--\rangle + |+-\rangle + |-+\rangle)/2$?

Matriz densidad reducida

Sea ρ una matriz densidad para el sistema AB. **Matriz densidad reducida** a A: operador ρ_A sobre $\mathcal{H}_A$ definido por

$$\langle i|\rho_A|j\rangle = \sum_\alpha \langle i\,\alpha|\rho|j\,\alpha\rangle.$$

Se dice que ρ_A es la **traza parcial** de ρ sobre B, y se escribe $\rho_A = \mathrm{Tr}_B\,\rho$.

Matriz densidad reducida

Para cualquier observable O_A sobre $\mathcal{H}_A$ tenemos

$$\begin{aligned}
\langle O_A \otimes \mathbb{1}_B \rangle &= \mathrm{Tr}(\rho O_A \otimes \mathbb{1}_B) = \sum_{i,\alpha} \langle i\,\alpha | \rho O_A \otimes \mathbb{1}_B | i\,\alpha \rangle \\
&= \sum_{i,\alpha,j,\beta} \langle i\,\alpha | \rho | j\,\beta \rangle \langle j\,\beta | O_A \otimes \mathbb{1}_B | i\,\alpha \rangle \\
&= \sum_{i,\alpha,j,\beta} \langle i\,\alpha | \rho | j\,\beta \rangle \langle j | O_A | i \rangle \delta_{\alpha\beta} = \sum_{i,\alpha,j} \langle i\,\alpha | \rho | j\,\alpha \rangle \langle j | O_A | i \rangle \\
&= \sum_{i,j} \langle i | \rho_A | j \rangle \langle j | O_A | i \rangle = \sum_i \langle i | \rho_A O_A | i \rangle = \mathrm{Tr}(\rho_A O_A)
\end{aligned}$$

$\Rightarrow$ ρ_A **describe el estado del sistema** A.

Entrelazamiento vs mezcla

Supongamos estado global puro, $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$. Entonces, $|\psi\rangle$ **separable** $\Leftrightarrow$ ρ_A **puro**.

- $|\psi\rangle = |\psi_A\,\psi_B\rangle \Rightarrow \rho = |\psi_A\,\psi_B\rangle\langle\psi_A\,\psi_B|$

$$\Rightarrow \rho_A = \langle\psi_B|\psi_A\,\psi_B\rangle\langle\psi_A\,\psi_B|\psi_B\rangle = |\psi_A\rangle\langle\psi_A| \quad \text{puro}$$

- ρ_A puro $\Rightarrow$ Si $\{|i\rangle\}$ es una base propia de ρ_A, entonces sólo uno de sus elementos, digamos $|1\rangle$, tiene autovalor no nulo. Escribiendo $|\psi\rangle = \sum_{i,\alpha} \psi_{i\alpha}|i\,\alpha\rangle$, para $i \neq 1$ tenemos

$$0 = \langle i|\rho_A|i\rangle = \sum_\alpha \langle i\alpha|\psi\rangle\langle\psi|i\alpha\rangle = \sum_{\alpha,k,\beta,l,\gamma} \psi_{k\beta}\psi^*_{l\gamma}\langle i\alpha|k\beta\rangle\langle l\gamma|i\alpha\rangle$$
$$= \sum_\alpha |\psi_{i\alpha}|^2$$

$\Rightarrow \psi_{i\alpha} = 0 \Rightarrow |\psi\rangle = \sum_\alpha \psi_{1\alpha}|1\,\alpha\rangle = |1\rangle \otimes \sum_\alpha \psi_{1\alpha}|\alpha\rangle$ separable.

Entrelazamiento vs mezcla

En otras palabras, $|\psi\rangle$ **está entrelazado** $\Leftrightarrow$ ρ_A **es mixto**.

Este fenómeno no tiene análogo clásico: conocemos el estado del sistema (estado global puro) pero no el de sus partes (estado reducido mixto).

Por eso, **el entrelazamiento es un fenómeno intrínsecamente cuántico**.

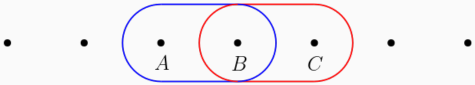
Entropía de entrelazamiento

$S(\rho_A)$ cuantifica el grado de mezcla de ρ_A, es decir, el grado de entrelazamiento de $|\psi\rangle$.

Por eso, a $S(\rho_A)$ se la conoce como la **entropía de entrelazamiento** de A en el estado global $|\psi\rangle$.

Propiedades

- Si el estado global es puro, $S(\rho_A) = S(\rho_B)$ ($\leftarrow$ descomposición de Schmidt)
- **Subaditividad:** $S(\rho_{AB}) \leq S(\rho_A) + S(\rho_B)$ ($\leftarrow$ positividad de la entropía relativa)
- **Subaditividad fuerte:** $S(\rho_{ABC}) + S(\rho_B) \leq S(\rho_{AB}) + S(\rho_{BC})$ (difícil)



Referencias

- Libro de John Preskill sobre computación cuántica (capítulos 2 y 10). Un clásico, y es de acceso libre.

  http://theory.caltech.edu/~preskill/ph229/

- Un paper donde se cuenta por qué la entropía de von Neumann minimiza la de Shannon:

  https://arxiv.org/pdf/quant-ph/9909020.pdf

- La clase de hoy de David Blanco en Teórica 2, sobre teleportación cuántica:

  https://youtu.be/TY2odT9oHDE