第7讲 (2022 revised)

§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.

$A|a\rangle = a|a\rangle$，a 是本征值，$|a\rangle$ 是 A 的本征矢. $\sum_a |a\rangle\langle a| = 1$

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

测 A 得到 a 的几率为 $|c_a|^2$.

同制备 identically prepared

引入系综的概念 (ensemble)：N 个同样的粒子，~~都处于 $|\alpha\rangle$ 态~~.

(也可是多个粒子构成的系统)

N 是大量的. 构成一个 ensemble.

我们一直在讨论所有粒子处于同一个态 $|\alpha\rangle$ 的情况.

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 $|-z\rangle$.

↳ 所有成员自旋指向一致

• 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. $\boxed{\langle \vec S\rangle = 0}$

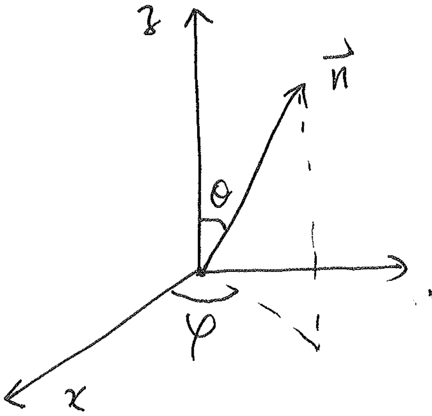
如果它们都处于 $|\alpha\rangle$，哪怕最一般的 $|\alpha\rangle = c_+|+z\rangle + c_-|-z\rangle$

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

定义 $\vec n = \cancel{(\cos\theta\cos\varphi, \cos\theta\sin\varphi, \sin\theta)}$，$|\alpha\rangle$ 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 $\langle\alpha|\vec{S}|\alpha\rangle = (\langle\alpha|S_x|\alpha\rangle, \langle\alpha|S_y|\alpha\rangle, \langle\alpha|S_z|\alpha\rangle)$

$= \vec{n}\frac{\hbar}{2}$ → 指期望值



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（$\vec{S}$ 平均值是零）

要描述这样的系综:
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，(可以看成)其成员 50% 处于 $|+z\rangle$ 50% 处于 $|-z\rangle$；由于"热"原子不排向，也可以(看成)是 50% 处于 $|+x\rangle$，50% 处 $|-x\rangle$. 我们需要从公式上保证这一点！

• 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.

$\frac{1}{\sqrt{2}}|+z\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}i|-z\rangle$ y方向.

也不能把 W_+、W_- 理解为 $|C_+|^2$ 与 $|C_-|^2$，它们是经典几率

比如一个班 50% 男，50% 女. 任选一个是男的几率是 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% $|-,z\rangle$.

部分极化(partially polarized)

§ 系综平均(ensemble average)与密度算符(density Operator)

1927年 J.Von Neumann 发展, 统一描述 mixed 及 pure 系综

纯系综成员 $|\alpha\rangle \leftarrow$ 每一个成员

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

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

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

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? 对一个 mixed ensemble

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

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

再按 w_i 权重平均: 经典平均

$$[A] = \sum_i w_i \sum_a \langle\alpha^{(i)}|A|a\rangle\langle a|\alpha^{(i)}\rangle$$ 系综里发现 $|\alpha^{(i)}\rangle$ 的几率.

$$= \sum_i w_i \Big(\sum_a a\, |c_a^{(i)}|^2\Big)$$ 量子力学几率: $|\alpha^{(i)}\rangle$ 处于 $|a\rangle$ 的几率

更一般地, 在任意基矢 $|b\rangle$ 下.

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

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

i 从 1 到 N, b' 与 b'' 从 1 到 D

密度算符：定义 $\rho \equiv \sum_i w_i |\alpha^{(i)}\rangle\langle\alpha^{(i)}|$，（与A无关） density operator

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

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！（可随你方便使用任意表象，甚矣）

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 $\Rightarrow$ $b=1-a$. $(\mathrm{Tr}\rho=1)$ $\Rightarrow$ 3个实数决定 ρ.

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

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

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

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

对于一个纯系综，成员都处于 $|\alpha\rangle$，（写成归一化态）

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

γ 表示任意固定相位，规范自由.

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

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

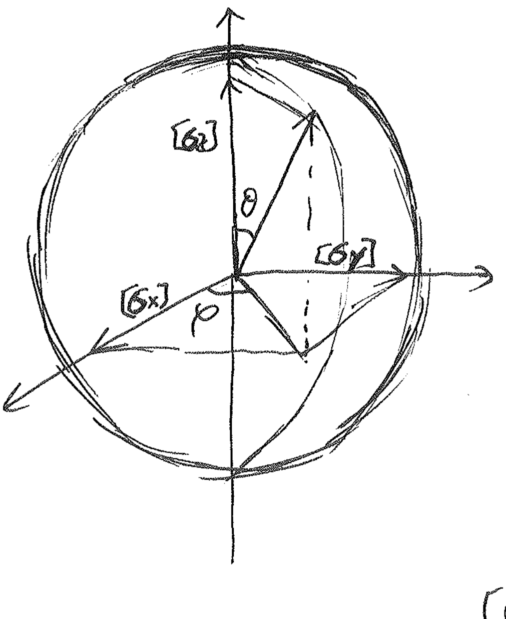
$$[\sigma_x] = \sin\theta\cos\varphi,$$

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

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

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

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



Bloch 球：半径为 1，$\vec{n}$ 在球面上

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

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

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

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

$$[\sigma_x] = 0.5\langle +z|\sigma_x|+z\rangle + 0.5\langle -z|\sigma_x|-z\rangle$$
$$= 0 = [\sigma_y] = \mathrm{Tr}(\rho\,\sigma_x)$$

$[\sigma_z] = 0. \Rightarrow \vec{n} = 0 \Rightarrow \rho = \frac{I}{2}$，在球心！

- 混合系综 $|\vec{n}| < 1$，在球内

纯系综的理解为 $W_i=1$，$W_{j\neq i}=0$.（j指任意可能的态矢）.

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

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

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

计算密度矩阵：（在某组论定基矢$\{|b'\rangle\}$下）.

$$|\alpha^{(k)}\rangle\langle\alpha^{(k)}|=\sum_{b'}\sum_{b''}|b'\rangle\underbrace{\langle b'|\alpha^{(k)}\rangle}_{\text{列矢}}\underbrace{\langle\alpha^{(k)}|b''\rangle}_{\text{行矢}}\langle b''|$$

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

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

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

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

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

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

炉子里面出来的系综.

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

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

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！
- $\mathrm{Tr}(\rho\sigma_x) = \mathrm{Tr}(\rho\sigma_y) = \mathrm{Tr}(\rho\sigma_z) = 0$. 对比前面的计算.

④. 部分极化

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

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

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

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

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

也可以用 $\mathrm{Tr}(\rho A)$ 计算.