Kvantová statistika – smíšené stavy, matice hustoty

Motivace: měření veličiny $\hat{A}$ ve stavu $|\psi\rangle$

$\rightarrow$ naleznéme a_1 ... s pravd. $|\langle a_1|\psi\rangle|^2$ stav po měření $|a_1\rangle$ s pravd. p_1

a_2 ... $p_2 = |\langle a_2|\psi\rangle|^2$ — " — $|a_2\rangle$ — " — p_2

$\vdots$

Popis dalšího vývoje / měření v systému?

statistický soubor $\{|\psi_i\rangle, p_i\}_{i=1}^{N}$ .. předp. $|\psi_i\rangle$ normované a $\sum p_i = 1$ (ne nutně ortogonální)

Další měření např. veličiny $\hat{B}$

$\rightarrow$ nalezení b_1 s pravd. $\sum_i p_i |\langle b_1|\psi_i\rangle|^2 = p_{b_1}$ ... součet podmíněných pravděpodobností

a například $\langle \hat{B}\rangle = \sum_i p_i \langle\psi_i|\hat{B}|\psi_i\rangle \equiv \sum_b \langle b|\hat{B}\sum_i|\psi_i\rangle p_i\langle\psi_i|b\rangle$

Při dalším měření se změní statistický soubor a může se měnit i počet jeho prvků.

Elegantní popis $\rightarrow$ **Matice hustoty** (statistický operátor)

$$\hat{\rho} \equiv \sum_{i=1}^{N} p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$$

Ballentine .. prostě stav ρ

výhoda: bez ohledu na N vždy operátor v $\mathcal{H}$ (matice $\dim\mathcal{H}\times\dim\mathcal{H}$)

! každé měření lze popsat pomocí $\hat{\rho}$

dva statistické soubory popsané stejným $\hat{\rho}$ jsou nerozlišitelné žádným měřením

Měření:

- ~~...~~ normování ρ: $\mathrm{Tr}\,\rho = 1$ (odpovídá $\sum_n p_n = 1$)

Dk: $\mathrm{Tr}\,\rho \equiv \sum_{|n\rangle}\sum_i p_i \langle n|\psi_i\rangle\langle\psi_i|n\rangle = \sum_i p_i\langle\psi_i|\psi_i\rangle = \sum p_i = 1$

Vsuvka: STOPA OPERÁTORU vůči $\{|n\rangle\}$ je ON báze v $\mathcal{H}$.

Pak $\mathrm{Tr}\,\rho \equiv \sum_n \langle n|\rho|n\rangle$ (ve funkcionální analýze důležitá třída operátorů $\mathrm{Tr}\,\rho < \infty$)

– stopa nezávisí na bázi

$$\mathrm{Tr}_{\tilde{n}}\,\rho \equiv \sum_{\tilde{n}} \langle\tilde{n}|\underset{I}{|}\rho\underset{I}{|}\tilde{n}\rangle = \sum_{n'n''\tilde{n}} \langle\tilde{n}|n'\rangle\langle n'|\rho|n''\rangle\langle n''|\tilde{n}\rangle = \sum_{n'n''}\delta_{n'n''}\langle n'|\rho|n''\rangle$$

c.b.d.

matice přechodu unit $\rightarrow \delta_{n'n''}$

– cyklická vlastnost stopy: (A, B operátory)

$$\mathrm{Tr}\{AB\} = \sum_{mn}\langle n|A|m\rangle\langle m|B|n\rangle = \sum_{mn}\langle m|B|n\rangle\langle n|A|m\rangle = \mathrm{Tr}\{BA\}$$

---

poznámka: někdy se pracuje s nenormovanou $\hat{\rho}$ ... to lépe vystihuje jeden výběr s celkovou pravděpodobností $p = \mathrm{Tr}\,\hat{\rho}$ }

Měření:

- střední hodnota operátoru $\hat{A}$: $\langle A\rangle = \mathrm{Tr}\{\rho A\}$

$$\langle A\rangle = \sum_i p_i \langle\psi_i|A|\psi_i\rangle = \sum_{i,n} p_i \langle\psi_i|n\rangle\langle n|A|\psi_i\rangle = \sum_n \langle n|A\underbrace{\left(\sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| p_i\right)}_{\rho}|n\rangle$$

- pravděpodobnost nalezení systému ve stavu $|\phi\rangle$

$$p_\phi = \langle\phi|\rho|\phi\rangle = \mathrm{Tr}\{\rho\,|\phi\rangle\langle\phi|\} = \mathrm{Tr}\{\rho P_\phi\} = \mathrm{Tr}\{P_\phi \rho P_\phi\}$$

- platí i pro pravd. nalezení jednoho ze stavů $|\phi_i\rangle$ mezi nimiž nejsme schopni rozlišit $P = \sum_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|$ (ϕ_i ON-množina)
  – stav po měření $\tilde{\rho} = \dfrac{P\rho P}{\mathrm{Tr}\{P\rho P\}}$ ← normování
- stav po měření odp. operátoru $\hat{A} = \sum_a a \hat{P}_a$ tedy je

$$\tilde{\rho} = \sum_a \frac{\hat{P}_a \hat{\rho} \hat{P}_a}{\mathrm{Tr}\{P_a \rho P_a\}}\, p_a = \sum_a \hat{P}_a \rho \hat{P}_a$$

pozn: pokud není $\hat{\rho}$ normovaná je třeba ve vzorcích pro pravděpodobnost nahradit $\hat{\rho} \to \dfrac{\hat{\rho}}{\mathrm{Tr}\,\hat{\rho}}$; nebo chápat výsledek jako podmíněnou pravděpodobnost.

Vlastnosti $\hat{\rho}$:

- evidentně $\hat{\rho}^+ = \hat{\rho}$ ($p_i \in \mathbb{R}$) Hermitovskost
- $\langle u|\hat{\rho}|u\rangle \geq 0 \quad \forall |u\rangle$ ($p_i \geq 0$) Pozitivní definitnost
- spektrum: $\Rightarrow$ + vl. č. $\in \langle 0,1\rangle$ a vl. v. jsou ON množina (nebo lze tak volit)
  pozn: připomínám, že původně mohlo být $\langle\psi_i|\psi_j\rangle \neq 0$
- platí $\mathrm{Tr}\,\rho^2 \in \langle 0,1\rangle$ (pro normovanou $\mathrm{Tr}\,\rho = 1$)
  přičemž $\mathrm{Tr}\,\rho^2 = 1 \Leftrightarrow \rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ ... čistý stav, polarizovaný
  (koherentní směs $|\psi\rangle = |\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle$)
  $\mathrm{Tr}\,\rho^2 < 1$ ... nekoherentní, smíšený stav

Časový vývoj:

ve Schrödingerově reprezentaci:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = H|\psi\rangle \quad \to \quad -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi| = \langle\psi|H$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\rho = [H,\rho]}$$

... pozor ... obrácené znaménko než pro operátory v Heisenberg. obrázku

Dk: $\sum_n \left(i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial t}|\psi_i\rangle\right] p_i \langle\psi_i| + |\psi_i\rangle p_i \frac{\partial}{\partial t}\langle\psi_i|\, i\hbar\right) = H\rho - \rho H$

tj. čas. nezáv. H: $\rho(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\rho\, e^{\frac{i}{\hbar}Ht}$

pozn: V Heisenbergově obraze $\rho_H = \text{konst.}$ ← tj. $\rho_H = e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\rho_S e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$

V Diracově / interakční reprezentaci: $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho_I = [V_I, \rho_I]$

$\Rightarrow$ poruch. teorie pro ρ_I ... otevř. systémy

PŘÍKLAD: systém .. spin $\frac{1}{2}$

čisté stavy: S_z+ .. $\rho = |+\rangle\langle+| = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}$ $\quad S_z-$: $\rho = |-\rangle\langle-| = \begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$

$S_x\pm$ .. $\rho = \frac{1}{2}(|+\rangle \pm |-\rangle)(\langle+| \pm \langle-|) = \begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \pm\frac{1}{2}\\ \pm\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix}$

smíšené stavy: $\{|+\rangle, p_+ = \frac{1}{2}, |-\rangle, p_- = \frac{1}{2}\} = \begin{pmatrix}\frac{1}{2} & 0\\ 0 & \frac{1}{2}\end{pmatrix}$ ...! pro S_z i pro S_x !

→ experimentálně nerozlišitelné

Terminologická poznámka:

diagonální elementy $\rho_{nn} \equiv \langle n|\rho|n\rangle \equiv Tr(\rho|n\rangle\langle n|)$ ... populace $|n\rangle$ (obsazení hladiny)

nediagonální elementy ρ_{mn} .. koherence

→ skrývají fáze v čistém stavu:

= interferenční členy

$$|\psi\rangle = \alpha|m\rangle + \beta|n\rangle \to \hat{\rho} = \begin{array}{c|cc} & m & n \\ \hline m & |\alpha|^2 & \beta\alpha^* \\ n & \beta^*\alpha & |\beta|^2 \end{array}$$

z pozit. definit. $\hat{\rho}$ lze ukázat $|\rho_{mn}|^2 \le \rho_{mm}\rho_{nn}$ tj. koherence jen mezi obsazenými

Statistická fyzika

def Entropie stavu: $\sigma = -Tr\{\rho \ln \rho\}$ ... fyzikální $S = k_B \sigma$

platí: $\sigma \ge 0$ přitom $\sigma = 0$ pro čistý stav ... jen vl. č. $p_i = 0, 1$

$\ln N = \sigma$ maximální pro zcela nepolar. stav $p_i = \frac{1}{N}$ ← dimenze $\mathcal{H}$

≡ minimální informace o systému

statist. fyzika max σ, tj. $\delta\sigma = 0$ na nějaké fyz. podmínky

např: "kanonický soubor" + dodat. podm. $\langle H \rangle = konst = U$

$= tr\{\rho H\}$

řešení: Boltzmanovské rozdělení: $\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta H}$

Z je dáno normováním $Z = Tr\, e^{-\beta H}$ .. partiční funkce

β ... vyjde jako Lagrange-multiplikátor .. fyzikálně $\beta = \frac{1}{kT}$

Wignerova reprezentace – QM ve fáz. prostoru

• Hustota pravděpodobnosti nalezení částice v místě x:

$\rho(x) \equiv Tr\{\hat{\rho}|x\rangle\langle x|\} = \langle x|\hat{\rho}|x\rangle$ (proto matice hustoty)

$= \rho(x,x)$ .. diagonála x-reprez.

V klasické mechanice .. fázový prostor ... statistická fyzika

..statistický soubor s distrib. fcí $\rho(x,p)$ ... $\rho(x) = \int \rho(x,p)\,dp$

$\rho(p) = \int \rho(x,p)\,dx$

• Hustota pravd. v p:

$\rho(p) = Tr\{\hat{\rho}|p\rangle\langle p|\} = \langle p|\hat{\rho}|p\rangle$

→ $\hat{\rho}(p,x)$? $\{x,p\}$?

Def: Wignerova reprezentace matice hustoty

$$\rho_w(x,p) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \langle x - \tfrac{1}{2}x' | \hat\rho | x + \tfrac{1}{2}x' \rangle e^{\frac{i}{\hbar}px'}\,dx'$$ (+ zobecnění do 3D zjevné)

$$= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \langle p - \tfrac{1}{2}p' | \hat\rho | p + \tfrac{1}{2}p' \rangle e^{-\frac{i}{\hbar}xp'}\,dp'$$

vlastnosti:
- jako v klas. mech.: $\rho(x) = \int \rho(x,p)\,dp$, $\quad p(p) = \int \rho(x,p)\,dx$
- $\mathrm{Tr}\,\hat\rho = \iint \rho_w(x,p)\,dx\,dp$

+ lze def Wigner. reprezentaci měřitelných veličin

$$A_w(x,p) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \langle x - \tfrac{1}{2}x' | \hat A | x + \tfrac{1}{2}x' \rangle e^{-\frac{i}{\hbar}px'}\,dx'$$

Příklad: potenciální energie $V(x)\delta(x-x') \longrightarrow V_w(x,p) = V(x)$

kinetická energie $\frac{p^2}{2m}\delta(p-p') \longrightarrow K_w = \frac{p^2}{2m}$

- platí $\langle A\rangle \equiv \mathrm{Tr}\{\rho A\} = \iint \rho_w(x,p)\,A_w(x,p)\,dx\,dp$ jako klas. mech.

pozor: $\rho(x,p)$ není pravd. rozdělení, protože MŮŽE BÝT ZÁPORNÉ!

navíc není možné vytvořit úzký peak

Dá se totiž dokázat (Ballentine): $\iint \rho_w(x,p)^2\,dx\,dp \leq \frac{1}{2\pi\hbar}$

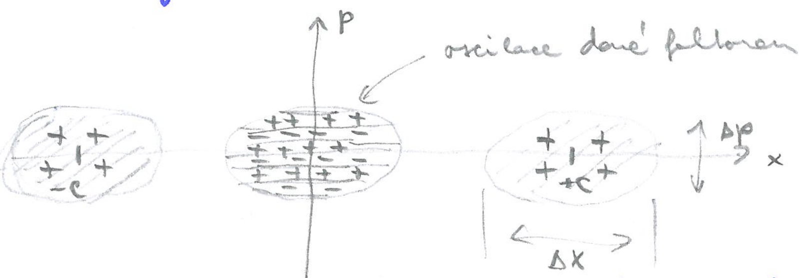
tj. ρ se $\mathrm{supp}(\rho)$ na ~~objemu~~ oblasti A .. normování $\to \rho = \frac{1}{A}$ $\quad \Rightarrow A \geq 2\pi\hbar$

PŘ: $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi a^2}}\, e^{-x^2/4a^2}$ .. Gauss balík šířky $\Delta x = a$; $\Delta p = \frac{\hbar}{2a}$

$$\longrightarrow \rho_w(x,p) = \frac{1}{\pi\hbar}\, e^{-x^2/2\Delta x^2}\, e^{-p^2/2\Delta p^2}$$

pro $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi a^2}}\, e^{-(x-x_0)^2/4a^2}\, e^{ip_0x/\hbar} \longrightarrow \rho_w = \frac{1}{\pi\hbar}\, e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\Delta x^2}}\, e^{-\frac{(p-p_0)^2}{2\Delta p^2}}$

Interference: 2 balíky centrované v $x = \pm c$



oscilace dané faktorem $\cos\frac{2cp}{\hbar}$ amplituda konst

... rozmyzí v lim $\hbar \to 0$ (ale rychleji osciluje)

Řešení ... Husimiho Distribuce ... průměrování přes min peak (Gauss)

$\rho_H(x,p) = \langle xp | \hat\rho | xp \rangle \geq 0$ ale neplatí $\rho(x) = \int \rho(x,p)\,dp$

Čas. vývoj (pro Wignera): dá se dk:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_w(x,p,t) = -\frac{p}{m}\frac{\partial}{\partial x}\rho_w(x,p,t) + \frac{dV}{dx}\frac{\partial}{\partial p}\rho_w(x,p,t) + O(\hbar^2)$$

... klasická Liouville rovnice

Matice hustoty pro složený a redukovaný systém

(otevřené systémy)

složený systém $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ ... baze $|m_1\rangle|m_2\rangle$

stopa operátoru $\mathrm{Tr}\,\hat\rho \equiv \sum_{m_1 m_2} \langle m_1|\langle m_2|\,\hat\rho\,|m_1\rangle|m_2\rangle \equiv \sum_{m_1 m_2} \hat\rho_{m_1 m_2, m_1 m_2}$

uvažujme operátor na $\mathcal{H}_1$: $\hat A_1 \equiv \hat A_1 \otimes \hat I$.

potom
$$\langle A_1\rangle = \mathrm{Tr}\,\hat A_1 \hat\rho = \sum_{\substack{m_1 m_2\\ m_1' m_2'}} \langle m_1|\hat A_1|m_1'\rangle \underbrace{\langle m_2|m_2'\rangle}_{\delta_{m_2 m_2'}} \langle m_1'|\langle m_2'|\,\hat\rho\,|m_1\rangle|m_2\rangle$$
$$= \sum_{m_1 m_1'} \langle m_1|A_1|m_1'\rangle\, \rho^{(1)}_{m_1' m_1} \equiv \mathrm{Tr}_1\, \hat A_1 \hat\rho^{(1)} \quad \text{... částečná stopa}$$

kde
$$\rho^{(1)}_{m_1' m_1} \equiv \sum_{m_2} \langle m_1'|\langle m_2|\,\hat\rho\,|m_1\rangle|m_2\rangle \equiv \cancel{\mathrm{Tr}_2} \langle m_1'|\,\mathrm{Tr}_2\,\hat\rho\,|m_1\rangle$$
= redukovaná matice hustoty

poznámky:

nejde udělat se stavy - redukce $|\psi\rangle_{12} \to |\psi^{(1)}\rangle$

- všechna měření operátory působícími na $\mathcal{H}_1$ lze předpovědět jen pomocí $\hat\rho^{(1)}$. Tj informace schovaná venku není důležitá pro popis systému 1
- $\hat\rho^{(1)}$ splňuje vl. vlast. matice hustoty, tj $\rho^+ = \rho$; $\langle n|\rho|n\rangle \geq 0$; $\mathrm{Tr}\,\rho = 1$
- speciální případ ... nezávislé systémy $\hat\rho = \hat\rho_1 \otimes \hat\rho_2$

  pak $\hat\rho^{(1)} \equiv \mathrm{Tr}_2\,\hat\rho = \hat\rho_1$ a $\hat\rho^{(2)} = \mathrm{Tr}_1\,\hat\rho = \hat\rho_2$
- $\hat\rho^{(1)}$ může být smíšený stav i v případě, že $\hat\rho$ je čistý

  $\to$ model měření ... přednáška Pavla Krtouše o interpretacích
- je možné napsat časový vývoj $\hat\rho^{(1)}$, ale pro netriviální interakci je potřeba použít aproximace .. Mistrovské rovnice

  = vliv prostředí, dekoherence, disipace, relaxace

PŘ: tlumený kvantový LHO
$$\underbrace{\frac{\partial\hat\rho^{(1)}}{\partial t} = -i\hbar\,[\omega a^+ a, \hat\rho^{(1)}]}_{\text{izolovaný LHO}} + \frac{\gamma}{2}\left([a\hat\rho^{(1)}, a^+] + [a, \hat\rho^{(1)} a^+]\right)$$

γ … malá konst. popisující vliv prostředí

řešený příklad: $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{spin} \otimes \mathcal{H}_{poloha}$

model měření spinu

$$|\pm\rangle|x\rangle \xrightarrow{\text{Evoluce}} \begin{cases} |+\rangle|A\rangle = U(|+\rangle|x\rangle) \\ |-\rangle|B\rangle = U(|-\rangle|x\rangle) \end{cases}$$

$t_0 \qquad\qquad t$ .. Stern-Gerlach

Evoluce neovlivňuje spin, ale koreluje jej s polohou

① t_0 - čistý stav $\longrightarrow$ čistý stav

$|\psi_0\rangle = |+\rangle|x\rangle$ ... $\rho = |+x\rangle\langle +x|$, $\rho_s = |+\rangle\langle +|$

$\langle S_z\rangle = \frac{\hbar}{2}$, $\langle S_x\rangle = 0$

$p_+ = 1$, $p_{+x} = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)\cdot|+\rangle\right|^2 = \frac{1}{2}$

$|\psi\rangle = |+\rangle|A\rangle$, $\rho = |+A\rangle\langle +A|$, $\rho_s = |+\rangle\langle +|$

$\langle S_z\rangle = \frac{\hbar}{2}$, $\langle S_x\rangle = 0$

② nepolarizovaný stav $\longrightarrow$ nepolariz. stav

stat. soubor: $|+x\rangle \dots \frac{1}{2}$; $|-x\rangle \dots \frac{1}{2}$ $\longrightarrow$ $|+A\rangle \dots \frac{1}{2}$, $|-B\rangle \dots \frac{1}{2}$

$\to \rho = \frac{1}{2}(|+x\rangle\langle +x| + |-x\rangle\langle -x|)$, $\rho_s = \frac{1}{2}\hat{I}$

$\rho = \frac{1}{2}(|+A\rangle\langle +A| + |-B\rangle\langle -B|)$

$\rho_s = \frac{1}{2}\hat{I}$ .. měření jako t_0

$\langle S_z\rangle = 0$, $\langle S_x\rangle = 0$

$p_+ = \frac{1}{2}$, $p_{+x} = \frac{1}{2}$

③ čistý stav $\longrightarrow$ čistý stav

$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+x\rangle + |-x\rangle)$ ... vl. st. S_x .. $+\frac{\hbar}{2}$

$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+A\rangle + |-B\rangle)$

$\to \rho = \frac{1}{2}(|+x\rangle\langle +x| + |-x\rangle\langle -x| + |+x\rangle\langle -x| + |-x\rangle\langle +x|)$

$\rho_s = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$

$\langle S_z\rangle = 0$, $\langle S_x\rangle = \frac{\hbar}{2}$

$p_+ = \frac{1}{2}$, $p_{+x} = 1$

$\rho = \frac{1}{2}(|+A\rangle\langle +A| + |-B\rangle\langle -B| + |+A\rangle\langle -B| + |-B\rangle\langle +A|)$

$\rho_s = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} I$ ... redukce jako po měření S_z!

$\langle S_z\rangle = 0$, $\langle S_x\rangle = 0$

$p_+ = \frac{1}{2}$, $p_{+x} = \frac{1}{2}$

④ nepolarizovaný stav $\longrightarrow$ nepolar. stav

$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+x\rangle + |-x\rangle)$; $\frac{1}{\sqrt{2}}(|+x\rangle - |-x\rangle)$

$p = \frac{1}{2}$, $p = \frac{1}{2}$

$\frac{1}{\sqrt{2}}(|+A\rangle + |-B\rangle)$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(|+A\rangle - |-B\rangle)$

$p = \frac{1}{2}$, $p = \frac{1}{2}$

$\rho = \frac{1}{2}(|+x\rangle\langle +x| + |-x\rangle\langle -x|)$ .. $\rho_s = \frac{1}{2}\hat{I}$

$\langle S_z\rangle = \langle S_x\rangle = 0$

$p_+ = p_{+x} = \frac{1}{2}$

$\rho = \frac{1}{2}(|+A\rangle\langle +A| + |-B\rangle\langle -B|)$

$\rho_s = \frac{1}{2}\hat{I}$

$\langle S_z\rangle = \langle S_x\rangle = 0$

$p_+ = p_{+x} = \frac{1}{2}$

... udělat na cvičení

PŘ 2: nechť $H = H_1 + H_2$ kde H_1 působí na $\mathcal{H}_1$ a H_2 na $\mathcal{H}_2$ .. $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$

napište evoluční rovnici pro redukovanou matici hustoty ← separované systémy

$\mathrm{Tr}_2\left(i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [H, \rho]\right)$ → nezávislá dynamika

$\hookrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\rho^{(1)} = \mathrm{Tr}_2(H_1\rho - \rho H_1) + \underbrace{\mathrm{Tr}_2(H_2\rho - \rho H_2)}_{0}$ ← DK: rozpis do bází

$[H_1, \rho^{(1)}] = H_1\rho^{(1)} - \rho^{(1)}H_1$