Catatan Mekanika Kuantum 2

Matriks Densitas

Acuan Gasiorowicz, *Quantum Physics* Ed. 3, 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 keadaan eigen $\mathbf{S}^2$ 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 s tertentu dan tetap, 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:

$$\begin{aligned}
\overline{\langle O\rangle} &= \frac{\sum_n P_n \sum_i \langle\lambda_i|a_i^{(n)*}\hat{O}\sum_j a_j^{(n)}|\lambda_j\rangle}{\sum_n P_n \sum_i \langle\lambda_i|a_i^{(n)*}\sum_j a_j^{(n)}|\lambda_j\rangle} \\
&= \frac{\sum_{ij}\langle\lambda_i|\sum_n a_i^{(n)*}P_n a_j^{(n)}\hat{O}|\lambda_j\rangle}{\sum_{ij}\langle\lambda_i|\sum_n a_i^{(n)*}P_n a_j^{(n)}|\lambda_j\rangle} \\
&= \frac{\sum_{ij}\sum_n a_i^{(n)*}P_n a_j^{(n)}\langle\lambda_i|\hat{O}|\lambda_j\rangle}{\sum_{ij}\sum_n a_i^{(n)*}P_n a_j^{(n)}\langle\lambda_i|\lambda_j\rangle} \\
&= \frac{\sum_{ij}\sum_n a_i^{(n)*}P_n a_j^{(n)}O_{ij}}{\sum_{ij}\sum_n a_i^{(n)*}P_n a_j^{(n)}\delta_{ij}} \\
&= \frac{\sum_{ij}\sum_n a_i^{(n)*}P_n a_j^{(n)}O_{ij}}{\sum_i\sum_n a_i^{(n)*}P_n a_i^{(n)}} \\
&= \frac{\sum_{ij}\left(\sum_n a_j^{(n)}P_n a_i^{(n)*}\right)O_{ij}}{\sum_i\left(\sum_n a_i^{(n)}P_n a_i^{(n)*}\right)} \\
&= \frac{\sum_{ij}\rho_{ji}O_{ij}}{\sum_i \rho_{ii}} \\
&= \frac{\sum_j\sum_i \rho_{ji}O_{ij}}{\sum_i \rho_{ii}} \\
&= \frac{\sum_j (\rho O)_{jj}}{\sum_i \rho_{ii}} \\
\to \overline{\langle O\rangle} &= \frac{\mathrm{Tr}\ (\rho O)}{\mathrm{Tr}\ (\rho)} = \frac{\mathrm{Tr}\ (O\rho)}{\mathrm{Tr}\ (\rho)} ,
\end{aligned} \tag{8}$$

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

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

- Matriks densitas:

  Ekspansi matriks densitas:

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

  Matriks densitas merupakan operator hermitian (gunakan Eq. (9)):

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

- 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 matriks densitas untuk sistem seperti itu? Pilihan yang logis adalah matriks densitas merupakan kombinasi linier σ_0 & $\boldsymbol{\sigma}$:

$$
\rho = \sum_{\alpha=0}^{3} a_\alpha \sigma_\alpha\,, \qquad (14)
$$

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

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

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

$$
\text{Tr}\ (\sigma_\alpha\sigma_\beta) = \text{Tr}\ (\sigma_\beta\sigma_\alpha) = 2\delta_{\alpha\beta}\,, \qquad (16)
$$

sehingga:

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

Kemudian, dari Eq. (8) diperoleh:

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

sehingga koefisien a_α dapat ditulis sebagai:

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

Trace matriks densitas dapat dihitung dengan memanfaatkan ortogonalitas σ_0 & $\boldsymbol{\sigma}$:

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

Jadi, koefisien a_α dan matriks densitas ρ dapat ditulis sebagai:

$$a_\alpha = a_0\overline{\langle\sigma_\alpha\rangle} \qquad (21)$$

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

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

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

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^-. Nilai $\overline{\langle\sigma_0\rangle}$ berlaku untuk keadaan spin acak, tak terpolarisasi (*unpolarized*), dan besarnya sama dengan 1.