Глава 7

Смесени и сплетени състояния

7.5 Чисти и смесени състояния: матрица на плътността

Досега предполагахме, че на всяко състояние на една квантова система може да се съпостави вектор от Хилбертовото пространство. Това обаче не винаги е възможно.

Състояние, което може да се опише с вектор на състоянието в Хилбертовото пространство, се нарича *чисто състояние*. Състояние, което не може да се опише с вектор на състоянието, се нарича *смесено състояние*. Смесените състояния не трябва да се бъркат със *сплетените многочастични състояния*, които могат да бъдат както чисти (в многочастично Хилбертово пространство), така и смесени. Подобна грешка е често срещана дори и в някои учебници!

За описание на смесените състояния се използва формализмът на матрица на плътността. Ще я въведем най-напред като алтернативен (на вектора на състоянието) начин за третиране на чисти състояния и след това ще я разширим за смесени състояния.

Чисти състояния

Да разгледаме едно чисто квантово състояние, което се описва от вектор на състоянието (или вълнова функция) $|\psi\rangle$. Съгласно едно от следствията от третия принцип на квантовата механика средната стойност на една физична величина F е

$$\overline{F} = \langle\psi|\widehat{F}|\psi\rangle. \tag{7.1}$$

Да изберем един базис $\{|\varphi_n\rangle\}$ в Хилбертовото пространство на $|\psi\rangle$. Условието за пълнота на базиса е

$$\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = \widehat{\mathbf{1}}. \tag{7.2}$$

Заместваме това разложение на единичния оператор в (7.1):

$$\overline{F} = \sum_{k,n}\langle\psi|\left(|\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|\right)\widehat{F}\left(|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\right)|\psi\rangle = \sum_{k,n}\langle\psi|\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|\widehat{F}|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\psi\rangle \tag{7.3}$$

Пренареждаме множителите във вида

$$\overline{F} = \sum_{k,n} \langle\varphi_k|\widehat{F}|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\psi\rangle\langle\psi|\varphi_k\rangle = \sum_{k,n} \langle\varphi_k|\widehat{F}|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\widehat{\rho}|\varphi_k\rangle = \sum_k \langle\varphi_k|\widehat{F}\widehat{\rho}|\varphi_k\rangle, \tag{7.4}$$

където проекторът

$$\widehat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| \tag{7.5}$$

се нарича *статистически оператор*, а матричните елементи

$$\rho_{nk} = \langle\varphi_n|\widehat{\rho}|\varphi_k\rangle \tag{7.6}$$

формират матрица, наречена *матрица на плътността*. С други думи, матрицата на плътността е матрицата на статистическия оператор.

Можем да напишем (7.4) във вида

$$\overline{F} = \sum_k \langle\varphi_k|\widehat{F}\widehat{\rho}|\varphi_k\rangle = \mathrm{Tr}(\widehat{F}\widehat{\rho}), \tag{7.7}$$

където Tr означава следа на матрица (сумата от диагоналните ѝ елементи). Последната формула дава алтернативен начин за пресмятане на средната стойност на една физична величина чрез статистическия оператор.

Очевидно матрицата на плътността зависи от избора на базиса $\{|\varphi_n\rangle\}$. По същия начин и матрицата на коя да е физична величина зависи от избора на базиса. Независимо от това средната стойност (7.7) на величината F не зависи от базиса, а само от статистическия оператор $\widehat{\rho}$, защото следата на една матрица не зависи от базиса. Наистина, смяната на един базис с друг се извършва с унитарен оператор $\widehat{U}$: $|\varphi_n\rangle = \widehat{U}|\chi_n\rangle$. Следователно

$$\mathrm{Tr}_\varphi \widehat{A} = \sum_n \langle\varphi_n|\widehat{A}|\varphi_n\rangle = \sum_n \langle\chi_n|\widehat{U}^\dagger\widehat{A}\widehat{U}|\chi_n\rangle = \mathrm{Tr}_\chi(\widehat{U}^\dagger\widehat{A}\widehat{U}) = \mathrm{Tr}_\chi \widehat{A}', \tag{7.8}$$

където $\widehat{A}' = \widehat{U}^\dagger\widehat{A}\widehat{U}$ е трансформираният оператор на величината A.

Статистическият оператор $\widehat{\rho}$ има редица свойства.

1. $\widehat{\rho}$ е ермитов оператор и следователно има реални собствени стойности.

2. $\rho_{nn} = \langle\varphi_n|\widehat{\rho}|\varphi_n\rangle \geq 0$, т.е. диагоналните елементи на матрицата на плътността в произволен базис са неотрицателни. Това значи, че статистическият оператор е положително определен.

3. $\mathrm{Tr}\,\widehat{\rho} = 1$, понеже $\mathrm{Tr}\,\widehat{\rho} = \sum_n \langle\varphi_n|\widehat{\rho}|\varphi_n\rangle = \sum_n \langle\varphi_n|\psi\rangle\langle\psi|\varphi_n\rangle = \sum_n \langle\psi|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1$.

4. $0 \leq \langle\varphi_n|\widehat{\rho}|\varphi_n\rangle \leq 1$, което следва от свойства 2 и 3.

5. $\widehat{\rho}^2 = \widehat{\rho}$, понеже $\widehat{\rho}^2 = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = \widehat{\rho}$.

6. $\mathrm{Tr}\,\widehat{\rho}^2 = 1$, което следва директно от свойства 4 и 5.

Сега да предположим, че $\widehat{F}$ има дискретен спектър, като собствените му вектори са $|\varphi_n\rangle$:

$$\widehat{F}|\varphi_n\rangle = F_n|\varphi_n\rangle. \tag{7.9}$$

Тогава от (7.7) получаваме

$$\overline{F} = \sum_k F_k\langle\varphi_k|\widehat{\rho}|\varphi_k\rangle. \tag{7.10}$$

Следователно диагоналният елемент $\langle\varphi_k|\widehat{\rho}|\varphi_k\rangle = \rho_{kk}$ има физически смисъл на вероятност величината F да приеме стойност F_k в състояние $|\varphi_k\rangle$, ако F_k е неизродена. В случая на израждане тази вероятност е сума по всички диагонални матрични елементи спрямо изродените състояния.

Нека сега да изведем диференциалното уравнение, което удовлетворява $\widehat{\rho}$. Започваме от уравнението на Шрьодингер,

$$i\hbar|\partial_t\psi\rangle = \widehat{H}|\psi\rangle, \tag{7.11а}$$

където за краткост пишем $\partial_t = \partial/\partial t$. Спрягаме ермитово:

$$-i\hbar\langle\partial_t\psi| = \langle\psi|\widehat{H}. \tag{7.11б}$$

Умножаваме първото уравнение отдясно с $\langle\psi|$, а второто отляво с $|\psi\rangle$:

$$i\hbar|\partial_t\psi\rangle\langle\psi| = \widehat{H}|\psi\rangle\langle\psi|, \tag{7.12а}$$

$$-i\hbar|\psi\rangle\langle\partial_t\psi| = |\psi\rangle\langle\psi|\widehat{H}. \tag{7.12б}$$

Изваждаме двете уравнения и получаваме

$$i\hbar|\partial_t\psi\rangle\langle\psi| + i\hbar|\psi\rangle\langle\partial_t\psi| = \widehat{H}\widehat{\rho} - \widehat{\rho}\widehat{H}. \tag{7.13}$$

Оттук получаваме уравнението за $\widehat{\rho}$:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\widehat{\rho} = [\widehat{H}, \widehat{\rho}], \tag{7.14}$$

което се нарича уравнение на Лиувил-фон Нойман. Именно Джон фон Нойман въвежда статистическия оператор и матрицата на плътността в квантовата механика през 1927 г.

За чистите състояния описанието с матрица на плътността е еквивалентно на това с вектор на състоянието. Матрицата на плътността, обаче, позволява описанието и на смесените състояния.

Смесени състояния

За описанието на смесените състояния трябва да се формулират *постулати*, които при прехода от смесени към чисти състояния да преминават в свойствата, изведени по-горе. На всяко състояние на една квантова система съпоставяме статистически оператор $\widehat{\rho}$, който:

1. е *ермитов*;

2. е *положително определен*, т.е. има неотрицателни диагонални елементи,

$$\rho_{nn} \geq 0; \tag{7.15}$$

3. има *единична следа*,

$$\mathrm{Tr}\,\widehat{\rho} = 1. \tag{7.16}$$

4. удовлетворява уравнението на Лиувил-фон Нойман,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\widehat{\rho} = [\widehat{H}, \widehat{\rho}]. \tag{7.17}$$

Във функционалния анализ се доказва, че всеки положително определен ермитов оператор с единична следа има чисто *дискретен спектър*. Уравнението за собствените вектори и собствените стойности на $\widehat{\rho}$ е

$$\widehat{\rho}|\psi_n\rangle = \rho_n|\psi_n\rangle, \tag{7.18}$$

като собствените вектори на $\widehat{\rho}$ образуват базис,

$$\sum_n \widehat{\mathcal{P}}_n = \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = \widehat{\mathbf{1}}, \qquad \langle\psi_k|\psi_n\rangle = \delta_{kn}, \tag{7.19}$$

където сме въвели проектора $\widehat{\mathcal{P}}_n = |\psi_n\rangle\langle\psi_n|$. От изискването за положителна определеност на $\widehat{\rho}$ следва, че $\rho_n \geq 0$, а от условието $\mathrm{Tr}\,\widehat{\rho} = 1$ получаваме

$$\sum_n \rho_n = 1, \qquad (0 \leq \rho_n \leq 1). \tag{7.20}$$

Действаме с $\widehat{\rho}$ отляво на (7.19) и намираме

$$\widehat{\rho} = \sum_n \widehat{\rho}|\psi_n\rangle\langle\psi_n| = \sum_n \rho_n|\psi_n\rangle\langle\psi_n| = \sum_n \rho_n\widehat{\mathcal{P}}_n, \tag{7.21}$$

което се нарича спектрално разлагане на статистическия оператор.

В допълнение на горните 4 постулата добавяме още един

5 Средната стойност на една физична величина F в състояние, описвано от $\widehat{\rho}$, се дава с формулата

$$\overline{F} = \mathrm{Tr}(\widehat{F}\widehat{\rho}). \tag{7.22}$$

Заместваме (7.21) в последната формула и намираме

$$\overline{F} = \sum_n \rho_n \mathrm{Tr}(\widehat{F}\widehat{\mathcal{P}}_n) \tag{7.23}$$

Нека операторът $\widehat{F}$ да има чисто дискретен спектър,

$$\widehat{F}|\varphi_n\rangle = F_n|\varphi_n\rangle. \tag{7.24}$$

Подобно на (7.21), спектралното разлагане на $\widehat{F}$ е

$$\widehat{F} = \sum_n F_n \widehat{\mathcal{F}}_n, \tag{7.25}$$

където $\widehat{\mathcal{F}}_n = |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$ е проекторът на собствените състояния на $\widehat{F}$. Заместваме (7.25) в (7.22) и намираме

$$\begin{aligned}\overline{F} = \mathrm{Tr}(\widehat{F}\widehat{\rho}) &= \sum_n F_n \mathrm{Tr}(\widehat{\mathcal{F}}_n\widehat{\rho}) = \sum_n F_n \mathrm{Tr}(|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\widehat{\rho}) = \sum_n F_n \sum_k \langle\varphi_k|\left(|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\widehat{\rho}\right)|\varphi_k\rangle \\ &= \sum_n F_n \sum_k \delta_{kn}\langle\varphi_n|\widehat{\rho}|\varphi_k\rangle = \sum_n F_n\langle\varphi_n|\widehat{\rho}|\varphi_n\rangle.\end{aligned} \tag{7.26}$$

Очевидно

$$W(F_n) = \mathrm{Tr}(\widehat{\mathcal{F}}_n\widehat{\rho}) = \langle\varphi_n|\widehat{\rho}|\varphi_n\rangle \tag{7.27}$$

играе ролята на вероятност физическата величина F да приеме стойност F_n в състояние $\widehat{\rho}$. Тази формула е валидна за неизроден спектър на $\widehat{F}$. Ако спектърът е изроден, трябва да сумираме по всички състояния със собствена стойност F_n. По този начин статистическият оператор позволява пълното описание на квантовата система.

Нека сега да разгледаме случая, когато само една собствена стойност ρ_k на $\widehat{\rho}$ е ненулева, а всичко останали са 0. Това значи, че $\rho_k = 1$, т.е.

$$\rho_j = \delta_{jk}. \tag{7.28}$$

Като заместим в спектралното разлагане (7.21), намираме

$$\widehat{\rho} = |\psi_k\rangle\langle\psi_k|, \tag{7.29}$$

т.е. получаваме статистически оператор, отговарящ на чистото състояние $|\psi_k\rangle$. Следователно, формула (7.28) дава необходимото и достатъчно условие статистическият оператор $\widehat{\rho}$ да описва чистото състояние $|\psi_k\rangle$, т.е. показва кога едно смесено състояние се редуцира до чисто. Казано по друг начин, ако формула (7.28) не е изпълнена, квантовото състояние, описвано от $\widehat{\rho}$, е смесено.

Когато условието (7.28) е изпълнено, лесно се проверява, че всичко формули, изведени за смесените състояния, се редуцират до съответните формули за чистите състояния. По този начин може да се каже, че описанието на смесените състояния със статистическия оператор е обобщение на описанието на чистите състояния с вектора на състоянието.

Нека отново да разгледаме спектралното разлагане (7.21) на статистическия оператор $\widehat{\rho}$. От заключенията за преминаване на смесено в чисто състояние, свързани с формула (7.28), следва, че спектралното разлагане (7.21) на смесеното състояние, описвано с $\widehat{\rho}$, може да се разглежда като *смес* от чисти състояния $|\psi_n\rangle$. При това ролята на статистически тегла (или вероятности за дадено чисто състояние) се играе от собствените стойности ρ_n на $\widehat{\rho}$, а свойството (7.20) играе ролята на нормировка.

Да заместим спектралното разлагане (7.21) в (7.27):

$$W(F_n) = \mathrm{Tr}(\widehat{\mathcal{F}}_n\widehat{\rho}) = \sum_k \rho_k \mathrm{Tr}(\widehat{\mathcal{F}}_n|\psi_k\rangle\langle\psi_k|) = \sum_k \rho_k\langle\psi_k|\widehat{\mathcal{F}}_n|\psi_k\rangle = \sum_k \rho_k\,|\langle\psi_k|\varphi_n\rangle|^2\,. \tag{7.30}$$

Оттук следва, че величината $W_k(F_n) = \langle\psi_k|\widehat{\mathcal{F}}_n|\psi_k\rangle = |\langle\psi_k|\varphi_n\rangle|^2$ има смисъл на разпределение на стойността F_n по чистите състояния $|\psi_k\rangle$ с тегла ρ_k.

Нека сега да сравним получените резултати с тези за едно чисто състояние от вида

$$|\psi\rangle = \sum_n \sqrt{\rho_n}\,|\psi_n\rangle. \tag{7.31}$$

Статистическият оператор за това състояние е

$$\begin{aligned}\widehat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| &= \sum_n \sqrt{\rho_n}\,|\psi_n\rangle \sum_k \sqrt{\rho_k}\,\langle\psi_k| = \sum_n \sqrt{\rho_n}\,|\psi_n\rangle \left[\sqrt{\rho_n}\,\langle\psi_n| + \sum_{k\neq n}\sqrt{\rho_k}\,\langle\psi_k|\right] \\ &= \sum_n \rho_n|\psi_n\rangle\langle\psi_n| + \sum_n\sum_{k\neq n}\sqrt{\rho_k\rho_n}\,|\psi_n\rangle\langle\psi_k|.\end{aligned} \tag{7.32}$$

Виждаме, че първият член съвпада със спектралното разлагане (7.21) на статистическия оператор за смесените състояния, но вторият член с двойната сума липсва при смесените състояния. Заместваме последното разлагане в (7.30) и намираме

$$\begin{aligned}W(F_n) = \mathrm{Tr}(\widehat{\mathcal{F}}_n\widehat{\rho}) &= \sum_k \rho_k W_k(F_n) + \sum_m\sum_{k\neq m}\sqrt{\rho_k\rho_m}\,\mathrm{Tr}(\widehat{\mathcal{F}}_n|\psi_m\rangle\langle\psi_k|) \\ &= \sum_k \rho_k W_k(F_n) + \sum_m\sum_{k\neq m}\sqrt{\rho_k\rho_m}\,\langle\psi_k|\widehat{\mathcal{F}}_n|\psi_m\rangle.\end{aligned} \tag{7.33}$$

Първият член в последния ред съвпада с резултата (7.30) за смесени състояния. Вторият член зависи от фазовите отношения между собствените вектори $|\psi_m\rangle$ и представлява кохерентна сума. Той описва квантова интерференция, която е характерна за чистите състояния. Затова можем да кажем, че чистото състояние (7.31) описва *кохерентна* суперпозиция между чисти състояние, докато смесеното състояние (7.21) описва *некохерентна* суперпозиция от чисти състояния.

Съществува прост *тест* дали едно състояние, зададено със статистически оператор $\widehat{\rho}$ е чисто или смесено. За чистите състояния имаме от техните свойства 3 и 4

$$\mathrm{Tr}\,\rho^2 = \mathrm{Tr}\,\rho = 1 \qquad \text{(за чисти състояния)}, \tag{7.34}$$

докато за смесените състояния имаме

$$\mathrm{Tr}\,\rho^2 < 1 \qquad \text{(за смесени състояния).} \tag{7.35}$$

За да докажем последното свойство, използваме спектралното разлагане (7.21) на статистическия оператор. Имаме

$$\begin{aligned}\widehat{\rho}^2 = \widehat{\rho}\widehat{\rho} &= \sum_n \rho_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| \sum_k \rho_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k| = \sum_n \sum_k \rho_n \rho_k |\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi_k\rangle\langle\psi_k| \\ &= \sum_n \rho_n^2 |\psi_n\rangle\langle\psi_n|. \end{aligned} \tag{7.36}$$

Следователно

$$\mathrm{Tr}\,\rho^2 = \sum_n \rho_n^2 \leq \left(\sum_n \rho_n\right)^2 = 1. \tag{7.37}$$

Наистина, имаме

$$\left(\sum_n \rho_n\right)^2 = \sum_n \rho_n^2 + \sum_n \sum_{k\neq n} \rho_n \rho_k \geq \sum_n \rho_n^2, \tag{7.38}$$

понеже сумата от смесените произведения е неотрицателна вследствие на свойството $0 \leq \rho_n \leq 1$. Тази сума ще е нула тогава и само тогава, когато всички собствени стойности ρ_n, с изключение на една, са равни на 0, т.е. изпълнено е условието (7.28) за чисто състояние.