

Матрица плотности

Побойко Игорь

4 марта 2017

Матрица плотности подсистемы

Матрица плотности естественным образом возникают при рассмотрении квантовой механики так называемых *открытых систем* — в противовес замкнутым, это системы, которые взаимодействуют с окружающей средой, или являются подсистемами какой-то большой квантомеханической системы. Очевидно, что описание открытых систем на языке волновых функций затруднено.

Итак, пусть имеется система, которая состоит из двух подсистем, A и B (математически это означает, что гильбертово пространство представимо в виде тензорного произведения $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$), описываемая волновой функцией $|\psi_{AB}\rangle \in \mathcal{H}$. При этом пусть все интересующие нас физические наблюдаемые относятся именно к подсистеме A (например, подсистема B описывает термостат или окружающую среду). Пусть $\{|\alpha\rangle\} \in \mathcal{H}_A$ и $\{|\beta\rangle\} \in \mathcal{H}_B$ образуют базисы соответствующих подсистем. В таком случае, для произвольной наблюдаемой $\hat{O}_A$ мы можем записать:

$$\langle \psi_{AB} | \hat{O}_A | \psi_{AB} \rangle = \sum_{\alpha\beta, \alpha'\beta'} \psi_{\alpha'\beta'}^* \psi_{\alpha\beta} \langle \alpha'_A, \beta'_B | \hat{O}_A | \alpha_A, \beta_B \rangle = \sum_{\alpha\alpha'} \underbrace{\left(\sum_{\beta} \psi_{\alpha\beta} \psi_{\alpha'\beta}^* \right)}_{\equiv (\hat{\rho}_A)_{\alpha\alpha'}} (\hat{O}_A)_{\alpha'\alpha} \equiv \text{Tr}(\hat{\rho}_A \hat{O}_A) \quad (1)$$

Таким образом естественным образом возникает матрица плотности подсистемы $\hat{\rho}_A$. Давайте сперва изучим свойства этого объекта:

- $\hat{\rho}_A$ — линейный оператор, действующий на подпространстве A .
- Матрица плотности «нормирована» следующим условием: $\text{Tr} \hat{\rho} = \sum_{\alpha\beta} \psi_{\alpha\beta} \psi_{\alpha\beta}^* = 1$.
- Матрица плотности — эрмитов оператор $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$.
- Матрица плотности неотрицательно определена: $\langle \phi | \hat{\rho} | \phi \rangle = \sum_{\alpha\alpha', \beta} \phi_\alpha^* \psi_{\alpha\beta} \psi_{\alpha'\beta}^* \phi_{\alpha'} = \sum_{\beta} |\sum_{\alpha} \psi_{\alpha\beta} \phi_\alpha^*|^2 \geq 0$.

Эти свойства означают, что матрицу плотности можно диагонализировать, представив в следующем виде:

$$\hat{\rho} = \sum_n p_n |n\rangle \langle n|, \quad 0 \leq p_n \leq 1, \quad \sum_n p_n = 1 \quad (2)$$

Чистое состояние

На самом деле, в качестве такой системы A можно взять всю систему AB , описываемую волновой функцией $|\psi_{AB}\rangle$. Несложно видеть, что матрица плотности в таком случае имеет вид $\hat{\rho}_{AB} = |\psi_{AB}\rangle \langle \psi_{AB}|$. Состояние, описываемое такой матрицей плотности, называют *чистым состоянием*; и если система находится в чистом состоянии, то она допускает описание на языке волновых функций. Обсудим их базовые свойства:

- Собственные числа равны такой матрицы плотности равны $p_n = (1, 0, 0, \dots)$.
- Матрица плотности чистого состояния удовлетворяет условию $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$.
- В частности, $\text{Tr} \hat{\rho}^2 = 1$. В случае общего положения, $\text{Tr} \hat{\rho}^2 = \sum_n p_n^2 < \sum_n p_n = 1$.
- Альтернативно, можно вычислить так называемую энтропию фон-Неймана $S = -\text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho})$. Для чистого состояния, $S = 0$; в случае же общего положения, $S > 0$.

Способ построения матрицы плотности подсистемы, описанный выше, и записываемый как $\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B \hat{\rho}_{AB}$, называется «взятием частичного следа». Полученный в результате объект носит название *редуцированной матрицы плотности*.

Термодинамика

Тот факт, что матрица плотности диагонализуема и представима в виде $\hat{\rho} = \sum_n p_n |n\rangle \langle n|$, означает, что среднее значение произвольной наблюдаемой представимо в следующем виде:

$$\langle \hat{O} \rangle = \sum_n p_n \langle n | \hat{O} | n \rangle = \sum_n p_n O_n \quad (3)$$

Это выражение допускает абсолютно *классическую* интерпретацию — в действительности, точно такое же выражение имело бы место, если бы мы имели *классический ансамбль* систем, с вероятностью p_n находящихся в квантомеханическом состоянии $|n\rangle$ (стоит отметить, что квантомеханическая волновая функция тоже осмыслена только если мы имеем дело с ансамблем — ведь квантовая механика описывается на языке вероятностей на самом фундаментальном уровне; говорить же о вероятностях осмысленно только с точки зрения ансамбля). Таким образом, мы как бы имеем дело с *классическим ансамблем квантовых ансамблей*. «Как бы» — ключевое слово, ведь на самом деле никакого классического ансамбля в нашем построении не было, и мы с самого начала работали с чисто «квантовым ансамблем». Кроме того, в общем случае такое разложение не единственно¹.

В случае общего положения, имеет смысл говорить о едином ансамбле систем, описываемом определённой матрицей плотности. Матрица плотности является квантовым аналогом функции распределения из классической статистической физики. В частности, как и классическая функция распределения, матрица плотности может характеризовать наше *неполное знание* о системе. В качестве примера, можно исследовать *Гиббсовский (канонический) ансамбль* — ансамбль систем, находящихся в термодинамическом равновесии с термостатом температуры T . Из-за нашего неполного знания о степенях свободы термостата, из-за сложной динамики самой системы, обычно такие системы с прекрасной точностью описываются матрицей плотности $\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}$ ($Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}}$ — «статсумма», обеспечивающая нормировку $\text{Tr} \hat{\rho} = 1$; $\beta = 1/T$).

Примеры

Пример 1. Чистое состояние Давайте рассмотрим спин- $1/2$, описываемый квантомеханической суперпозицией

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \quad (4)$$

Это — чистое состояние. Матрица плотности такого состояния имеет вид:

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle \langle \psi| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (\hat{\mathbb{I}} + \hat{\sigma}_x) \quad (5)$$

С её помощью можно вычислить разные наблюдаемые:

$$\langle \hat{\sigma}_x \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{\sigma}_x) = \frac{1}{2} \text{Tr} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = 1, \quad \langle \hat{\sigma}_y \rangle = \frac{i}{2} \text{Tr} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = 0, \quad \langle \hat{\sigma}_z \rangle = \frac{1}{2} \text{Tr} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = 0 \quad (6)$$

«Блоховское» представление Вообще говоря, матрицу плотности произвольной двухуровневой системе можно всегда разложить по «базису» матриц Паули: $\hat{\rho} = \frac{1}{2} (\hat{\mathbb{I}} + \mathbf{p} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})$. Условие нормировки $\text{Tr} \hat{\rho} = 1$ тем самым фиксировало коэффициент при единичной матрице; условие эрмитовости $\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger$ означает, что вектор $\mathbf{p}$ должен быть вещественным; и, поскольку собственные числа матрицы равны $\frac{1}{2}(1 + |\mathbf{p}|)$ и $\frac{1}{2}(1 - |\mathbf{p}|)$, тем самым длина вектора фиксирована условием $|\mathbf{p}| \leq 1$ (и $|\mathbf{p}| = 1$ тогда и только тогда, когда система находится в чистом состоянии). Можно вычислить среднее значение спиновых операторов по такому состоянию:

$$\langle \hat{\sigma}_\alpha \rangle = \frac{1}{2} \text{Tr} \left((\hat{\mathbb{I}} + p_\beta \hat{\sigma}_\beta) \hat{\sigma}_\alpha \right) = p_\alpha \quad (7)$$

и тем самым вектор $\mathbf{p}$, параметризующий матрицу плотности, задаёт просто средний спин. Такое представление и называется «блоховским».

Пример 2. «ЭПР» Давайте теперь рассмотрим два спина- $1/2$ (или любые другие двухуровневые системы), A и B , которые «приготовлены» в классическом запутанном «ЭПР»-состоянии:

$$|\psi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_A \downarrow_B\rangle + |\downarrow_A \uparrow_B\rangle). \quad (8)$$

Пусть при этом судьба спина B нам неизвестна (и мало интересует) — пусть мы можем проводить измерения только над спином A . Матрица плотности всей системы AB имеет в базисе $\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}$ следующий вид:

¹Хотя матрицу можно диагонализировать более или менее одним способом — однако, с точки зрения такой «классической интерпретации» состояния $|n\rangle$ вовсе не обязательно должны быть ортогональными

$$\hat{\rho}_{AB} = |\psi_{AB}\rangle \langle \psi_{AB}| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (9)$$

Давайте построим редуцированную матрицу плотности, описывающую спин A , действуя согласно определению:

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B \hat{\rho}_{AB} \Leftrightarrow (\hat{\rho}_A)_{\alpha\alpha'} = \sum_{\beta} (\hat{\rho}_{AB})_{\alpha\beta, \alpha'\beta} = \sum_{\beta} \psi_{\alpha\beta} \psi_{\alpha'\beta}^* \quad (10)$$

$$\hat{\rho}_A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \hat{\mathbb{I}} \quad (11)$$

С точки зрения наблюдаемой $\hat{\sigma}_z$, такая матрица плотности, как и предыдущая, описывает систему, что с вероятностью $P_{\uparrow} = \frac{1}{2}$ находится в состоянии со спином «вверх» и $P_{\downarrow} = \frac{1}{2}$ — со спином «вниз». В этом смысле она никак не отличается от предыдущей. Однако, поскольку сама матрица плотности отличается — значит, это различные системы. Действительно, несложно видеть, что если с такой матрицей плотности измерить $\hat{\sigma}_x$ (и остальные проекции $\langle \hat{\sigma} \rangle$), то мы получим ноль, в отличие от предыдущего случая. Таким образом, эти две системы действительно различимы с точки зрения наблюдаемых величин!

Пример 3. «Классическая запутанность» В противовес ЭПР, можно помыслить совершенно классическую систему, которая ничего про квантовую запутанность «не знает», но описывает ансамбль, внешне похожий на ЭПР: *классическая* суперпозиция состояний $|\uparrow\downarrow\rangle$ и $|\downarrow\uparrow\rangle$ ². Она описывается следующей матрицей плотности:

$$\hat{\rho}_{AB} = \frac{1}{2} (\hat{\mathbb{P}}_{\uparrow\downarrow} + \hat{\mathbb{P}}_{\downarrow\uparrow}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (12)$$

Давайте изучим, как такая система выглядит с точки зрения спина A :

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B \hat{\rho}_{AB} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \hat{\mathbb{I}} \quad (13)$$

Матрица плотности (а значит, и все наблюдаемые) тождественно совпадает с матрицей плотности для ЭПР! Что бы не измерял наблюдатель A , он никак не сможет отличить «классическую» запутанность от «квантовой».

Эволюция матрицы плотности

Для замкнутой системы с гамильтонианом $\hat{H}$, эволюция матрицы плотности строится исходя из, например, представления 2, в котором каждая из волновых функций удовлетворяет уравнению Шрёдингера. Тривиальной подстановкой, получаем:

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = i[\hat{\rho}, \hat{H}], \quad \hat{\rho}(t) = \hat{U}(t)\hat{\rho}(0)\hat{U}^\dagger(t) \quad (14)$$

(где $\hat{U}(t)$ — обычный оператор эволюции, так что $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle$). Обратите внимание, что это уравнение очень похоже на уравнение Гейзенберга для эволюции операторов. Однако, имеется отличие в знаке!

Очевидно, что унитарная эволюция сохраняет нормировку $\text{Tr} \hat{\rho}(t) = \text{Tr} \hat{\rho}(0) = 1$; но, кроме того, сохраняется на самом деле след от любой функции матрицы плотности. В частности, сохраняется и энтропия $S = -\text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) = \text{const}$. Это утверждение, казалось бы, противоречит второму началу термодинамики, гласящему, что энтропия замкнутой системы должна возражать. В действительности же в квантовой механике рост энтропии является следствием хоть сколь угодно слабого взаимодействия с окружающей средой, и рост энтропии скорее связывается с стремлением квантовой системы *запутаться* с степенями свободы окружающей среды.

Если же система открытая — к примеру, состоит из двух взаимодействующих подсистем A и B с гамильтонианом $\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{H}_B + \hat{H}_{AB}$, то в общем случае уравнение на матрицу плотности имеет иной вид, и носит название *квантового кинетического уравнения* (master equation), или же *уравнения Линблада*. По аналогии с классической физической кинетикой и уравнению на классическую функцию распределения, в правую часть уравнения необходимо ввести дополнительный член, являющийся аналогом *интеграла столкновений*. На языке квантовой механики такой член реализуется неким *супероператором Линблада* $\mathcal{L}\hat{\rho}$ (супероператор — это оператор на множестве операторов):

²Тут можно привести пример с башмаками — пусть имеется ящик с набором из правого и левого башмака. Наблюдателям A и B отправляется по башмаку, и заранее неизвестно, какому именно. Наблюдатель A , проведя измерение над пришедшим ему башмаком, и увидев, что он — левый, немедленно придёт к выводу, что у наблюдателя B — правый. Вот вам и «коллапс волновой функции, происходящий быстрее скорости света», «квантовая телепортация», и всё такое.

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = i[\hat{\rho}, \hat{H}] + \mathcal{L}\hat{\rho} \quad (15)$$

Последний, конечно, должен обладать определёнными свойствами, так чтобы матрица плотности с течением времени сохраняла положительную определённость и нормировку. Для таких систем, динамика энтропии уже может быть нетривиальной.