

Матрица плотности

Побойко Игорь

16 сентября 2017 г.

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 $\hat{O}_A$, относящейся к подсистеме A , мы можем записать¹:

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

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 .
- С помощью матрицы плотности можно считать любые средние, относящиеся к подсистеме A — а значит, она содержит *абсолютно всю* необходимую информацию про систему A (и никакой ненужной информации о внешней системе B — мы от неё полностью избавились).
- 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. Состояние, не допускаемое описание на языке волновых функций, называется **смешанным**. Обсудим базовые свойства чистых состояний (которые можно использовать как критерии):

- Собственные числа равны такой матрицы плотности равны $p_n = (1, 0, 0, \dots)$.
- Матрица плотности чистого состояния удовлетворяет условию $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$.

¹Базис в полном пространстве $\mathcal{H}$ записывается через тензорное произведение базисных векторов подсистем — $\{|\alpha\rangle_A \otimes |\beta\rangle_B \equiv |\alpha_A, \beta_B\rangle\}$; индексы будут обозначать то, к какой из подсистем относится тот или иной вектор, чтобы не путаться. Тот факт, что оператор действует только в $\mathcal{H}_A$ математически означает, что в $\mathcal{H}$ он действует как $\hat{O}_A \otimes \hat{\mathbb{I}}$. Значки тензорного произведения мы будем опускать где только возможно, чтобы не нагромождать обозначений.

- В частности, $\text{Tr} \hat{\rho}^2 = 1$. В случае общего положения, $\text{Tr} \hat{\rho}^2 = \sum_n p_n^2 < \sum_n p_n = 1$ — поэтому это один из возможных количественных критериев чистоты состояния.
- 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 в предыдущем разделе, записывается формально как

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B \hat{\rho}_{AB} \Leftrightarrow (\hat{\rho}_A)_{\alpha\alpha'} = \sum_{\beta} (\hat{\rho}_{AB})_{\alpha\beta, \alpha'\beta}. \quad (3)$$

Такая процедура называется «взятием частичного следа» (или «взятием следа по степеням свободы подсистемы B »). Полученный в результате объект носит название **редуцированной матрицы плотности**.

Термодинамика

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

$$\langle \hat{O} \rangle = \sum_n p_n \langle n | \hat{O} | n \rangle = \sum_n p_n O_n \quad (4)$$

Это выражение допускает абсолютно *классическую* интерпретацию — в действительности, точно такое же выражение имело бы место, если бы мы имели *классический ансамбль* квантовых систем, с вероятностью p_n находящихся в состоянии $|n\rangle$. Таким образом, мы как бы имеем дело с *классическим ансамблем квантовых ансамблей*². «Как бы» — ключевое слово, ведь *исходно* никакого классического ансамбля в нашем построении не было, и мы с самого начала работали с чисто «квантовым ансамблем», описываемым волновой функцией $|\psi_{AB}\rangle$. Кроме того, в общем случае такое разложение не единственно³. В случае общего положения, имеет смысл говорить о *едином* ансамбле систем, описываемом определённой матрицей плотности, из которого невозможно «вычленишь» квантовую и классическую составляющие.

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 рассмотреть **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 и взаимодействия с термостатом, 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 $\text{Tr} \hat{\rho} = 1$; $\beta = 1/T$; постоянная Больцмана k_B выбрана равной единице).

Ремарка о матрицах Паули

Дальнейшее обсуждение примеров двухуровневых систем будет проводиться на языке **матриц Паули**. Вообще произвольная наблюдаемая, относящаяся к двухуровневым системам, представима в виде эрмитовой матрицы 2×2 — и поэтому существует только 4 линейно-независимых наблюдаемых. Часто удобно их выбирать в виде следующих матриц, которые называются матрицами Паули:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (5)$$

(четвёртая линейно-независимая наблюдаемая — это единичная матрица, поэтому она не очень интересна). Эти матрицы очень удобно перемножать; несложно убедиться в следующем правиле:

$$\hat{\sigma}_\alpha \hat{\sigma}_\beta = \delta_{\alpha\beta} \hat{\mathbb{I}} + i \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{\sigma}_\gamma \quad (6)$$

В качестве простого примера, где они возникают естественным образом — матрицы Паули являются операторами проекции спина-1/2 (частный случай двухуровневой системы) на координатные оси (с точностью до множителя 1/2).

²Дело в том, что понятие квантомеханической волновой функции осмыслено только если мы имеем дело с ансамблем — ведь квантовая механика описывается на языке вероятностей на самом фундаментальном уровне. Говорить же о вероятностях в природе осмысленно только с точки зрения ансамбля.

³Хотя матрицу можно диагонализировать более или менее одним способом — однако, с точки зрения такой «классической интерпретации» состояния $|n\rangle$ вовсе не обязательно должны быть ортогональными. Но даже если потребовать их ортогональность, мы столкнёмся с проблемами в случае вырожденных собственных чисел.

Примеры

Пример 1. Чистое состояние Давайте рассмотрим спин-1/2 (или любую другую произвольную квантомеханическую систему), описываемый квантомеханической суперпозицией

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \quad (7)$$

Это — чистое состояние, о котором «наивно» можно думать следующим образом: с вероятностью $\frac{1}{2}$ мы работаем со спином, «смотрящим» вверх, и с вероятностью $\frac{1}{2}$ мы работаем со спином, «смотрящим» вниз. Далее мы покажем, что такая картинка не совсем правильная — в действительности, такая волновая функция описывает спин, «смотрящий» влево (вдоль оси x). Матрица плотности такого состояния имеет вид:

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\hat{\mathbb{I}} + \hat{\sigma}_x) \quad (8)$$

С её помощью можно вычислить разные наблюдаемые:

$$\langle\hat{\sigma}_x\rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{\sigma}_x) = \frac{1}{2}\text{Tr} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = 1, \quad \langle\hat{\sigma}_y\rangle = \frac{i}{2}\text{Tr} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = 0, \quad \langle\hat{\sigma}_z\rangle = \frac{1}{2}\text{Tr} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = 0 \quad (9)$$

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:

$$|\psi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_A\downarrow_B\rangle + |\downarrow_A\uparrow_B\rangle). \quad (10)$$

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:

$$\hat{\rho}_{AB} = |\psi_{AB}\rangle\langle\psi_{AB}| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (11)$$

Возьмём «след» по степеням свободы спина B . В выбранном базисе эта процедура сводится к следующей: мы представляем матрицу плотности в виде блочной матрицы 2×2 , где каждый блок, в свою очередь тоже является матрицей 2×2 , и в каждом блоке берём след. Эта процедура сразу приводит нас к следующей матрице плотности:

$$\hat{\rho}_A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hat{\mathbb{I}} \quad (12)$$

С точки зрения наблюдаемой $\hat{\sigma}_z$, такая матрица плотности, как и предыдущая, описывает систему, что с вероятностью $\frac{1}{2}$ находится в состоянии со спином «вверх» и $\frac{1}{2}$ — со спином «вниз». В этом смысле она никак не отличается от предыдущей. Но есть нюанс — ведь сама матрица плотности отличается! Это означает, что можно придумать наблюдаемую, измеряя которую мы сможем отличить одну систему от другой. Действительно, несложно видеть, что если с такой матрицей плотности измерить $\hat{\sigma}_x$ (как и остальные проекции $\hat{\sigma}_{y,z}$), 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 состояний⁴ $|\uparrow\downarrow\rangle$ и $|\downarrow\uparrow\rangle$. Она описывается следующей матрицей плотности:

$$\hat{\rho}_{AB} = \frac{1}{2}(\hat{\mathbb{P}}_{\uparrow\downarrow} + \hat{\mathbb{P}}_{\downarrow\uparrow}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (13)$$

Матрица плотности отличается от обсуждаемой в предыдущем разделе — значит, системы всё-таки различны. Но можно задать себе следующий вопрос — сможет ли отличить наблюдатель A такую классическую систему от квантовой? На этот вопрос можно ответить, взглянув на редуцированную матрицу плотности наблюдателя A :

⁴Тут 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. Такой вот себе «коллапс волновой функции» с передачей информации быстрее скорости света.

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B \hat{\rho}_{AB} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \hat{\mathbb{I}} \quad (14)$$

Матрица плотности (а значит, и все наблюдаемые) тождественно совпадает с матрицей плотности для ЭПР! Значит, ответ на поставленный вопрос — нет. Ни наблюдатель A , ни наблюдатель B не смогут ответить, квантовая система ему пришла или классическая. Но если они скажут результаты своих измерений некоему наблюдателю C (что эквивалентно тому, что наблюдатель C провёл измерения с обоими системами) — в принципе он эти системы сможет отличить.