Density operators

§ 密度算符，纯与混合系综 (pure versus mixed ensemble)

$\boxed{\text{量子力学利用系综表示统计预言}}$ 目前为止，考虑的都是

• 系综：大量完全相同的物理系统，每个系统都处于同样的态 $|\alpha\rangle$

测 A， $A|a\rangle = a|a\rangle$. $|\alpha\rangle = \sum_a c_a |a\rangle$.

N个系统中 $|c_a|^2 \cdot N$ 个得到 a，

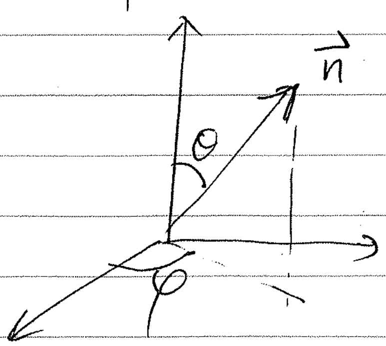
具体例子：SG实验，从~~[illegible]~~其中飞出的一束原子，构成一个系综。比如都处于 $|+z\rangle$.

• 怎么描述一个系综，其中一部分处于 $|\alpha\rangle$ 另一部分处于 $|\beta\rangle$?

考虑一束银原子从炉子中出来 还没有被SG装置分束.

根据对称性，$\vec{S}$ 的方向应该是随机的

而最一般的态 $|\alpha\rangle = c_+|+z\rangle + c_-|-z\rangle$. 都是 $\vec{S}\cdot\vec{n}$ 的本征态 (指向 $\vec{n}$).



则 $\dfrac{c_+}{c_-} = \dfrac{\cos(\frac{\theta}{2})}{\sin(\frac{\theta}{2})} e^{-i\varphi}$

就是说，任一个态都有确定的自旋指向

$\langle\alpha|\vec{S}|\alpha\rangle = \vec{n}\frac{\hbar}{2}$

所以不能描述自旋指向随机的系综.

• 有必要引入占据权重 比如炉子出来的银原子 50%处于 $|+z\rangle$

50%处于 $|-z\rangle$

由于"热"原子们不挑方向，也可以是 50% $|+x\rangle$, 50% $|-x\rangle$

W_+ W_-

• W_+, W_- 是两个实数，没有相位 → 非相干混合

完全不同于 $\frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle$ → 这是指向 x 方向的自旋态.

• 不能把 W_+, W_- 看成 $|c_+|^2$ 与 $|c_-|^2$，它们是经典几率

一个班 50%男, 50%女. 任选一个是男的几率50%. 不会有一个人 [illegible]

· 热炉的系综 可称完全随机系综. unpolarized
通过SG测量后的束 是纯系综. polarized

前者通过SG装置(任意方向设置)都分成两束，一样强
后者再通过同样设置的SG，只有一束.

以上两种系综是混合系综 (mixed ensemble) 的极端.
partially polarized.

§ 系综平均 (ensemble averages) 与密度算符.

J. von Neumann 1927.

纯系综 $|\alpha\rangle$.
混合系综 $w_1, |\alpha^{(1)}\rangle$; $w_2, |\alpha^{(2)}\rangle$; ......

$\sum_{i=1}^{N} w_i = 1$ $|\alpha^{(1)}\rangle$ 与 $|\alpha^{(2)}\rangle$ 不一定要求正交.
∴ N 可以大于 D (Hilbert space)

例. 20% $|+,x\rangle$, 50% $|+,y\rangle$, 30% $|-,z\rangle$

· 测量.

$$[A] \equiv \sum_i w_i \langle\alpha^{(i)}|A|\alpha^{(i)}\rangle$$

$|\alpha^{(i)}\rangle$ 态上的量子平均.

$$= \sum_i w_i \sum_a \langle\alpha^{(i)}|A|a\rangle\langle a|\alpha^{(i)}\rangle$$

$$= \sum_i w_i \boxed{\sum_a |\langle a|\alpha^{(i)}\rangle|^2 a}$$

双重平均

$|\langle a|\alpha^{(i)}\rangle|^2$ 是 $|\alpha^{(i)}\rangle$ 态处于 $|a\rangle$ 的几率.
w_i 是系统处于 $|\alpha^{(i)}\rangle$ 的几率.

改进. $$[A] = \sum_i w_i \sum_{b'} \sum_{b''} \langle\alpha^{(i)}|b'\rangle\langle b'|A|b''\rangle\langle b''|\alpha^{(i)}\rangle$$

$$= \sum_{b'b''} \underbrace{\left(\sum_i w_i \langle b''|\alpha^{(i)}\rangle\langle\alpha^{(i)}|b'\rangle\right)}_{\text{与A无关}} \langle b'|A|b''\rangle$$

定义 $\rho \equiv \sum_i w_i |\alpha^{(i)}\rangle\langle\alpha^{(i)}| \rightarrow$ Density operator.

$\langle b''|\rho|b'\rangle = \sum_i w_i \langle b''|\alpha^{(i)}\rangle\langle\alpha^{(i)}|b'\rangle$ density matrix

$$[A]=\sum_{b'b''}\langle b''|\rho|b'\rangle\langle b'|A|b''\rangle=\sum_{b''}(\rho A)_{b''b''}$$

$$\boxed{[A]=\mathrm{Tr}(\rho A)}$$ 与表象无关 powerful.

• $\mathrm{Tr}(\rho)=\sum_i\sum_{b'} w_i\langle b'|\alpha^{(i)}\rangle\langle\alpha^{(i)}|b'\rangle$

$$=\sum w_i\langle\alpha^{(i)}|\alpha^{(i)}\rangle=1.$$

• $\rho_{ij}=\rho_{ji}^{*}$

例：对 $S=\frac{1}{2}$ 系统. ρ 由3个实数确定：① 2×2 Hermitian 由4个实数决定. ② 归一化 → 只有3个. $[\sigma_x],[\sigma_y],[\sigma_z]$

计算 $\mathrm{Tr}(\rho\sigma_x)$, $\mathrm{Tr}(\rho\sigma_y)$, $\mathrm{Tr}(\rho\sigma_z)$ 得

$$\left.\begin{cases}2\mathrm{Re}(\rho_{12})=[\sigma_x],\ -2\,\mathrm{Im}(\rho_{12})=[\sigma_y]\\ 2\rho_{11}=1+[\sigma_z],\ 2\rho_{22}=1-[\sigma_z]\end{cases}\right\}\ \rho=\begin{bmatrix}\frac{1+[\sigma_z]}{2}, & \frac{[\sigma_x]-i[\sigma_y]}{2}\\ \frac{[\sigma_x]+i[\sigma_y]}{2}, & \frac{1-[\sigma_z]}{2}\end{bmatrix}$$

对于一个纯态 $|\alpha\rangle$ 总可以看成 $\vec{\sigma}$ 在某个方向 $\vec{n}$ 投影 $\vec{\sigma}\cdot\vec{n}$ 的本征矢. $\vec{n}(\theta,\varphi)$

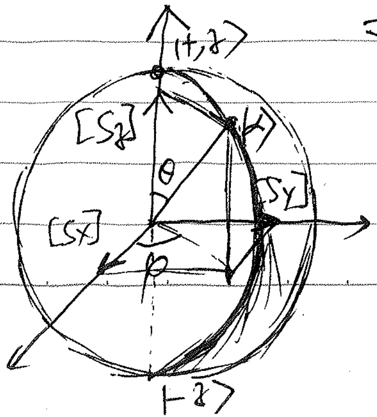
$$|\alpha\rangle=\left[\cos\frac{\theta}{2}|+,z\rangle+\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}|-z\rangle\right]e^{i\gamma}$$ γ 是个任意相位.

$$\rho=|\alpha\rangle\langle\alpha|=\begin{bmatrix}\cos^2\frac{\theta}{2}, & \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi}\\ \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}, & \sin^2\frac{\theta}{2}\end{bmatrix}$$

$$\left.\begin{aligned}&[\sigma_z]=\cos^2\frac{\theta}{2}-\sin^2\frac{\theta}{2}=\cos\theta,\\ &[\sigma_x]=\sin\theta\cos\varphi,\quad[\sigma_y]=\sin\theta\sin\varphi\end{aligned}\right\rangle\ [\sigma_x]^2+[\sigma_y]^2+[\sigma_z]^2=1.$$

满足 $$\rho=\begin{pmatrix}\frac{1+\cos\theta}{2}, & \frac{1}{2}(\sin\theta\cos\varphi-i\sin\theta\sin\varphi)\\ \frac{1}{2}(\sin\theta\cos\varphi+i\sin\theta\sin\varphi), & \frac{1}{2}(1-\cos\theta)\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{2}(I+\vec{n}\cdot\vec{\sigma}).\qquad|\vec{n}|=1.$$



Bloch球：$|\alpha\rangle$ 对应球面上由 (θ,φ) 标志的一个点

对于一个 mixed state 系统

$$\rho = \begin{bmatrix} \frac{1+[\sigma_z]}{2}, & \frac{1}{2}([\sigma_x]-i[\sigma_y]) \\ \frac{1}{2}([\sigma_x]+i[\sigma_y]), & \frac{1}{2}(1-[\sigma_z]) \end{bmatrix}$$

$\boxed{\vec{n} = ([\sigma_x], [\sigma_y], [\sigma_z])}$

$= \frac{1}{2}(I + \vec{n}\cdot\vec{\sigma})$ $\vec{\sigma}$: 3个 pauli 矩阵，

但是 $\boxed{|\vec{n}| < 1}$ 球内！例. 50% $|+z\rangle$, 50% $|-z\rangle$. $[S_z]=[S_x]=[S_y]=0$

$\boxed{\rho = \frac{1}{2}I}$

更一般地： 纯系统对应某个 $|\alpha^{(i)}\rangle$ 的权重 $w_i=1$，其余 $w_{j\neq i}=0$.

$\rho = |\alpha^{(i)}\rangle\langle\alpha^{(i)}|$ （不求和）

因此 $\rho^2 = \rho$，或 $\rho(\rho-1)=0$. $\therefore \boxed{Tr(\rho^2)=1}$

$\therefore \boxed{\rho \text{ 的本征值为 } 0 \text{ 或 } 1}$. （设 $\hat{\rho}|\rho'\rangle = \rho'|\rho'\rangle$，$\hat{\rho}(\hat{\rho}-1)|\rho'\rangle = \rho'(\rho'-1)|\rho'\rangle = 0$）

以 $\hat{\rho}$ 的本征矢为基（对角化 $\hat{\rho}$）.

$$\rho = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & \ddots & & 0 \\ & & 0 & \\ & & & 1 \\ 0 & & & & 0 \\ & & & & & \ddots \end{pmatrix} \quad \because Tr\rho = 1.$$

• 非纯态系统 $Tr(\rho^2) < 1$. 但 > 0.

给定密度算符，如何构造 density matrix（在某个基表象）.

• 纯 $|\alpha\rangle\langle\alpha| = \sum_{b'}\sum_{b''} |b'\rangle\langle b'|\alpha\rangle\langle\alpha|b''\rangle\langle b''|$

b' 行，b'' 列 $=$ $\langle b'|\alpha\rangle\cdot\langle\alpha|b''\rangle = \langle b'|\alpha\rangle\langle b''|\alpha\rangle^*$

• 对于 mixed ensemble: $\times w_i$，求和

$$|\alpha\rangle\langle\alpha| = \begin{pmatrix} \langle b_1|\alpha\rangle \\ \langle b_2|\alpha\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} (\langle b_1|\alpha\rangle^*, \langle b_2|\alpha\rangle^*, \cdots\cdots)$$

例子1: S_z+方向完全极化系综

$$\rho = |+,z\rangle\langle +,z| = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}(1,0) = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{pmatrix}.$$

例2: S_x+完全极化

$$\rho = |+S_x\rangle\langle +S_x| = \begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right) = \begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

例3 完全非极化束. $W_+=50\%$, $|+S_z\rangle$; $W_-=50\%$ $|-S_z\rangle$

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{pmatrix} + \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & 0\\0 & 1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}.$$

发现 $= \frac{1}{2}\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix} + \frac{1}{2}\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix} \leftarrow |-S_x\rangle\langle -S_x|$

等价 $W_+=50\%$ $|+S_x\rangle$; $W_- = 50\%$ $|-S_x\rangle$ 系综

• 同样的系综可以有不同的分解或纯态之混合.

$$\boxed{\text{最终 } [\sigma] = 0}$$

例4, 部分极化: $W_1 = 0.75$, $|+S_z\rangle$; $W_2 = 0.25$, $|+S_x\rangle$

$$\rho = \frac{3}{4}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{pmatrix} + \frac{1}{4}\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix}\frac{7}{8} & \frac{1}{8}\\ \frac{1}{8} & \frac{1}{8}\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\left[I + \begin{pmatrix}\frac{3}{4} & \frac{1}{4}\\ \frac{1}{4} & -\frac{3}{4}\end{pmatrix}\right]$$

$$[\sigma_x] = \frac{1}{4},\quad [\sigma_y] = 0,\quad [\sigma_z] = \frac{3}{4}.$$

$$|\vec{n}| = \sqrt{\frac{1}{16} + \frac{9}{16}} = \frac{\sqrt{10}}{4} < 1.$$