§密度算符（Density operators）纯与混合系综（pure and mixed ensembles）

量子力学可以预言实验，但是统计性的。比如一个粒子处于 $|\alpha\rangle$，测 A.

$$A|a\rangle = a|a\rangle, \quad a\text{是本征值}, |a\rangle\text{是}A\text{的本征矢}. \quad \sum_a |a\rangle\langle a| = \mathbb{1}$$

$$|\alpha\rangle = \sum_a c_a |a\rangle, \quad c_a = \langle a|\alpha\rangle.$$

测 A 得到 a 的几率为 $|c_a|^2$.

引入系综的概念（ensemble）：N 个一样的粒子，都处于 $|\alpha\rangle$ 态。N 是大量的。构成一个 ensemble.

测 A：有 $N\cdot|c_a|^2$ 个成员，得到 a.

例：SG 实验（z 方向设置磁场），飞出的一束原子构成一个系综，处于 $|+z\rangle$；另一束构成另一个系综处于 $|-z\rangle$.

- 怎样描述一个系综（仍然由 N 个一样的粒子(或系统)组成），但是 70% 处于 $|\alpha\rangle$ 态，30% 处于 $|\beta\rangle$ 态呢？

有些物理系统不能单纯用 $|\alpha\rangle$ 描述.

比如一束银原子从炉子里飞出，在到达 SG 装置之前.

根据对称性，它们的自旋方向应该是随机的.

如果它们都处于 $|\alpha\rangle$，哪怕最一般的 $|\alpha\rangle = c_+|+z\rangle + c_-|-z\rangle$

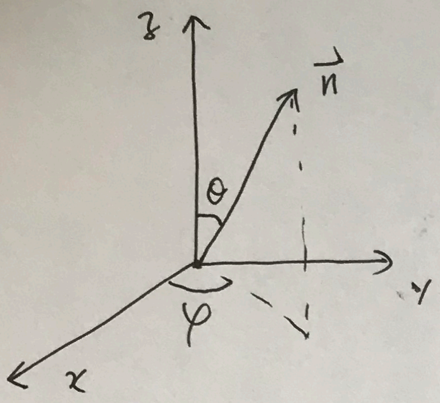
因为 c_+, c_- 总可以写成 $c_+ = \cos\frac{\theta}{2}$，$c_- = \sin\frac{\theta}{2}\, e^{i\varphi}$.

定义 $\vec{n} = \cancel{(\cos\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \sin\theta)}$，$|\alpha\rangle$ 是 $\vec{n}$ 方向的本征态

$(\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$

我们可以算出 $\langle\alpha|\vec{S}|\alpha\rangle = (\langle\alpha|S_x|\alpha\rangle, \langle\alpha|S_y|\alpha\rangle, \langle\alpha|S_z|\alpha\rangle)$

$$= \vec{n}\,\frac{\hbar}{2}$$



即任意一个 $|\alpha\rangle$ 都有确定的自旋指向.

- 所有成员都处于 $|\alpha\rangle$ 的系综不能描述自旋指向随机的系综

办法是引入占据权重 (probability weight, or, fractional population)

炉子里刚出来的银原子构成系综，其成员 50% 处于 $|+z\rangle$ 50% 处于 $|-z\rangle$； 由于"热"原子不挑方向，也可以是 50% 处于 $|+x\rangle$，50% 处 $|-x\rangle$.

- 这两个实数 w_+，w_- 没有相位，所谓非相干混合 (incoherent mixture)

区别于 coherent superposition (相干叠加)

$\frac{1}{\sqrt{2}}|+z\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-z\rangle$ 自旋指向 x 方向.

也不能把 w_+、w_- 理解为 $|c_+|^2$ 与 $|c_-|^2$，它们是经典的概率

比如一个班 50% 男，50% 女. 任选一个是男的概率是 50%.

但不是说每个人处于 $\frac{1}{\sqrt{2}}|男\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|女\rangle$ 的状态.

- $w_+ = 0.5$，$w_- = 0.5$ 这样的"热"原子系综，称为"完全随机系综" (completely random ensemble)

SG装置选出来的一束，构成"纯系综"，→ pure ensemble.

前者非极化 (unpolarized)，后者 polarized.

通过任意方向设置的SG，分两束一样强； 后者随 B 的方向变.

- 以上两种系综是混合系综（mixed ensemble）的两个极端.

比如：$70\% \; |+,x\rangle + 30\% \; |-,z\rangle$.

§ 系综平均（ensemble average）与密度算符.

1927年 J.Von Neumann 发展

纯系综成员 $|\alpha\rangle$

混合系综成员：$w_1, |\alpha^{(1)}\rangle; \; w_2, |\alpha^{(2)}\rangle, \cdots; w_N |\alpha^{(N)}\rangle$.

$$\sum_{i=1}^{N} w_i = 1 \quad \text{归一化}$$

- $|\alpha^{(i)}\rangle$不要求正交；N 可以大于 D（Hilbert space 的维数）

例如：$0.2 \; |+x\rangle, \; 0.5 \; |+,y\rangle, \; 0.3 \, |-,z\rangle$.

测量 A 的平均值等于多少？

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

$\langle\alpha^{(i)}|A|\alpha^{(i)}\rangle$ 是 $|\alpha^{(i)}\rangle$ 态上的量子平均.

再按 w_i 权重平均：经典.

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

$$= \sum_i w_i \left(\sum_a a \, |C_a^{(i)}|^2\right)$$

更一般地，在任意基矢 $|b\rangle$ 下.

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

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

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

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

因此 $[A] = \sum_{b'b''} \langle b''|\rho|b'\rangle\langle b'|A|b''\rangle$

$$= \sum_{b''} \langle b''|\rho A|b''\rangle$$

☆ $\boxed{[A] = \mathrm{Tr}(\rho A)}$ 与表象无关的强大公式！

性质：① $\mathrm{Tr}\rho = \sum_{ib'} w_i \langle b'|\alpha^{(i)}\rangle\langle\alpha^{(i)}|b'\rangle$

$$= \sum_{ib'} w_i \langle\alpha^{(i)}|b'\rangle\langle b'|\alpha^{(i)}\rangle$$

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

$$= 1$$

② $\rho_{ij} = \rho_{ji}^*$ 厄密.

$\Rightarrow$ 对于 $S=\frac{1}{2}$ 的系统（粒子），ρ 由 3 个实数确定

$\because$ 2×2 的 Hermitian matrix 4 个实数 $\begin{pmatrix} a & c+id \\ c-id & b \end{pmatrix}$

归一化 $\Rightarrow b = 1-a$.

计算 $[\sigma_x] = \mathrm{Tr}(\rho\sigma_x) = \mathrm{Tr}\left[\begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{12}^* & 1-\rho_{11} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\right] = 2\mathrm{Re}(\rho_{12})$

$[\sigma_y] = -2\cdot \mathrm{Im}(\rho_{12})$, $[\sigma_z] = 2\rho_{11} - 1$, or $2\rho_{11} = 1 + [\sigma_z]$

$$\therefore \rho = \begin{pmatrix} \frac{1+[\sigma_z]}{2}, & \frac{[\sigma_x]-i[\sigma_y]}{2} \\ \frac{[\sigma_x]+i[\sigma_y]}{2}, & \frac{1-[\sigma_z]}{2} \end{pmatrix},$$ 由 $[\sigma_x]$, $[\sigma_y]$, $[\sigma_z]$ 决定.

对于一个纯系综，成员都处于 $|\alpha\rangle$

$$|\alpha\rangle = \left[\cos\frac{\theta}{2}\,|+,z\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\,e^{i\varphi}\,|-,z\rangle\right]e^{i\gamma}$$

γ 表示任意固定相位，故为自由.

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

$$[\sigma_z] = \cos^2\frac{\theta}{2} - \sin^2\frac{\theta}{2} = \cos\theta$$

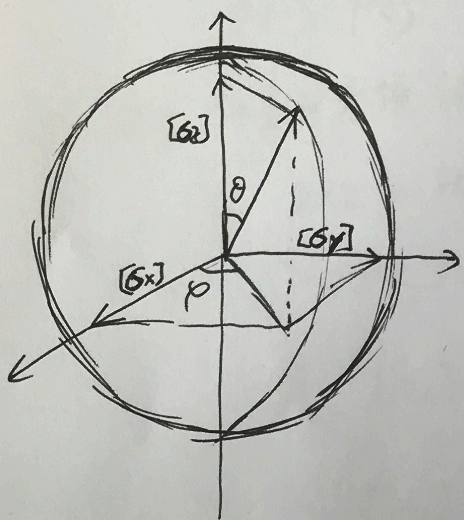
$$[\sigma_x] = \sin\theta\cos\varphi,$$

$$[\sigma_y] = \sin\theta\sin\varphi$$

$$[\sigma_x]^2 + [\sigma_y]^2 + [\sigma_z]^2 = 1$$

ρ 可写成：
$$\rho = \begin{bmatrix} \frac{1+\cos\theta}{2}, & \frac{1}{2}(\sin\theta\cos\varphi - i\sin\theta\sin\varphi) \\ \frac{1}{2}(\sin\theta\cos\varphi + i\sin\theta\sin\varphi), & \frac{1}{2}(1-\cos\theta) \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}(I + \vec{n}\cdot\vec{\sigma}), \quad \vec{n} = ([\sigma_x], [\sigma_y], [\sigma_z]).$$



Bloch球：

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

对于混合系综. $\rho = \frac{1}{2}(I + \vec{n}\cdot\vec{\sigma})$ 仍成立.

但是 $\vec{n} \neq (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$.

例如. $W_+ = 0.5$, $|+z\rangle$; $W_- = 0.5$, $|-z\rangle$.

$$[\sigma_x] = 0.5\langle +z|\sigma_x|+z\rangle + 0.5\langle -z|\sigma_x|-z\rangle$$
$$= 0 = [\sigma_y]$$
$$[\sigma_z] = 0. \Rightarrow \vec{n} = 0 \Rightarrow \rho = \frac{I}{2}，在球心!$$

- 混合系综 $|\vec{n}| < 1$，在球内

纯系综理解为 $W_i=1,\ W_{j\neq i}=0$.

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

因此 $\rho^2=\rho \Rightarrow \rho(\rho-1)=0$.

$\therefore$ ① $Tr\rho^2 = Tr\rho = 1$

② ρ 的本征值为 0 或 1.

证：设 $\rho|\rho'\rangle = \rho'|\rho'\rangle$

$$\rho(\rho-1)|\rho'\rangle = \rho'(\rho'-1)|\rho'\rangle = 0.$$

③ 可以用 ρ 的本征矢为基矢. 对角化 ρ

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

计算密度矩阵：

$$|\alpha^{(k)}\rangle\langle\alpha^{(k)}| = \sum_{b'}\sum_{b''} |b'\rangle\langle b'|\alpha^{(k)}\rangle\langle\alpha^{(k)}|b''\rangle\langle b''|$$

b_i 行，b_j 列 $\langle b_i|\alpha^{(k)}\rangle\langle\alpha^{(k)}|b_j\rangle$

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

$$\rho_{ij} = \sum_k W_k \langle b_i|\alpha^{(k)}\rangle\langle\alpha^{(k)}|b_j\rangle$$

例：① . S_z 正方向极化系综.

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

② . S_x 正方向极化系综.

$$\rho = |+S_x\rangle\langle +,S_x| \overset{S_z}{=} \begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt2}\\ \frac{1}{\sqrt2}\end{pmatrix}\left(\frac{1}{\sqrt2}, \frac{1}{\sqrt2}\right) = \begin{pmatrix}\frac12 & \frac12\\ \frac12 & \frac12\end{pmatrix}$$

③ 非完全极化系综

$W_+ = 0.5,\ |+z\rangle$; $W_- = 0.5,\ |-S_z\rangle$

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

$W_+ = 0.5,\ |+x\rangle$; $W_- = 0.5,\ |-x\rangle$

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

两者相同！

- 一个混合系综可以按不同方式分解成纯系综的混合！

④. 部分极化

$W_1 = 0.75,\ |+S_z\rangle$, $W_2 = 0.25\ |+S_x\rangle$

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

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

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

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