G0-PMatrizdensidad

Muriel Bonetto

March 2025

1. **Pureza.** Sea ρ la matriz densidad que representa el estado de un sistema cuántico. Se llama *pureza* del estado ρ a la cantidad $\operatorname{tr}(\rho^2)$.

   a) Mostrar que $\frac{1}{D} \leq \operatorname{tr}(\rho^2) \leq 1$, 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, $\operatorname{tr}(\rho^2) = 1$. Muestre que vale también la vuelta, es decir que si la pureza es máxima, $\operatorname{tr}(\rho^2) = 1$, entonces necesariamente ρ es un estado puro.

   c) Mostrar que para un estado mixto, $\operatorname{tr}(\rho^2) < 1$.

   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, $\operatorname{tr}(\rho^2) = 1/D$.

a) Primero veamos que la pureza es siempre menor o igual que 1. Para eso recordemos que siempre hay una base en la que la matriz densidad es diagonal, por ser hermítica. Por lo que $\rho = \sum_i^D p_i \left|i\right\rangle\!\left\langle i\right|$. Además, $\operatorname{tr}(\rho) = \sum_i^D p_i = 1$ y $\operatorname{tr}(\rho^2) = \sum_i^D p_i^2 = 1$. Entonces podemos hacer

$$1^2 = \left(\sum_i^D p_i\right)^2 = \left(\sum_i^D p_i\right)\left(\sum_j^D p_j\right) = \sum_i^D p_i^2 + \underbrace{\sum_{i\neq j}^D p_i p_j}_{\geq 0}, \tag{1}$$

porque $p_i \geq 0$. Por lo tanto, necesariamente $\operatorname{tr}(\rho^2) \leq 1$.

Ahora, para ver que el mínimo de la pureza es $1/D$, escribamos $p_i = \langle p\rangle + \Delta_i$ con $\langle p\rangle = 1/D \sum_i^D p_i = 1/D$ y $\sum_i^D \Delta_i = 0$. Pueden verificar esto último usando que la traza tiene que ser igual a 1. Escribiendo la traza de ρ^2 tenemos que

$$\begin{aligned}
&\sum_i^D p_i^2 = \sum_i^D (\langle p\rangle + \Delta_i)^2 = \sum_i^D \left(\langle p\rangle^2 + 2\Delta_i\langle p\rangle + \Delta_i^2\right)\\
&\sum_i^D \langle p\rangle^2 = \sum_i^D \frac{1}{D^2} = \frac{1}{D}\\
&\sum_i^D \Delta_i^2 \geq 0\\
&\sum_i^D 2\langle p\rangle\Delta_i = 0.
\end{aligned} \tag{2}$$

por lo que, como mínimo, $\operatorname{tr}(\rho^2) = 1/D$, cuando $\sum_i^D \Delta_i^2 = 0$.

b) Si un estado es puro, entonces $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$, por lo que es directo ver que $\rho^2 = |\psi\rangle\langle\psi|$. Para ver que si la pureza es 1 entonces el estado es necesariamente puro, podemos usar la demostración del inciso a). De la ecuación (1) vemos que la pureza es 1 cuando $\sum_{i\neq j} p_i p_j = 0$. Como la traza de ρ tiene que ser 1, la condición se cumple cuando $p_i = 0$ para todo i salvo uno. Por lo que la forma de ρ cuando la pureza es 1 tiene que ser $\rho = |i\rangle\langle i|$.

c) Para este inciso pueden hacer un argumento similar al inciso b), pero en el que p_i es distinto de cero para por lo menos dos valores de i.

d) De la ecuación (2) vemos que la igualdad se cumple cuando $\sum_i \Delta_i^2 = 0$ por lo que $\Delta_i = 0$ para todo i y $p_i = \langle p\rangle = 1/D$.

2. **Bola de Bloch.** Considere un sistema de *spin* 1/2.

   a) Muestre que la matriz densidad se puede siempre escribir en la forma
   $$\rho = \frac{1}{2}\left(\mathbb{I} + \mathbf{P}\cdot\sigma\right),$$
   donde $\mathbb{I}$ es el operador identidad, y $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^3$. (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 $A = a_0\mathbb{I} + \mathbf{a}\cdot\sigma$, con $a_0 \in \mathbb{R}$, $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^3$).

   b) Calcule la pureza de ρ y encuentre cómo se relaciona con $\mathbf{P}$. En particular, ¿qué satisface $\mathbf{P}$ 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 $\langle\sigma\rangle$. ¿Cuál es la interpretación física de $\mathbf{P}$?

   d) Suponga que se sabe que se tiene un ensamble de *spin* 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) Este les queda a ustedes!

b) Calculemos la pureza de ρ

$$\begin{aligned}\rho^2 &= \frac{1}{4}\left(\mathbb{I} + \mathbf{P}\cdot\sigma\right)^2 = \frac{1}{4}\left(\mathbb{I} + 2\mathbf{P}\cdot\sigma + (\mathbf{P}\cdot\sigma)^2\right)\\ (\mathbf{P}\cdot\sigma)^2 &= \sum_i P_i\sigma_i \sum_j P_j\sigma_j = \sum_{ij} P_i P_j \sigma_i\sigma_j = \sum_i P_i^2\sigma_i^2 + \sum_{i\neq j} P_i P_j \sigma_i\sigma_j\end{aligned} \tag{3}$$

Ahora recordemos que $\sigma_i^2 = \mathbb{I}$ y $\sigma_i\sigma_j = i\epsilon_{ijk}\sigma_k$. Además, $\epsilon_{ijk} = -\epsilon_{jik}$, por lo que $\sum_{i\neq j} P_i P_j \sigma_i\sigma_j = 0$. ρ^2 es entonces

$$\rho^2 = \frac{1}{4}\left(\mathbb{I} + 2\mathbf{P}\cdot\sigma + \mathbb{I}|\mathbf{P}|^2\right) = \frac{1}{2}\left(\mathbb{I} + \mathbf{P}\cdot\sigma\right), \tag{4}$$

y su traza

$$\mathrm{tr}\left(\rho^2\right) = \frac{1}{2}\left(1 + |\mathbf{P}|^2\right). \tag{5}$$

Si el modulo de $\mathbf{P}$ es 1, entonces la pureza es máxima. Recordemos que en la esfera de Bloch, los estados que escribíamos como $|\psi\rangle$, es decir los puros, los ubicabamos en superficie de una esfera de radio 1. El vector $\mathbf{P}$ nos dice dónde en la esfera de Bloch ubicamos a nuestro estado. Si $\mathbf{P}$ tiene módulo menor a 1, entonces la representación en la esfera ya no está sobre la superficie si no en el interior. El caso límite es $|\mathbf{P}| = 0$, en el cuál $\mathrm{tr}\left(\rho^2\right) = 1/2 = 1/D$, el estado máximamente mixto de un sistema de dimensión $D = 2$.

c) El valor medio del vector de matrices de Pauli podemos calcularlo como

$$\begin{aligned}\langle\sigma\rangle &= \mathrm{tr}\left(\rho\sigma\right) = \mathrm{tr}\left(\frac{1}{2}\left(\mathbb{I} + \mathbf{P}\cdot\sigma\right)\sigma\right).\\ \langle\sigma\rangle &= \frac{1}{2}\,\mathrm{tr}\left(\sigma + \sum_{i,j} P_i\sigma_i\sigma_j\right) = \frac{1}{2}\,\mathrm{tr}\left(\sigma + \sum_i P_i\sigma_i^2 + \sum_{i\neq j} P_i\sigma_i\sigma_j\right).\end{aligned} \tag{6}$$

Repitiendo las cuentas en del inciso b), y dado que $\mathrm{tr}(\sigma_j) = 0$, nos queda que

$$\langle\sigma\rangle = \mathbf{P}, \tag{7}$$

por lo que $\langle\mathbf{S}\rangle = \frac{\hbar}{2}\langle\sigma\rangle = \frac{\hbar}{2}\mathbf{P}$. Es por esto que a $\mathbf{P}$ se lo suele llamar vector de polarización.

d) Este también les queda a ustedes! Cualquier cosa pueden consultar!.