17-1

2023年12月28日 21:47

CH 17. 密度矩阵简介

§17.1 密度矩阵

(本节内容来自曾谨言，卷II，§1.2)

recall (1) 一个量子态的全部信息都储存在 Hilbert 空间的一个态矢 $|\psi(t)\rangle$ 中
假设 $|\psi(t)\rangle$ 已做归一化

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 1.$$

在任一时刻某力学量 $\hat{\Omega}$ 的期望值为 $\underbrace{\langle\hat{\Omega}\rangle}_{\text{数字.}} = \langle\psi(t)|\hat{\Omega}|\psi(t)\rangle$

若给定正交归一基 $\{|n\rangle \mid n=1,2\dots\}$，则有

$$\langle\hat{\Omega}\rangle = \sum_{nn'} \underbrace{\langle\psi(t)|n\rangle}_{\text{行向量}} \underbrace{\langle n|\hat{\Omega}|n'\rangle}_{\text{矩阵}} \underbrace{\langle n'|\psi(t)\rangle}_{\text{列向量}}$$

(2) 对于直积空间 $V_a \otimes V_b$，其态矢 $|\psi_{ab}(t)\rangle$ 可以用 V_a 和 V_b 的基的直积 $\{|\psi_{a,i}\rangle|\psi_{b,j}\rangle \mid i,j=1,2\dots\}$ 展开.

def 密度矩阵 $\hat{\rho} = \underbrace{|\psi(t)\rangle}_{\sim\text{列向量}}\underbrace{\langle\psi(t)|}_{\sim\text{行向量}}$ 所以 $\hat{\rho}$ 可以看成一个矩阵

若给定正交归一基 $\{|n\rangle \mid n=1,2\dots\}$，则 $\hat{\rho}$ 的矩阵元为

$$\rho_{nn'} \equiv \langle n|\hat{\rho}|n'\rangle$$
$$= \langle n|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|n'\rangle$$

可见对单一量子态，ρ 含有与 $|\psi(t)\rangle$ 相同的信息

Ex 17.1 证明：$\rho^+ = \rho$

$\rho^2 = \rho$

$\langle\hat{\Omega}\rangle = Tr[\hat{\rho}\hat{\Omega}]$

$Tr\,\hat{\rho} = 1$

解：前两个显然成立，下面只证后两个

$$\langle\hat{\Omega}\rangle=\langle\psi(t)|\hat{\Omega}|\psi(t)\rangle$$

$$\begin{aligned}Tr[\hat{\rho}\hat{\Omega}]&=\sum_{nn'}\rho_{nn'}\Omega_{n'n}\\&=\sum_{nn'}\langle n|\hat{\rho}|n'\rangle\langle n'|\hat{\Omega}|n\rangle\\&=\sum_{nn'}\underbrace{\langle n|\psi(t)\rangle}\underbrace{\langle\psi(t)|n'\rangle}\underbrace{\langle n'|\hat{\Omega}|n\rangle}\end{aligned}$$

均为数字，可交换位置

$$\begin{aligned}&=\sum_{nn'}\langle\psi(t)|n'\rangle\langle n'|\hat{\Omega}|n\rangle\langle n|\psi(t)\rangle\\&=\langle\psi(t)|\hat{\Omega}|\psi(t)\rangle\\&=\langle\hat{\Omega}\rangle\end{aligned}$$

$$Tr[\rho]=\langle\hat{I}\rangle=\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle=1 \qquad //$$

若取某算符 $\hat{\Lambda}$ 的本征态 $\{|n\rangle | n=1,2\dots\}$ 为基，则对角元

$$\begin{aligned}\rho_{nn}&=\langle n|\hat{\rho}|n\rangle=\langle n|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|n\rangle\\&=|\langle n|\psi(t)\rangle|^2\end{aligned}$$

为测量 $\hat{\Lambda}$ 得到 n 的概率

特别地，若取 $|x\rangle$ 为基，则对角元

$$\rho_{xx}=\langle x|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|x\rangle=|\psi(x,t)|^2$$

即为在 x 点找到粒子的概率

思考：$\hat{\rho}$ 的非对角元包含什么信息？

Ex 17.2 证明：$\frac{d}{dt}\hat{\rho}(t)=\frac{1}{i\hbar}[\hat{H},\hat{\rho}(t)]$

17-3

2023年12月28日 22:39

- 密度矩阵的一个优势是可以更方便的处理开放系统（见 Ex 17.2）

Ex 17.3 考虑直积空间 $V_a \otimes V_b$，某粒子在该直积空间中的态为 $|\psi\rangle$
用密度矩阵表示 V_a 空间中算符 $\hat{\Omega}_a$ 的平均值 $\langle\hat{\Omega}_a\rangle$

解：$\langle\hat{\Omega}_a\rangle = \langle\psi(t)|\hat{\Omega}_a|\psi(t)\rangle$ 无法继续化简

若用密度矩阵
取任一 V_a 上的基 $\{|n\rangle_a \mid n=1,2\ldots\}$
〃 〃 〃 V_b …… $\{|n\rangle_b \mid n=1,2\ldots\}$
则 $V_a\otimes V_b$ 上的基为 $\{|n\rangle_a|n'\rangle_b \mid n,n'=1,2\ldots\}$

$$\Rightarrow Tr[\hat{\rho}\hat{\Omega}_a] = \sum_{nn'} {}_a\langle n|_b\langle n'|\hat{\rho}\hat{\Omega}_a|n\rangle_a|n'\rangle_b$$

因为 $\hat{\Omega}_a$ 不作用在 V_b 空间

$$= \sum_{nn'} {}_a\langle n|\left({}_b\langle n'|\hat{\rho}|n'\rangle_b\right)\hat{\Omega}_a|n\rangle_a$$

def 约化密度矩阵

$$\hat{\rho}_a \equiv \sum_{n'} {}_b\langle n'|\hat{\rho}|n'\rangle_b$$

$$\equiv Tr_b[\hat{\rho}]$$

$$\Rightarrow Tr[\hat{\rho}\hat{\Omega}_a] = \sum_n {}_a\langle n|\hat{\rho}_a\hat{\Omega}_a|n\rangle_a \equiv Tr_a[\hat{\rho}_a\hat{\Omega}_a] \quad //$$

表示只考虑 V_a 空间

可见若只考虑直积空间中的某几个因子空间，可以将 $\hat{\rho}$ 对不需要考虑的空间求迹，得到约化密度矩阵，这个操作常称为 trace out

利用约化密度矩阵，可以完全忘记不重要的因子空间.

17-4

2023年12月28日 22:54

def 纯态(pure state)单一量子态，可用态矢 $|\psi\rangle$ 表示

Ex. 17.4 在实际的实验中很难制备出大量具有相同纯态的粒子，
例如有 N 个 电子，其中概率 pN 个处于 $|\hat{e}_z, \frac{1}{2}\rangle$ 的态，
其他 $(1-p)N$ 个处于 $|\hat{e}_z, -\frac{1}{2}\rangle$ 的态，
求对这些电子测量 $\hat{S}_z$ 的期望值 $\langle \hat{S}_z \rangle$

解：$\langle \hat{S}_z \rangle = \frac{1}{N}\left\{ pN * \frac{1}{2} + (1-p)N * (-\frac{1}{2}) \right\}$

$$= \frac{1}{2}(2p-1)$$

//

def 类似 Ex 17.4 中大量粒子构成的量子系综，称为混态.(mixed state)

def 混态的密度矩阵
设 $|n\rangle$ 为某力学量 $\hat{A}$ 的正交归一本征态，$\sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{I}$
设 t 时刻系综中处于 $|n\rangle$ 态的粒子比例为 p_n，
则混态的密度矩阵可定义为

$$\hat{\rho} = \sum_n p_n |n\rangle\langle n|$$

Ex 17.5 混态 $\hat{\rho}$ 有许多与纯态 $\hat{\rho}$ 相同的性质.
证明：对于混态 $\hat{\rho}$，有

$$\hat{\rho}^+ = \hat{\rho}$$

$$\mathrm{Tr}[\hat{\rho}] = 1$$

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{H}, \hat{\rho}]$$

17-5

2023年12月28日 23:13

Ex 17.6 对 Ex 17.4 中的例子，证明

$$\langle \hat{S}_z \rangle = Tr[\hat{\rho}\hat{S}_z]$$

证明：混态 $\hat{\rho} = p|\hat{e}_z,\frac{1}{2}\rangle\langle\hat{e}_z,\frac{1}{2}| + (1-p)|\hat{e}_z,-\frac{1}{2}\rangle\langle\hat{e}_z,-\frac{1}{2}|$

$$\Rightarrow Tr[\hat{\rho}\hat{S}_z] = \sum_{i=\pm\frac{1}{2}} \langle\hat{e}_z,i|\hat{\rho}\hat{S}_z|\hat{e}_z,i\rangle$$

$$= p\frac{1}{2} + (1-p)(-\frac{1}{2})$$

$$= \frac{1}{2}(2p-1)$$

//

Ex 17.7 对一般混态，证明力学量 $\hat{\Omega}$ 的本征值为 $Tr[\hat{\rho}\hat{\Omega}]$
其中 $\hat{\rho}$ 为混态的密度矩阵

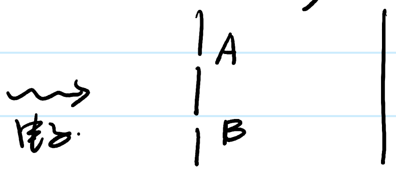
思考：$|\hat{e}_x,\frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\hat{e}_z,\frac{1}{2}\rangle + |\hat{e}_z,-\frac{1}{2}\rangle)$
是纯态还是混态.

17-6

2023年12月28日 23:19

§17.2 测量的再认识

考虑电子双缝干涉



电子从缝A过时，态为 $|S_1\rangle$

从 〃 B …… $|S_2\rangle$

若在A, B处加探测器，比如从A过时，激发一个光子处于态 $|E_1\rangle$

〃 B ------ $|E_2\rangle$

则此时整个体系的量子态为

$$|\psi\rangle = \alpha|S_1\rangle|E_1\rangle + \beta|S_2\rangle|E_2\rangle \qquad |\alpha|^2+|\beta|^2=1$$

对应的密度矩阵为 $\hat{\rho}_{SE} = |\psi\rangle\langle\psi|$

Hilbert空间为电子和光子的直积空间

Ex 17.8 若只测量电子，计算其约化密度矩阵

解: $\hat{\rho}_S = Tr_E\, \hat{\rho}_{SE}$

$$= \langle E_1|\hat{\rho}_{SE}|E_1\rangle + \langle E_2|\hat{\rho}_{SE}|E_2\rangle$$

$$\langle E_1|\rho_{SE}|E_1\rangle = \langle E_1|\psi\rangle\langle\psi|E_1\rangle$$

$$= [\alpha|S_1\rangle + \beta|S_2\rangle\langle E_1|E_2\rangle]$$

$$* [\alpha^*\langle S_1| + \beta^*\langle S_2|\langle E_2|E_1\rangle]$$

$$= |\alpha|^2|S_1\rangle\langle S_1| + |\beta|^2|S_2\rangle\langle S_2|\,|\langle E_1|E_2\rangle|^2$$

$$+ \alpha\beta^*|S_1\rangle\langle S_2|\langle E_2|E_1\rangle$$

$$+ \alpha^*\beta|S_2\rangle\langle S_1|\langle E_1|E_2\rangle$$

$$\langle E_2|\hat{P}_{SE}|E_2\rangle = \langle E_2|\psi\rangle\langle\psi|E_2\rangle$$
$$= (\alpha\langle E_2|E_1\rangle|S_1\rangle + \beta|S_2\rangle)$$
$$*(\alpha^*\langle E_1|E_2\rangle\langle S_1| + \beta^*\langle S_2|)$$
$$= |\alpha|^2|\langle E_2|E_1\rangle|^2|S_1\rangle\langle S_1|$$
$$+ |\beta|^2|S_2\rangle\langle S_2|$$
$$+ \alpha\beta^*\langle E_2|E_1\rangle|S_1\rangle\langle S_2|$$
$$+ \alpha^*\beta\langle E_1|E_2\rangle|S_2\rangle\langle S_1|$$

$$= |\alpha|^2(1+|\langle E_2|E_1\rangle|^2)|S_1\rangle\langle S_1|$$
$$+ |\beta|^2(1+|\langle E_2|E_1\rangle|^2)|S_2\rangle\langle S_2|$$
$$+ 2\alpha\beta^*\langle E_2|E_1\rangle|S_1\rangle\langle S_2|$$
$$+ 2\alpha^*\beta\langle E_1|E_2\rangle|S_2\rangle\langle S_1| \qquad //$$

则在x处找到电子的概率为 (def $\psi_1(x)=\langle x|S_1\rangle$, $\psi_2(x)=\langle x|S_2\rangle$)

$$\langle x|\hat{\rho}_S|x\rangle = |\alpha|^2(1+|\langle E_2|E_1\rangle|^2)|\psi_1(x)|^2$$
$$+|\beta|^2(1+|\langle E_2|E_1\rangle|^2)|\psi_2(x)|^2$$
$$+4\,\mathrm{Re}[\alpha\beta^*\langle E_2|E_1\rangle\psi_1(x)\psi_2^*(x)]$$

若要区分电子从哪个缝发出，则 $|E_1\rangle$ 和 $|E_2\rangle$ 必须有很大不同

$\Rightarrow \langle E_1|E_2\rangle = 0$

此时没有干涉条纹.

若 $|E_1\rangle \approx |E_2\rangle$，即无法分辨电子经过哪个缝，则有干涉条纹