Tiheysmatriisi (density matrix/density operator)

Tilavektoria $|\Psi\rangle$ vastaa tiheysoperaattori/tiheysmatriisi

$$\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$$

Kun $|\Psi\rangle = \sum_n a_n |\phi_n\rangle$, $\hat{\rho} = \sum_m \sum_n a_m^* a_n |\phi_n\rangle\langle\phi_m|$

Jos tulkitsemme indeksin m rivinä ja n sarakkeena kertoimet voi esittää matriisina

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \cdots \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \\ \vdots & & \ddots \end{pmatrix} \quad \rho_{mn} = a_m^* a_n$$

Diagonaalilla on $|a_n|^2$ ja normituksen perusteella $\sum_n |a_n|^2 = 1$

$\Rightarrow \mathrm{Tr}\,\hat{\rho} = 1$, $\hat{\rho}$ on myös hermiittinen, ρ:n ominaisarvot ≥ 0

Vähän yleisemmin: systeemi tilassa $|\Psi_i\rangle$ todennäköisyydellä w_i $(\sum w_i = 1)$

$\Rightarrow$ keskiarvo tiheysmatriiseista antaa "sekatilan" tiheysmatriisin

$$\rho = \sum_i w_i |\Psi_i\rangle\langle\Psi_i| \quad \text{(statistinen joukko kvanttitiloja)}$$

Operaattorin $\hat{A}$ odotusarvo $\langle\hat{A}\rangle = \langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle = \sum_n \sum_m \underbrace{a_m^* a_n}_{\rho_{mn}} A_{nm}$ $\rightarrow$ A:n esitys matriisina $A_{mn} = \langle\phi_m|A|\phi_n\rangle$, A = hermiittinen (oletus)

$$\langle\hat{A}\rangle = \sum_m \sum_n \rho_{mn} A_{nm} = \sum_n [\rho \cdot A]_{nn}$$

$$= \mathrm{Tr}[\rho A]$$

Jos esim. $\hat{A} = \hat{H}$ ja $|\phi_n\rangle$ on $\hat{H}$:n ominaistila $\langle\hat{H}\rangle = \sum_n E_n |a_n|^2$

Toisaalta $\mathrm{Tr}[|\Psi\rangle\langle\Psi| H] = \mathrm{Tr}[\langle\Psi|H|\Psi\rangle]$ missä käytimme jäljen syklisyyttä

Ts. $\mathrm{Tr}[ABC] = \mathrm{Tr}[BCA]$

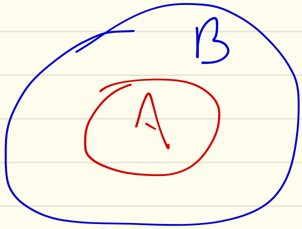
$\Rightarrow \mathrm{Tr}[\langle\Psi| \sum_n a_n E_n |\phi_n\rangle] = \mathrm{Tr}[\sum_n \sum_m a_n a_m^* E_n \underbrace{\langle\phi_m|\phi_n\rangle}_{\delta_{nm}}] = \sum_n |a_n|^2 E_n$ (sama tulos)

Tiheysmatriisin aikakehitys:

Jos $\hat{\rho} = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| \Rightarrow \dot{\hat{\rho}} = |\dot{\psi}\rangle\langle\psi| + |\psi\rangle\langle\dot{\psi}|$

toisaalta $|\dot{\psi}\rangle = \frac{1}{i\hbar}H|\psi\rangle$ ja $\langle\dot{\psi}| = -\frac{1}{i\hbar}(\langle\psi|H)$

$$\Rightarrow \dot{\hat{\rho}} = \frac{1}{i\hbar}H|\psi\rangle\langle\psi| - \frac{1}{i\hbar}|\psi\rangle(\langle\psi|H) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{H},\hat{\rho}]$$



Tämä siis seurasi Schrödingerin yhtälöstä.

Kun $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| \Rightarrow \hat{\rho}^2 = |\psi\rangle\underbrace{\langle\psi|\psi\rangle}_{1}\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = \hat{\rho}$ ja tilaa kutsutaan puhtaaksi.

Toisaalta. Entäpä jos meillä on systeemit A ja B ja observaabelimme $\hat{O}$ "elää" alisysteemissä A. Ts. sen mittaus ei muuta B:n tiloja.

Jos haluamme laskea odotusarvon $\langle\hat{O}\rangle$, voimmeko laskea jonkun A:ssa "elävän" objektin sen sijaan, että teemme töitä koko systeemin A+B tilavektorilla tai tiheysmatriisilla?

Koko systeemin virittää tensoritulo aliavaruuksien Hilbertin avaruuksista $H_A \otimes H_B$

Esim. jos A:ssa kanta $|\uparrow\rangle_A$ & $|\downarrow\rangle_A$ ja B:ssä $|\uparrow\rangle_B$ $|\downarrow\rangle_B$ koko systeemin kanta muodostuu neljästä vektorista

$|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle$ ja $|\downarrow\downarrow\rangle$ missä ensimmäinen viittaa (vaikka) A osaan.

$\langle\hat{O}\rangle = Tr[\hat{\rho}\hat{O}] = Tr[\rho_A\hat{O}]$ missä $\rho_A = Tr_B\,\rho$ on A:n redusoitu tiheysmatriisi,

joka muodostetaan ottamalla osittainen jälki B:n yli (partial trace over B)

Ylläoleva toimii kun $\hat{O}$ on sellainen, että se ei muuta tilaan operoidessa B osan kantavektoria Esim $\hat{O}|\uparrow\uparrow\rangle \to |\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle$ ok, mutta $\hat{O}|\uparrow\uparrow\rangle \to |\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle$ ei ole ok.

Jos i&j indeksoi A:n tiloja ja α,β B:n tiloja ρ:ssa elementit termeille

$|i\rangle\otimes|\alpha\rangle\langle j|\otimes\langle\beta|$, $\rho_{i\alpha,j\beta}$

$$\rho_{A\,ij} = \sum_{\alpha}\rho_{i\alpha,j\alpha}$$

Redusoitu tiheysmatriisi ei välttämättä ole puhdas vaikka koko systeemi sitä olisikin!

ts. yleisesti $\rho_A^2 \neq \rho_A$ ja tila on sekatila.

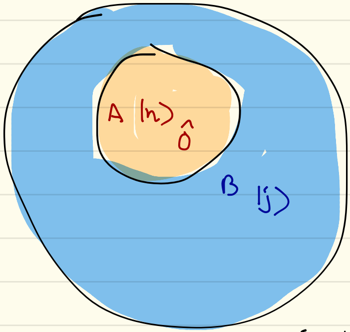
$\dot{\rho}_A = \frac{1}{i\hbar}[\hat{H}, \hat{\rho}_A]$ ei ehkä pidäkkään paikkaansa.

Koko systeemin aaltofunktion aikakehitys voi muuttaa alunperin alisysteemin puhtaan tilan sekatilaksi → dekoherenssi

Näin tapahtuu etenkin kun alisysteemi on kytketty ympäristöönsä. Ilman tätä kytkentää aikakehitys määräytyy alisysteemin aaltofunktiosta ja Hamiltonin operaattorista Schrödingerin yhtälön mukaan.

Dekoheressia kuvataan uudenlaisilla yhtälöillä (master equations)

Tiheysmatriisi ja redusoitu tiheysmatriisi:



Koko avaruuden kanta $|n\rangle \otimes |j\rangle$
operaattori $\hat{O}$ elää alisysteemissä A

$\Rightarrow \hat{O} \otimes \hat{I}_B$ ($\hat{O}$ "koskee" vain tiloihin $|n\rangle$)

Yleinen tila: $|\psi\rangle = \sum_{n,j} c_{n,j} |n\rangle \otimes |j\rangle$

(Erikoistapaus missä faktoroituu: $|\psi_0\rangle = \sum_n a_n |n\rangle \otimes \sum_j b_j |j\rangle$)

$$\langle \hat{O} \rangle = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \sum_{n'j'} \sum_{n,j} c_{n'j'}^* c_{nj} \langle n' | \hat{O} | n \rangle \underbrace{\langle j' | j \rangle}_{\delta_{j,j'}}$$

$$= \sum_{n,n'} \sum_j c_{n'j}^* c_{nj} \langle n' | \hat{O} | n \rangle = \mathrm{Tr}\, \hat{\rho}_A \hat{O}$$, jos määrittelemme

redusoidun tiheysmatriisin A:issa $\hat{\rho}_A = \sum_j c_{n'j}^* c_{nj} |n\rangle\langle n'|$

Tätä kutsutaan myös osittaiseksi jäljeksi B:n yli $\rho_A = \mathrm{Tr}_B \hat{\rho}$

$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$

Voit laskea, että jos tila on muotoa $|\psi_0\rangle$ niin ρ_A on puhdas ja sitä vastaa tila $|\psi\rangle_A = \sum_n a_n |n\rangle$. Yleisessä tapauksessa näin ei ole. Toisaalta tila tyypillisesti faktoroituu vain kun A & B eivät vuorovaikuta keskenään.

Spin-1/2 hiukkasen mittaukset.

$\hat{S} = \hbar/2\,(\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$, $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

Jos mittaamme spinin eri komponentteja, observaabelia vastaava operaattori on $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y$ tai $\hat{\sigma}_z$.

Yllä oleva on ylivoimaisesti tavallisin esitys. Eli $\hat{\sigma}_z$ = diagonaalinen spin ominaistilat ovat

$|\uparrow_z\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ (om.arvo $+1$) ja $|\downarrow_z\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ (om.arvo -1)

Sanotaan, että systeemi on tilassa $|\psi\rangle = \alpha|\uparrow_z\rangle + \beta|\downarrow_z\rangle$ ja mitataan $\hat{\sigma}_z$.

Tulos $+1$ todennäköisyydellä $|\alpha|^2$

-1 — " — $|\beta|^2$

Sanotaan, että saatiin $+1 \Rightarrow |\psi\rangle \Rightarrow |\uparrow_z\rangle$ mittauspostulaatin perusteella.

Mitataan sitten $\hat{\sigma}_x$. Tila pitää nyt esittää $\hat{\sigma}_x$:n ominaistilojen avulla!

Ratkaistaan ne $\hat{\sigma}_x \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$. ominaisarvot $\det\begin{pmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{pmatrix} = 0$

$\Rightarrow \lambda^2 - 1 = 0 \Rightarrow \lambda = \pm 1$ (samat kuin σ_z:lla)

$\lambda = +1 \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 1\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} y \\ x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \Rightarrow |\uparrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\uparrow_z\rangle + |\downarrow_z\rangle\right]$

$= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

$\lambda = -1 \Rightarrow |\downarrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\uparrow_z\rangle - |\downarrow_z\rangle\right]$

Tästä saadaan $|\uparrow_z\rangle = \left[|\uparrow_x\rangle + |\downarrow_x\rangle\right]/\sqrt{2}$

Millä todennäköisuydellä mittaamme σ_x:lle $+1$?

Vastaus: amplitudi $= \langle \uparrow_x | \psi \rangle$ ja koska nyt $|\psi\rangle = |\uparrow_z\rangle$

$$= \langle \uparrow_x | \tfrac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow_x\rangle + |\downarrow_x\rangle \right) \rangle = 1/\sqrt{2}$$ (ortonormaali kanta)

$\Rightarrow$ tod. näk $= |\text{amplitudi}|^2 = 1/2$!

Let us have 2 relevant states $|g\rangle$ and $|e\rangle$

The quantum state is then $|\psi\rangle = a|g\rangle + b|e\rangle$

Hamiltonian: $\hat{H} = E_g |g\rangle\langle g| + E_e |e\rangle\langle e| + \hbar\Omega\, |e\rangle\langle g| + \hbar\Omega^* \,|g\rangle\langle e|$

so if $|\psi\rangle = |g\rangle \Rightarrow \langle H\rangle = E_g$

$|\psi\rangle = |e\rangle \Rightarrow \langle H\rangle = E_e$

what do the $|e\rangle\langle g|$ etc. terms do?

$|\psi\rangle = |g\rangle \Rightarrow H|\psi\rangle = E_g|g\rangle + \hbar\Omega|e\rangle \Rightarrow \langle e|\hat{H}|g\rangle = \hbar\Omega$

So those are couplings between states.

$\bar{\Psi} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$, $\bar{\Psi}^+ = (a^* \;\; b^*) \Rightarrow \hat{H} = \begin{pmatrix} E_g & \hbar\Omega \\ \hbar\Omega^* & E_e \end{pmatrix}$, eigenstates from $\hat{H}\bar{\Psi} = E\bar{\Psi}$

so $(\hat{H} - \mathbb{1}E)\bar{\Psi} = 0$, where $\mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ is identity matrix

eigenvalues from $\det(\hat{H} - E\mathbb{1}) = 0$

$\Rightarrow (E_g - E)(E_e - E) - \hbar^2|\Omega|^2 = 0 = E^2 - (E_g + E_e)E + E_e E_g - \hbar^2|\Omega|^2 = 0$

$$\boxed{\Rightarrow E_\pm = \frac{E_g+E_e}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{(E_g+E_e)^2 - 4E_eE_g + 4\hbar^2|\Omega|^2} = \frac{E_g+E_e}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{E_e-E_g}{2}\right)^2 + \hbar^2|\Omega|^2}}$$

note: when $\Omega = 0 \Rightarrow \begin{cases} E_+ = \frac{E_g+E_e}{2} + \left|\frac{E_e-E_g}{2}\right| = E_e \\ E_- = E_g \end{cases}$ $\Rightarrow$ makes sense!

(some uncertainty as to the order due to $|E_e - E_g|$)

what about eigenstates?

Let us start with E_+.

$\hat{H}\Psi_+ = E_+\Psi_+$, where $\Psi_+ = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$, so that $\sqrt{|a|^2+|b|^2} = 1$

$$\Rightarrow \begin{matrix} E_g a + \hbar\Omega b = E_+ a \\ \hbar\Omega^* a + E_e b = E_+ b \end{matrix} \Rightarrow \begin{matrix} (E_g - E_+) a + \hbar\Omega b = 0 \\ \hbar\Omega^* a + (E_e - E_+) b = 0 \end{matrix}$$

if $\Omega = 0$ & $E_e > E_g \Rightarrow \Psi = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \Leftrightarrow |+\rangle = |e\rangle$, makes sense

let us denote $a = -\sin\theta$, $b = \cos\theta\, e^{i\varphi}$, $\Omega = |\Omega| e^{-i\varphi}$

$\Rightarrow -\hbar|\Omega|\sin\theta + (E_e - E_+)\cos\theta = 0$

$$\Rightarrow \tan\theta = -\frac{E_+ - E_e}{\hbar|\Omega|}$$ (again $\hbar|\Omega| \to 0 \Rightarrow \sin\theta = 0$ & $|+\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\varphi} \end{pmatrix} = |e\rangle$ + irrelevant phase)

In the same way for E_- eigen-value:

$H\Psi_- = E_-\Psi_-$

$$\Rightarrow \begin{matrix} (E_g - E_-) a + \hbar\Omega b = 0 \\ \hbar\Omega^* a + (E_e - E_-) b = 0 \end{matrix} \Rightarrow |-\rangle = \cos\theta|g\rangle + \sin\theta\, e^{i\varphi}|e\rangle$$

note: $|+\rangle$ & $|-\rangle$ are called dressed states

Might not be immediately clear, but this is what you get after simplifications... easy to check with some numerical tests. Also note that above we choose the amplitude for $|g\rangle$ as real. Different conventions for phases possible since only relative phase between amplitudes matter.

Btw. the process of finding all eigenstates/values of H is called exact diagonalization

Initial matrix $H = \bar{V}\hat{D}\bar{V}^{+}$ where $\bar{V}$ is a matrix formed by putting eigenstates as columns. $\hat{D}$ is a diagonal matrix with corresponding eigenvalues. For 2-state system

$$\hat{D} = \begin{pmatrix} E_- & 0 \\ 0 & E_+ \end{pmatrix} = \bar{V}^{+}\begin{pmatrix} E_g & \hbar\Omega \\ \hbar\Omega^* & E_e \end{pmatrix}\bar{V}, \quad \bar{V} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta e^{i\varphi} & \cos\theta e^{i\varphi} \end{pmatrix}$$

what can we say about time-evolution?

$$\Psi(t) = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = e^{-i\hat{H}t/\hbar}\begin{pmatrix} a(0) \\ b(0) \end{pmatrix} = \left(\mathbb{1} - i\frac{\hat{H}t}{\hbar} + \frac{1}{2!}\left(-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}\right)^2 + \dots\right)\begin{pmatrix} a(0) \\ b(0) \end{pmatrix}$$

Another way, expand in eigenstates $|-\rangle$ & $|+\rangle$

$$\Psi(0) = \begin{pmatrix} a(0) \\ b(0) \end{pmatrix} = C_-|-\rangle + C_+|+\rangle$$

For example: $a(0)=1,\ b(0)=0 \Rightarrow$ $C_-\cos\theta - C_+\sin\theta = 1$, $C_-\sin\theta + C_+\cos\theta = 0$ $\Rightarrow C_-(\cos^2\theta+\sin^2\theta) = \cos\theta$

so $C_- = \cos\theta$

$C_+ = -\sin\theta$

$$\Rightarrow |\Psi(t)\rangle = C_- e^{-iE_-t/\hbar}|-\rangle + C_+ e^{-iE_+t/\hbar}|+\rangle$$

$$= \begin{pmatrix} \cos\theta\cdot\cos\theta\, e^{-iE_-t/\hbar} \\ \cos\theta\sin\theta\, e^{-iE_-t/\hbar} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -\sin\theta\sin\theta\, e^{-iE_+t/\hbar} \\ \sin\theta\cos\theta\, e^{-iE_+t/\hbar} \end{pmatrix}$$

Prob. for being on excited state: $P_e(t) = |\langle e|\Psi(t)\rangle|^2 = \left|\sin\theta\cos\theta\left(e^{-iE_-t/\hbar} - e^{-iE_+t/\hbar}\right)\right|^2$

Example: $E_e = E_g = 0 \Rightarrow \theta = -\pi/4,\ E_+ = \hbar\Omega,\ E_- = -\hbar\Omega$

$$\Rightarrow P_e = \frac{1}{4}\cdot\left(e^{i\Omega t} - e^{-i\Omega t}\right)\left(e^{-i\Omega t} - e^{i\Omega t}\right) = \frac{1}{4}\left(2 - 2\cos 2\Omega t\right) = \frac{1-\cos 2\Omega t}{2},$$

$P_e = 1$ when $t = \frac{\pi}{2\Omega}$

Esimerkki yhden Qubitin loogisesta portista:

NOT:

Input	output
0	1
1	0

kvanttilaskennassa

Input	Output
$\|e\rangle$	$\|g\rangle$
$\|g\rangle$	$\|e\rangle$

$\hat{O} = \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$? $\hat{O}|e\rangle = \hat{O}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ $\Rightarrow$ OK. toimii kuten toivomme

$\hat{O}|g\rangle = \hat{O}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

Superpositio input? $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \Rightarrow$ output $|\psi\rangle_{out} = \begin{pmatrix} y \\ x \end{pmatrix}$

σ_x:n voi toteuttaa esim. sopivalla magneettikentällä x:n suuntaan jos qubit on koodattu spiniin

$$|\psi\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi_0\rangle = e^{-it/\hbar \cdot B_x\hat{\sigma}_x \cdot \frac{g\mu_B}{2}}|\psi_0\rangle = \underbrace{e^{-i\overbrace{\frac{t g\mu_B B_x}{2\hbar}}^{\alpha}\hat{\sigma}_x}}|\psi_0\rangle$$

$$= \left(\mathbb{1} - i\alpha\hat{\sigma}_x + \frac{(-i\alpha)^2}{2!}\underbrace{\hat{\sigma}_x^2}_{1} + \frac{(-i\alpha)^3}{3!}\underbrace{\hat{\sigma}_x^3}_{\sigma_x} + \dots\right)|\psi_0\rangle$$

$$= \left[\cos\left(\frac{g\mu_B B_x}{2\hbar}t\right)\mathbb{1} - i\sin\left(\frac{g\mu_B B_x}{2\hbar}t\right)\hat{\sigma}_x\right]|\psi_0\rangle, \text{ kun } \frac{g\mu_B B_x}{2\hbar}t = \frac{\pi}{2}$$

$\Rightarrow$ $-i$ vaihetekijää vaille σ_x!

Muita esim. Hadamard portti $\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ ...

yhdistä yhden spinin porttejä sopiviin 2 spinin portteihin (controlled-NOT)

$\Rightarrow$ kvanttitietokone