

A sűrűségmátrix (a sűrűség operátor)

November 14, 2006

- Ha a kvantummechanikai rendszer egy jól meghatározott állapotban van, akkor az állapotát egy $|\psi\rangle$ állapotvektorral jellemezhetjük.
- Ha a rendszer állapotát nem ismerjük biztosra, és csak azt tudjuk, hogy a $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_n\rangle$ állapotok valamelyikében $p_1, p_2, \dots, p_n$ valószínűségekkel lehet, akkor ez egy nemtiszta állapot és nem jellemezhető egyértelműen egy állapotvektorral. Bizonyítsuk ezt be:

Tételezzük fel, hogy ezen állapot jellemezhető egy $|\Phi\rangle$ állapotvektorral és vizsgáljuk azt a speciális esetet mikor $\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij}$. Ilyen esetben ennek a $|\Phi\rangle$ állapotvektornak a legáltalánosabb alakja:

$$|\Phi\rangle = \sum_{k=1}^n \sqrt{p_k} e^{i\theta_k} |\psi_k\rangle. \quad (1)$$

Ez a legáltalánosabb alak amelyre teljesül, hogy ha azt az operátort mérjük amelynek ψ_i a sajátvektorai akkor p_i valószínűséggel visszük a rendszert a mérés után a $|\psi_i\rangle$ sajátállapotban. Ha viszont egy olyan A fizikai mennyiséget mérünk amelyhez rendelt $\hat{A}$ operátornak a $|\psi_i\rangle$ állapotok nem sajátvektorai, ezen esetben igaz kell legyen, hogy:

$$\langle A \rangle = \sum_{i=1}^n \langle\psi_i|\hat{A}|\psi_i\rangle p_i \quad (2)$$

Az átlagértékeknél tanultak alapján azonban:

$$\langle A \rangle_\Phi = \langle\Phi|\hat{A}|\Phi\rangle = \sum_{k,l}^n \sqrt{p_k p_l} e^{-i(\theta_l - \theta_k)} \langle\psi_l|\hat{A}|\psi_k\rangle. \quad (3)$$

Ezen (3) érték függ a határozatlan θ_i fázis tagoktól és a $\langle\psi_l|\hat{A}|\psi_k\rangle$ nemdiagonális mátrixelemektől. Ha elfogadjuk tehát, hogy az adott kvantummechanikai rendszert a $|\Phi\rangle$ állapotvektorral írjuk le akkor (2) és (3) egyenlő kell legyen minden $\hat{A}$ hermitikus operátorra. A szabadon megválasztható θ_k fázis tagokkal ez általános esetben nem valósítható meg. Az adott kvantummechanikai rendszer nem jellemezhető tehát egy tiszta állapottal.

Egy ilyen állapotot a sűrűség-operátor segítségével jellemzünk:

$$\hat{\rho} = \sum_i |\psi_i\rangle p_i \langle \psi_i|. \quad (4)$$

A sűrűség operátort más néven: **statisztikus operátornak** is nevezzük. Ez az operátor főleg a statisztikus fizikai alkalmazásokhoz lesz fontos. A sűrűség-operátor segítségével egy tetszőleges A fizikai mennyiség átlagértéke könnyen kiszámítható a tekintett nemtiszt állapotban mint

$$\langle A \rangle = Tr(\hat{A}\hat{\rho}), \quad (5)$$

ahol $Tr(\hat{A})$ az $\hat{A}$ operátort jellemző mátrix nyomát (diagonális elemek összegét) jelenti. A bizonyítás azonnali:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_{i=1}^n \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle p_i = \sum_{i=1}^n \langle \psi_i | \hat{I} \hat{A} | \psi_i \rangle p_i = \\ &= \sum_k \sum_{i=1}^n \langle \psi_i | a_k \rangle \langle a_k | \hat{A} | \psi_i \rangle p_i = \sum_k \sum_{i=1}^n \langle a_k | \hat{A} | \psi_i \rangle \cdot p_i \langle \psi_i | a_k \rangle = \\ &= \sum_k \langle a_k | \hat{A} \hat{\rho} | a_k \rangle = Tr(\hat{A}\hat{\rho}). \end{aligned} \quad (6)$$

Érdemes itt megjegyeznünk, hogy az adott operátorhoz rendelt mátrix nyoma független a választott reprezentációtól. Ezáltal, ahogy azt elvárjuk egy adott fizikai mennyiség átlagértéke a választott reprezentációtól független marad. Az operátorok nyomára vonatkozólag egy azonnali tulajdonság, hogy:

$$Tr(\hat{A}\hat{B}) = Tr(\hat{B}\hat{A}). \quad (7)$$

A fenti egyenlőség bizonyítása azonnali. Tételezzük fel, hogy az $|a_k\rangle$ vektorok egy reprezentációt határoznak meg.

$$\begin{aligned} Tr(\hat{A}\hat{B}) &= \sum_k \langle a_k | \hat{A}\hat{B} | a_k \rangle = \sum_k \langle a_k | \hat{A} \hat{I} \hat{B} | a_k \rangle = \\ &= \sum_{k,m} \langle a_k | \hat{A} | a_m \rangle \langle a_m | \hat{B} | a_k \rangle = \sum_{k,m} \langle a_m | \hat{B} | a_k \rangle \langle a_k | \hat{A} | a_m \rangle = \\ &= \sum_m \langle a_m | \hat{B} \hat{I} \hat{A} | a_m \rangle = Tr(\hat{B}\hat{A}) \end{aligned}$$

Egy adott reprezentációban a sűrűség-operátort egy $\hat{\rho} \rightarrow [\rho_{ij}]$ mátrixsal (*sűrűség mátrixsal*) is jellemezhetjük. Legyenek a reprezentáció bázisvektorai: $|a_1\rangle, |a_2\rangle, \dots, |a_i\rangle,$

...

$$\hat{\rho} = \hat{I} \hat{\rho} \hat{I} = \sum_{i,j} |a_i\rangle \langle a_i | \hat{\rho} | a_j \rangle \langle a_j| = \sum_{i,j} |a_i\rangle \rho_{ij} \langle a_j| \quad (8)$$

1 A sűrűségoperátor tulajdonságai

1. $\hat{\rho}$ hermitikus operátor: $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$. A bizonyítás azonnali, felhasználva a (4) definíciót.
2. $Sp(\hat{\rho}) = 1$
Bizonyítás: Tudjuk, hogy $\langle \Omega \rangle = Sp(\hat{\rho}\hat{\Omega})$. Ha $\hat{\Omega} = \hat{I}$ akkor $\langle I \rangle = 1$ reprezentációtól függetlenül. Ekkor $Sp(\hat{\rho}\hat{\Omega}) = Sp(\hat{\rho}) = 1$.
3. $\hat{\rho}$ egy pozitívan értelmezett hermitikus operátor.
Bizonyítás: $\langle \psi | \hat{\rho} | \psi \rangle = \sum_i \langle \psi | \psi_i \rangle p_i \langle \psi_i | \psi \rangle = \sum_i |\langle \psi_i | \psi \rangle|^2 \cdot p_i > 0$ mivel $|\langle \psi_i | \psi \rangle|^2 > 0$ és $p_i > 0$ (itt ne feledjük el, hogy p_i valószínűségeket jelöl).
4. a $\hat{\rho}$ operátor ρ_i sajátértékeire igaz, hogy $0 \leq \rho_i \leq 1$
Bizonyítás: $\hat{\rho}$ a saját reprezentációjában diagonális. $Sp(\hat{\rho}) = \sum_i^n \rho_i = 1$, azonban $\rho_i \geq 0$ mert $\hat{\rho}$ pozitívan értelmezett, $\Rightarrow \rho_i \leq 1$.
5. $Sp(\rho^2) \leq 1$
Bizonyítás: $Sp(\rho^2) = \sum_i \rho_i^2 \leq (\sum_i \rho_i)^2 = 1$ (mert $\rho_i \geq 0$).
6. Egy egyenletes valószínűségeloszlású állapotsokaságra:

$$\hat{\rho} = \sum_{i=1}^k |\psi_i\rangle p_i \langle \psi_i| = \frac{1}{k} \sum_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| = \frac{1}{k} \hat{P}_R. \quad (9)$$

Ilyen esetben tehát a sűrűségoperátor egy projektor a nemtiszt állapot által generált altérre.

7. Egy tiszta $|\psi\rangle$ állapot esetén is értelmezhető a sűrűségoperátor:

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle \langle \psi|. \quad (10)$$

Ez egy projektor a $|\psi\rangle$ vektorra. Ebben az esetben: $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$.

2 Egy nemtiszt állapot időbeli evolúciója

Mivel egy nemtiszt állapotot a sűrűségoperátor jellemez, egy nemtiszt állapot időbeli evolúciójának a leírásához a sűrűség-operátor időbeli evolúcióját tanulmányozzuk.

Legyen a t_0 időpillanatban a kvantummechanikai rendszer a $|\psi_1(t_0)\rangle, |\psi_2(t_0)\rangle, \dots, |\psi_n(t_0)\rangle$ állapotok és a $p_1, p_2, \dots, p_n$ valószínűségek által meghatározott kevert állapotban (sokaságban). Ezen sokaság bármely tiszta állapota (komponense) az időben a

$$|\psi_i(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi_i(t_0)\rangle, \quad (11)$$

törvény szerint evolúál (az evolúciós posztulátum értelmében). A t időpillanatban a sokaság $|\psi_1(t)\rangle, |\psi_2(t)\rangle, \dots, |\psi_n(t)\rangle$ lesz, ugyanazon $p_1, p_2, \dots, p_n$ valószínűségekkel. A sűrűségoperátor a t időpillanatban:

$$\hat{\rho}(t) = \sum_{i=1}^n |\psi_i(t)\rangle p_i \langle \psi_i(t)| = \sum_{i=1}^n \hat{U}(t, t_0) |\psi_i(t_0)\rangle p_i \langle \psi_i(t_0)| \hat{U}^\dagger(t, t_0) = \quad (12)$$

$$= \hat{U}(t, t_0) \left[\sum_{i=1}^n |\psi_i(t_0)\rangle p_i \langle \psi_i(t_0)| \right] \hat{U}^\dagger(t, t_0) = \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^\dagger(t, t_0) \\ \Rightarrow \hat{\rho}(t) = \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^\dagger(t, t_0). \quad (13)$$

Az idő szerinti deriváltat vizsgálva

$$\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = \frac{d\hat{U}(t, t_0)}{dt} \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^\dagger(t, t_0) + \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \frac{d\hat{U}^\dagger(t, t_0)}{dt}, \quad (14)$$

de az evolúciós posztulátum keretében láttuk, hogy:

$$i\hbar \frac{d\hat{U}(t, t_0)}{dt} = \hat{H} \hat{U}(t, t_0). \quad (15)$$

Innen azonnal következik:

$$-i\hbar \frac{d\hat{U}^\dagger(t, t_0)}{dt} = \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{H}. \quad (16)$$

Behelyettesítve ezeket a (14) egyenletbe, megkapjuk a sűrűségoperátor evolúciós egyenletét:

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = \hat{H} \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^\dagger(t, t_0) - \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{H} \quad (17)$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = [\hat{H}, \hat{\rho}(t)]. \quad (18)$$