Density Matrix

(Baca, contoh, Gasiorowicz Supplemen 20-C.)

Dalam catatan ini diambil besaran spin hanya sebagai contoh. Catatan ini berlaku umum untuk besaran lain.

- Ambillah $|s\lambda_i\rangle$ sebagai keadaan spin dan merupakan *eigenstate* $\mathbf{S}^2$ dan S_z:

$$\mathbf{S}^2|s\lambda_i\rangle = s(s+1)|s\lambda_i\rangle \ , \ S_z|s\lambda_i\rangle = \lambda_i|s\lambda_i\rangle \, , \tag{1}$$

  dengan s bernilai sembarang (*integer* maupun *half-odd*). Mengingat kita mengambil sistem dengan spin tertentu dan tetap s, maka untuk selanjutnya penulisan $|s\lambda_i\rangle$ kita singkat menjadi $|\lambda_i\rangle$ agar lebih sederhana:

$$|s\lambda_i\rangle \to |\lambda_i\rangle \, . \tag{2}$$

  Sembarang keadaan spin $|n\rangle$, sesuai postulat ekspansi, dapat dinyatakan sebagai:

$$|n\rangle = \sum_i a_i^{(n)}|\lambda_i\rangle \ , \ (a_i^{(n)} = \text{ koefisien ekspansi } = \langle\lambda_i|n\rangle) \, . \tag{3}$$

- Bayangkan beberapa partikel atau beberapa sistem yang identik, keadaan masing-masing sistem sama, yaitu $|n\rangle$. Kumpulan sistem identik tersebut membentuk satu sistem yang lebih besar dengan keadaan, tentu saja, $|n\rangle$. Ini gambaran mengenai suatu sistem murni, yang terdiri dari sistem-sistem yang identik. Meskipun terdiri dari beberapa sistem, namun sistem besar tersebut dapat dilihat sebagai satu sistem saja dengan keadaan $|n\rangle$. Keadaan $|n\rangle$ disebut keadaan murni (*pure state*), ditunjukkan oleh Eq. (3).

  Kuadrat dari norm $|n\rangle$ adalah:

$$\|n\|^2 = \langle n|n\rangle = \sum_i \left|a_i^{(n)}\right|^2 \, . \tag{4}$$

  Secara umum, $|n\rangle$ dapat ternormalisasi ($\langle n|n\rangle = 1$) maupun tidak ($\langle n|n\rangle \neq 1$).

  Hasil pengukuran suatu besaran spin $\langle O\rangle$ pada sistem dengan keadaan spin murni $|n\rangle$ adalah:

$$\langle O\rangle = \frac{\langle n|\hat{O}|n\rangle}{\langle n|n\rangle} \tag{5}$$

- Kini, bayangkan suatu sistem besar terdiri dari beberapa sistem yang tidak identik, yang walaupun partikel penyusun sistem-sistem itu identik, namun keadaan masing-masing sistem berbeda. Ini gambaran mengenai suatu sistem campuran. Keadaan sistem seperti ini merupakan keadaan campuran (*mixed state*) $|\psi\rangle$.

  Anggaplah dalam keadaan campuran itu terdapat keadaan-keadaan murni $|n\rangle$, masing-masing dengan peluang P_n. Kuadrat dari norm $|\psi\rangle$ adalah:

$$\|\psi\|^2 = \sum_n P_n \langle n|n\rangle = \sum_n P_n \sum_i \left|a_i^{(n)}\right|^2 . \tag{6}$$

  Untuk kemudahan orang dapat pilih $\langle n|n\rangle = 1$ dan $\sum_n P_n = 1$.

  Hasil pengukuran suatu besaran spin $\overline{\langle O\rangle}$ pada sistem dengan keadaan campuran $|\psi\rangle$ tersebut adalah:

$$\overline{\langle O\rangle} = \frac{\sum_n P_n \langle n|\hat{O}|n\rangle}{\sum_n P_n \langle n|n\rangle} . \tag{7}$$

  Coba kita masukkan Eq. (3) ke Eq. (7). Diperoleh:

$$\begin{aligned}
\overline{\langle O\rangle} &= \frac{\sum_n P_n \sum_i \langle \lambda_i | a_i^{(n)*} \hat{O} \sum_j a_j^{(n)} | \lambda_j\rangle}{\sum_n P_n \sum_i \langle \lambda_i | a_i^{(n)*} \sum_j a_j^{(n)} | \lambda_j\rangle} \\
&= \frac{\sum_{ij} \langle \lambda_i | \sum_n a_i^{(n)*} P_n a_j^{(n)} \hat{O} | \lambda_j\rangle}{\sum_{ij} \langle \lambda_i | \sum_n a_i^{(n)*} P_n a_j^{(n)} | \lambda_j\rangle} \\
&= \frac{\sum_{ij} \sum_n a_i^{(n)*} P_n a_j^{(n)} \langle \lambda_i | \hat{O} | \lambda_j\rangle}{\sum_{ij} \sum_n a_i^{(n)*} P_n a_j^{(n)} \langle \lambda_i | \lambda_j\rangle} \\
&= \frac{\sum_{ij} \sum_n a_i^{(n)*} P_n a_j^{(n)} O_{ij}}{\sum_{ij} \sum_n a_i^{(n)*} P_n a_j^{(n)} \delta_{ij}} \\
&= \frac{\sum_{ij} \sum_n a_i^{(n)*} P_n a_j^{(n)} O_{ij}}{\sum_i \sum_n a_i^{(n)*} P_n a_i^{(n)}} \\
&= \frac{\sum_{ij} \left(\sum_n a_j^{(n)} P_n a_i^{(n)*}\right) O_{ij}}{\sum_i \left(\sum_n a_i^{(n)} P_n a_i^{(n)*}\right)} \\
&= \frac{\sum_{ij} \rho_{ji} O_{ij}}{\sum_i \rho_{ii}} \\
&= \frac{\sum_j \sum_i \rho_{ji} O_{ij}}{\sum_i \rho_{ii}} \\
&= \frac{\sum_j (\rho O)_{jj}}{\sum_i \rho_{ii}}
\end{aligned}$$

$$\rightarrow \overline{\langle O \rangle} = \frac{\text{Tr }(\rho O)}{\text{Tr }(\rho)} = \frac{\text{Tr }(O\rho)}{\text{Tr }(\rho)}\,, \tag{8}$$

dengan ρ disebut *density matrix*, yang elemennya dalam basis $|\lambda_i\rangle$ sebagai berikut:

$$\rho_{ji} = \langle \lambda_j | \rho | \lambda_i \rangle = \sum_n a_j^{(n)} P_n a_i^{(n)*}\,. \tag{9}$$

- *Density matrix*:

  Ekspansi *Density matrix*:

$$\begin{aligned}
\rho &= \hat{1}\ \rho\ \hat{1} \\
&= \sum_j |\lambda_j\rangle\langle\lambda_j|\rho \sum_i |\lambda_i\rangle\langle\lambda_i| \\
&= \sum_{ji} |\lambda_j\rangle\langle\lambda_j|\rho|\lambda_i\rangle\langle\lambda_i| \\
&= \sum_{ji} |\lambda_j\rangle\rho_{ji}\langle\lambda_i| \ \rightarrow\ \text{ekspansi } \rho \text{ dalam basis } |\lambda_i\rangle && (10) \\
&= \sum_{ji} |\lambda_j\rangle \sum_n a_j^{(n)} P_n a_i^{(n)*} \langle\lambda_i| \\
&= \sum_n \sum_j a_j^{(n)} |\lambda_j\rangle P_n \sum_i \langle\lambda_i| a_i^{(n)*} \\
&= \sum_n |n\rangle P_n \langle n| \ \rightarrow\ \text{ekspansi } \rho \text{ dalam } \textit{pure state } |n\rangle\,. && (11)
\end{aligned}$$

  Density matrix merupakan operator hermitian (gunakan Eq. (9)):

$$\begin{aligned}
\rho_{ji}^{+} &= \langle\lambda_j|\rho^{+}|\lambda_i\rangle \\
&= \langle\rho\lambda_j|\lambda_i\rangle \\
&= \langle\lambda_i|\rho|\lambda_j\rangle^{*} \\
&= \rho_{ij}^{*} \\
&= \sum_n a_i^{(n)*} P_n a_j^{(n)} \\
&= \sum_n a_j^{(n)} P_n a_i^{(n)*} \\
&= \rho_{ji} && (12) \\
\rightarrow \rho^{+} &= \rho\,. && (13)
\end{aligned}$$

- Ambillah, sebagai contoh, sistem dengan spin total $\frac{1}{2}\hbar$ (contoh, hamburan kaon-nukleon, kaon berspin 0 dan nukleon berspin $\frac{1}{2}\hbar$). Seperti apa *density matrix* untuk sistem seperti

itu? Pilihan yang logis adalah *density matrix* merupakan kombinasi linier σ_0 & $\boldsymbol{\sigma}$:

$$\rho = \sum_{\alpha=0}^{3} a_\alpha \sigma_\alpha \,, \tag{14}$$

dengan σ_0 matriks identitas berukuran 2 x 2 dan $\boldsymbol{\sigma}$ matriks Pauli:

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \,,\ \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \,,\ \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \,,\ \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \,, \tag{15}$$

dan a_α koefisien ekspansi yang diperoleh dengan menerapkan *orthogonality* σ_0 & $\boldsymbol{\sigma}$:

$$\mathrm{Tr}\ (\sigma_\alpha \sigma_\beta) = \mathrm{Tr}\ (\sigma_\beta \sigma_\alpha) = 2\delta_{\alpha\beta} \,, \tag{16}$$

sehingga:

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}\ (\sigma_\alpha \rho) = \mathrm{Tr}\ (\rho \sigma_\alpha) = \sum_{\beta=0}^{3} a_\beta \mathrm{Tr}\ (\sigma_\beta \sigma_\alpha) = \sum_{\beta=0}^{3} a_\beta 2\delta_{\alpha\beta} = 2a_\alpha \\ \rightarrow a_\alpha = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\ (\sigma_\alpha \rho) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\ (\rho \sigma_\alpha) \,. \end{aligned} \tag{17}$$

Kemudian, dari Eq. (8) diperoleh:

$$\mathrm{Tr}\ (\rho \sigma_\alpha) = \mathrm{Tr}\ (\sigma_\alpha \rho) = \overline{\langle \sigma_\alpha \rangle} \mathrm{Tr}\ (\rho) \,, \tag{18}$$

sehingga koefisien a_α dapat ditulis sebagai:

$$a_\alpha = \frac{1}{2}\overline{\langle \sigma_\alpha \rangle} \mathrm{Tr}\ (\rho) \,. \tag{19}$$

Trace *density matrix* dapat dihitung dengan memanfaatkan *orthogonality* σ_0 & $\boldsymbol{\sigma}$:

$$\mathrm{Tr}\ (\rho) = \sum_{\alpha=0}^{3} a_\alpha \mathrm{Tr}\ (\sigma_\alpha) = \sum_{\alpha=0}^{3} a_\alpha \mathrm{Tr}\ (\sigma_0 \sigma_\alpha) = 2a_0 \,. \tag{20}$$

Jadi, koefisien a_α dan *density matrix* ρ dapat ditulis sebagai:

$$a_\alpha = a_0 \overline{\langle \sigma_\alpha \rangle} \tag{21}$$

$$\rho = a_0 \sum_{\alpha=0}^{3} \overline{\langle \sigma_\alpha \rangle} \sigma_\alpha \,. \tag{22}$$

Seperti dapat dilihat pada Eq. (8), nilai a_0 tidak berpengaruh pada pengukuran:

$$\overline{\langle O \rangle} = \frac{\mathrm{Tr}\ (\rho O)}{\mathrm{Tr}\ (\rho)} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=0}^{3} \overline{\langle \sigma_\alpha \rangle} \mathrm{Tr}\ (\sigma_\alpha O) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=0}^{3} \overline{\langle \sigma_\alpha \rangle} \mathrm{Tr}\ (O \sigma_\alpha) \,. \tag{23}$$

Nilai $\overline{\langle\sigma_\alpha\rangle}$ untuk $\alpha = 1, 2, 3$ pada persamaan-persamaan di atas tidak lain adalah nilai ekspektasi / nilai pengukuran spin sistem pada sumbu-sumbu x, y, z, yang disebut sebagai polarisasi dan nilainya $-1 \leqslant \overline{\langle\sigma_\alpha\rangle} \leqslant 1$. Contoh, $\overline{\langle\sigma_1\rangle}$ adalah polarisasi spin sistem pada sumbu x, jika bernilai 1 berarti spin semua partikel dalam sistem terpolarisasi ke arah x^+, jika bernilai -1 berarti spin semua partikel dalam sistem terpolarisasi ke arah x^-, jika bernilai antara -1 dan 1 berarti spin sebagian partikel dalam sistem terpolarisasi ke arah x^- dan sebagian lagi ke arah x^-. $\overline{\langle\sigma_0\rangle}$ untuk keadaan spin acak, tak terpolarisasi (*unpolarized*) dan nilainya sama dengan 1.