

Matriz densidad y evolución temporal

Para poder describir un sistema cuántico, la construcción de un álgebra que defina los observables y un funcional, llamado estado, que lleve estos observables a un valor esperado o valor de expectación de las mediciones es fundamental. Usualmente este cálculo del valor de expectación se lleva a cabo mediante la definición de un espacio de Hilbert y el producto interno entre los vectores de este espacio. Sin embargo, una manera más útil para situaciones donde se tienen mezclas es mediante el uso de la llamada matriz densidad, la cual revisaremos a continuación. La principal ventaja de usar esta representación es que, al ser la matriz densidad un objeto matricial, no existe la ambigüedad de fase que aparece cuando representamos los estados mediante vectores de un espacio de Hilbert como se hace habitualmente en mecánica cuántica. Allí, dos vectores que difieren sólo por una fase global representan el mismo estado físico, mientras que la matriz densidad es única. Para una justificación formal matemática de la existencia y construcción de la matriz densidad, junto con su conexión con la definición de estado, ver apéndice A.

1 Matriz densidad

Definimos un operador ρ llamado matriz densidad, con las siguientes características:

1. Es autoadjunto $\rho = \rho^\dagger$
2. Es positivo $\rho \geq 0$
3. Es normalizado $\text{Tr}(\rho) = 1$

A partir de él podemos definir el valor de expectación de un operador A mediante

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A) \quad (1)$$

Este estado simplemente toma la traza del producto de la matriz densidad con un operador A , que será un observable del sistema, y entrega un número, que corresponderá al valor esperado de la medida de dicho observable.

Como mencionamos antes, esta representación permite describir tanto estados puros como estados mixtos. Diremos que:

- Un estado puro se caracterizará por $\rho^2 = \rho$. Esto significa que el sistema estará en una situación definida, de forma que la matriz densidad es un proyector. Debido a la propiedad de normalización se tendrá que $\text{Tr}(\rho^2) = 1$.

Otra forma de describir un estado puro es mediante el hecho de que éstos no pueden escribirse como combinaciones convexas de dos estados. Para ver que es así, supongamos que un estado puro ρ se puede escribir como combinación convexa de dos estados ρ_1 y ρ_2 :

$$\rho = \lambda \rho_1 + (1 - \lambda) \rho_2 \quad (2)$$

y ahora tomamos el cuadrado y la traza:

$$\text{Tr}(\rho^2) = \lambda \text{Tr}(\rho_1 \rho) + (1 - \lambda) \text{Tr}(\rho_2 \rho) \quad (3)$$

Como ρ es un estado puro:

$$1 = \lambda(\text{Tr}(\rho_1 \rho) - \text{Tr}(\rho_2 \rho)) + \text{Tr}(\rho_2 \rho) \quad (4)$$

Para que el lado derecho sea igual a uno para un λ arbitrario, entonces $\text{Tr}(\rho_1 \rho) = \text{Tr}(\rho_2 \rho) = 1$. Para que eso sea cierto entonces sólo puede ser que $\rho_1 = \rho_2 = \rho$, con lo cual, hemos llegado a que no se puede escribir como (1).

- Un estado mixto corresponde a una combinación probabilística de diferentes posibilidades, para la cual se tendrá que $\rho^2 \neq \rho$ y $\text{Tr}(\rho^2) < 1$.

Esta forma de representar los estados es especialmente útil porque permite calcular valores esperados y probabilidades de manera consistente, y facilita la descripción de sistemas donde intervienen mezclas estadísticas o decoherencia, escenarios en los cuales la representación mediante un único vector sería insuficiente.

2 Operador unitario de evolución temporal

Consideremos ahora que el estado puede variar a lo largo del tiempo. Para describir esta evolución, necesitamos introducir el concepto de tiempo desde una perspectiva no relativista. En este enfoque, el tiempo no es una propiedad intrínseca del sistema, sino un parámetro externo que etiqueta la evolución. Por tanto, el tiempo no se tratará como un observable del sistema, sino como una variable que nos permite seguir cómo cambian los estados. Luego, el tiempo, que denotaremos t es un parámetro continuo que permite etiquetar el estado en dicho tiempo.

Tomemos entonces la matriz densidad en un instante inicial $t = t_0$. Ésta se describe por $\rho(t_0)$. En un tiempo t posterior el estado estará definido por $\rho(t)$. Dado que la nueva matriz densidad $\rho(t)$ es también un estado, debe satisfacer las mismas propiedades de ser estado y a la vez las mismas propiedades de matriz densidad. Para ello, representaremos la evolución utilizando un operador $U(t, t_0)$ que lleve el estado del tiempo t_0 al estado del tiempo t . Para garantizar la linealidad y las propiedades de estado, postularemos la siguiente transformación que lleve de $\rho(t_0)$ a $\rho(t)$:

$$\rho(t) = U(t, t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t, t_0) \quad (5)$$

donde $U(t, t_0)$ es una transformación unitaria:

$$U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0) = \mathbb{I} \quad (6)$$

y denotamos por $U^\dagger(t, t_0)$ la traspuesta conjugada de $U(t, t_0)$.

Notemos que satisface ser autoadjunto:

$$\rho^\dagger(t) = (U(t, t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t, t_0))^\dagger = U(t, t_0)\rho^\dagger(t_0)U^\dagger(t, t_0) = U(t, t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t, t_0) = \rho(t) \quad (7)$$

donde usamos la propiedad de ser autoadjunto de $\rho(t_0)$.

Es también normalizado, pues:

$$\text{Tr}(\rho(t)) = \text{Tr}(U(t, t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t, t_0)) = \text{Tr}(\rho(t_0)U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0)) = \text{Tr}(\rho(t_0)) = 1 \quad (8)$$

donde hemos usado la propiedad de ciclicidad de la traza.

Y al mismo tiempo se puede ver la positividad a través del polinomio característico de $\rho(t)$:

$$\det(\lambda\mathbb{I} - \rho(t)) = \det(\lambda\mathbb{I} - U(t, t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t, t_0)) = \det(U(t, t_0)(\lambda\mathbb{I} - \rho(t_0))U^\dagger(t, t_0))$$

donde hemos usado la ecuación (6). Luego, usando las propiedades del determinante y el que el determinante de una matriz unitaria es uno, se obtiene que

$$\det(\lambda\mathbb{I} - \rho(t)) = \det(\lambda\mathbb{I} - \rho(t_0)) \quad (9)$$

Eso indica que tanto $\rho(t)$ como $\rho(t_0)$ tienen el mismo espectro. Como $\rho(t_0)$ es positivo, sus autovalores son mayores o iguales a cero, por lo tanto los autovalores de $\rho(t)$ también.

De este modo, la evolución del estado mediante (5) cumple los requerimientos para que $\rho(t)$ sea un estado evolucionado en el tiempo.

Ahora, queremos que exista evolución a lo largo de todo el tiempo, de forma que no exista un tiempo en que no pueda existir evolución. Entonces, asumiremos que la dependencia temporal es continua, de modo que para cada t_1 y t_2 existe un operador $U(t_2, t_1)$. Esto es necesario para tener una evolución continua en el tiempo.

Notemos también que si tomo la evolución de $\rho(t_0)$ a un estado posterior en un tiempo t_1 y luego, a otro estado en un tiempo t_2 , debe ser igual a que si tomamos directamente la evolución de $\rho(t_0)$ a $\rho(t_2)$. Esto se condensa en:

$$U(t_2, t_1)U(t_1, t_0) = U(t_2, t_0) \quad (10)$$

Esto nos dice implícitamente que el producto de dos operadores $U(t_2, t_1)$ es también un operador de evolución temporal. A la vez, debido a esto, es fácil ver que si evolucionamos el estado a otro en un tiempo t_1 , y luego a otro en un tiempo t_2 y luego a uno en t_3 puedo realizar asociativamente esta evolución:

$$(U(t_3, t_2)U(t_2, t_1))U(t_1, t_0) = U(t_3, t_2)(U(t_2, t_1)U(t_1, t_0)) \quad (11)$$

Por otro lado, este operador unitario $U(t_2, t_1)$ es tal que

$$U(t, t) = \mathbb{I} \quad (12)$$

pues debe cumplirse que $\rho(t_0) = U(t_0, t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t_0, t_0)$.

También, si evolucionamos el estado con $U(t_2, t_1)$, es razonable pensar que si nos devolvemos $U(t_1, t_2)$ debemos obtener el mismo estado con el que partimos. Así:

$$U(t_1, t_2)U(t_2, t_1) = \mathbb{I} \quad (13)$$

Debido a la unitariedad de $U(t_2, t_1)$ entonces eso significa que:

$$U(t_2, t_1) = U^\dagger(t_1, t_2) \quad (14)$$

Todas estas propiedades definen que el conjunto de $U(t_2, t_1)$ posee una estructura de grupo. Al mismo tiempo, queremos que la evolución sea suave, por lo que supondremos también que $U(t_2, t_1)$ es diferenciable.

Tomemos $U(t + \varepsilon, t)$. Podemos expandir en Taylor este operador:

$$\begin{aligned} U(t + \varepsilon, t) &= U(t, t) + \varepsilon \frac{\partial U(t', t)}{\partial t'} \Big|_{t'=t} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\ U(t + \varepsilon, t) &= \mathbb{I} + \varepsilon \frac{\partial U(t', t)}{\partial t'} \Big|_{t'=t} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \end{aligned} \quad (15)$$

Al tomar el conjugado de esta expansión y realizar el producto con la ecuación (15) tendremos que:

$$U^\dagger(t + \varepsilon, t)U(t + \varepsilon, t) = \mathbb{I} + \varepsilon \left(\frac{\partial U^\dagger(t', t)}{\partial t'} \Big|_{t'=t} + \frac{\partial U(t', t)}{\partial t'} \Big|_{t'=t} \right) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad (16)$$

pero debido a la unitariedad, se tendrá que:

$$\frac{\partial U^\dagger(t', t)}{\partial t'} \Big|_{t'=t} = - \frac{\partial U(t', t)}{\partial t'} \Big|_{t'=t} \quad (17)$$

Esto dice que $\frac{\partial U(t', t)}{\partial t'}|_{t'=t}$ es anti-autoadjunto. Por lo que podemos escribirlo como:

$$\frac{\partial U(t', t)}{\partial t'}|_{t'=t} = -\frac{i}{\hbar} H(t) \quad (18)$$

con $H(t)$ autoadjunto ($H(t) = H^\dagger(t)$). Este operador por definición será el Hamiltoniano del sistema, el cual puede ser tiempo dependiente. Además, $\hbar$ corresponde a la constante de Planck, que introducimos para mantener las dimensiones correctas de la ecuación, puesto que U debe ser adimensional para que en la ecuación (5) las unidades de la matriz densidad en t_0 y en t sean las mismas. Dado que el Hamiltoniano tiene unidades de energía, y la derivada de U es respecto a un tiempo, entonces por consistencia introducimos $\hbar$,

Ahora, tomemos $U(t + \varepsilon, t_0)$:

$$U(t + \varepsilon, t_0) = U(t + \varepsilon, t)U(t, t_0) = \left(\mathbb{I} + \varepsilon \frac{\partial U(t', t)}{\partial t'}|_{t'=t} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \right) U(t, t_0)$$

Arreglamos de forma que queda:

$$\frac{U(t + \varepsilon, t_0) - U(t, t_0)}{\varepsilon} = \frac{\partial U(t', t)}{\partial t'}|_{t'=t} U(t, t_0) + U(t, t_0) \cdot \mathcal{O}(\varepsilon) \quad (19)$$

Luego, tomamos el límite de $\varepsilon \rightarrow 0$. Al lado izquierdo tendremos la derivada respecto a t :

$$\frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} = \frac{\partial U(t', t)}{\partial t'}|_{t'=t} U(t, t_0) \quad (20)$$

Usando la ecuación (18):

$$\frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} H(t) U(t, t_0) \quad (21)$$

Para resolver esta ecuación, integramos respecto a t , entre t_0 y t :

$$U(t, t_0) - U(t_0, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_n H(t_n) U(t_n, t_0)$$

donde hemos colocado el subíndice n en el índice mudo t_n dado que repetiremos esto varias veces. Es importante notar que t_n es un tiempo tal que $t_0 \leq t_n \leq t$. Considerando que $U(t_0, t_0) = \mathbb{I}$:

$$U(t, t_0) = \mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_n H(t_n) U(t_n, t_0) \quad (22)$$

Introduzcamos en sí misma la ecuación (22):

$$U(t, t_0) = \mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_n H(t_n) \left(\mathbb{I} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1} H(t_{n-1}) U(t_{n-1}, t_0) \right) \quad (23)$$

Aquí vemos que $t_0 \leq t_{n-1} \leq t_n$. Ahora, repitiendo continuamente el proceso de insertar vemos que como en cada inserción ese tiempo será menor que el anterior, llegaremos a un último donde será igual a t_0 . De esta forma tendremos:

$$U(t, t_0) = \mathbb{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_n \int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^{t_2} dt_1 H(t_n) H(t_{n-1}) \dots H(t_2) H(t_1) \quad (24)$$

Es importante ver que los operadores $H(t)$ están en orden de tiempo decreciente de izquierda a derecha. Además como es un operador en distintos tiempos no conmutan necesariamente entre ellos, por tanto se quedarán en la posición en que están y no los arreglaremos.

Cambiaremos los límites de integración usando el siguiente truco. Para entender consideremos sólo 2 operadores $H(t)$. Consideremos la integral sobre el cuadrado definido por $(t_0, t) \times (t_0, t)$:

$$\int_{t_0}^t dt_2 \int_{t_0}^t dt_1 \mathcal{T}(H(t_2)H(t_1))$$

donde el operador $\mathcal{T}$ representa ordenamiento temporal. Esto indica que ordena los factores por tiempo decreciente de izquierda a derecha. Si $t_2 \geq t_1$ entonces $\mathcal{T}(H(t_2)H(t_1)) = H(t_2)H(t_1)$, mientras que si $t_1 \geq t_2$ se tiene que $\mathcal{T}(H(t_2)H(t_1)) = H(t_1)H(t_2)$, o resumiendo ambos a la vez:

$$\mathcal{T}(H(t_2)H(t_1)) = \theta(t_2 - t_1)H(t_2)H(t_1) + \theta(t_1 - t_2)H(t_1)H(t_2)$$

donde $\theta(t_2 - t_1)$ es la función Theta de Heaviside.

El cuadrado define dos regiones triangulares, una donde $t_2 \geq t_1$ y la otra donde $t_1 \geq t_2$. Esto significa que:

$$\int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 \mathcal{T}(H(t_2)H(t_1)) = \int_{t_0}^t dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 H(t_2)H(t_1) + \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H(t_1)H(t_2) \quad (25)$$

realizando un cambio de variable $t_1 \leftrightarrow t_2$ en la última integral y arreglando tendremos que:

$$\int_{t_0}^t dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 H(t_2)H(t_1) = \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_2 \int_{t_0}^t dt_1 \mathcal{T}(H(t_2)H(t_1)) \quad (26)$$

Al realizar lo mismo para n , aparecerá un factor $1/n!$ debido a las combinaciones de ordenamientos. Así reescribimos la ecuación (24):

$$U(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_n \int_{t_0}^t dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^t dt_1 \mathcal{T}(H(t_n)H(t_{n-1}) \dots H(t_1)) \quad (27)$$

Esta serie es llamada serie de Dyson, y podemos ver que podemos escribirla como una exponencial de la forma:

$$U(t, t_0) = \mathcal{T} \left(\exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') \right] \right) \quad (28)$$

3 Ecuación de evolución de la matriz densidad

Con los resultados anteriores, podemos encontrar una expresión para la evolución de la matriz densidad. Tomamos la ecuación (5) y la derivamos respecto al tiempo:

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} \rho(t_0) U^\dagger(t, t_0) + U(t, t_0) \rho(t_0) \frac{\partial U^\dagger(t, t_0)}{\partial t} \quad (29)$$

Usando la ecuación (21) y su conjugada:

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} H(t) U(t, t_0) \rho(t_0) U^\dagger(t, t_0) + U(t, t_0) \rho(t_0) \frac{i}{\hbar} U^\dagger(t, t_0) H(t) \quad (30)$$

Ahora usamos (5), y usando el conmutador tendremos que:

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[H(t), \rho(t)] \quad (31)$$

que corresponde a la llamada ecuación de von Neumann, la cual determina la evolución de la matriz densidad. Así, como postulado importante, diremos que el operador Hamiltoniano es aquel que generará la evolución temporal de los estados.