Kapitola 11

Matice hustoty

Přehled teorie

Zavedení matice hustoty

Matice hustoty představuje obecnější popis stavu kvantové částice. Obecně se definuje jako operátor $\hat{\rho}$, který hermitovský, pozitivní a má jednotkovou stopu, tj.

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger, \quad \hat{\rho} \geq 0, \quad \mathrm{Tr}\ \hat{\rho} = 1. \tag{11.1}$$

Stopa operátoru $\hat{A}$ je rovna součtu diagonálních maticových elementů v libovolné bázi, tj. je rovna sumě jeho vlastních čísel a_i

$$\mathrm{Tr}\ \hat{A} = \sum_i \langle i|\hat{A}|i\rangle = \sum_i a_i. \tag{11.2}$$

Stopa je lineární

$$\mathrm{Tr}\ \left(\hat{A} + \alpha\hat{B}\right) = \mathrm{Tr}\ \hat{A} + \alpha \mathrm{Tr}\ \hat{B},$$

a nemění se při cyklické záměně operátorů

$$\mathrm{Tr}\ \left(\hat{A}\hat{B}\right) = \mathrm{Tr}\ \left(\hat{B}\hat{A}\right),$$

přičemž tato rovnost platí i pokud operátory zobrazují mezi jinými vektorovými prostory.

Matice hustoty má tedy nezáporná vlastní čísla $p_i \geq 0$, jejichž součet je jedna

$$\mathrm{Tr}\ \hat{\rho} = \sum_i p_i = 1. \tag{11.3}$$

Můžeme je interpretovat jako pravděpodobnostní rozdělení. Označme příslušné vlastní vektory $\hat{\rho}$ jako $|\psi_i\rangle$. Vlastní číslo p_i má význam pravděpodobnosti nalezení částice ve stavu $|\psi_i\rangle$. Lze ukázat, že matici hustoty lze vždy diagonalizovat, má máximálně spočetně mnoho vlastních čísel a jediné vlastní číslo, které může mít nekonečnou násobnost, je 0. Vlastní vektory $|\psi_i\rangle$ tvoří ortonormální bázi. Každou matici hustoty lze zapsat ve tvaru

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|. \tag{11.4}$$

Ketu $|\psi\rangle$, který jsme dosud používali k popisu stavu kvantové částice, odpovídá matice hustoty $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$, tj. ortogonální projektor na jednorozměrný podprostor v $\mathcal{H}$ určený vektorem $|\psi\rangle$. Takové stavy se označují jako čisté. Ostatní matice hustoty popisují smíšené stavy. Snadno se ověří následující tvrzení:

$$\mathrm{Tr}\ \hat{\rho}^2 \leq \mathrm{Tr}\ \hat{\rho}, \tag{11.5}$$

kde rovnost nastává právě tehdy když $\hat{\rho}$ je čistý stav.

Předpovědi výsledků měření

Uvažujme částici ve stavu popsaném maticí hustoty $\hat{\rho}$ (11.4). Pravděpodobnost, že ji nalezneme v čistém stavu $|\varphi\rangle$, je pak rovna

$$W_{\hat{\rho}\to|\varphi\rangle} = \sum_i p_i W_{|\psi_i\rangle\to|\varphi\rangle} = \sum_i p_i |\langle\varphi|\psi_i\rangle|^2 = \langle\varphi|\hat{\rho}|\varphi\rangle. \tag{11.6}$$

Pravděpodobnost naměření vlastní hodnoty a pozorovatelné $\hat{A}$ je dána vztahem

$$W_{\hat{\rho},a} = \sum_i p_i W_{|\psi_i\rangle,a} = \mathrm{Tr}\ \left(\hat{P}_a\hat{\rho}\right), \tag{11.7}$$

kde $\hat{P}_a$ je ortogonální projektor na podprostor s vlastní hodnotou a, tj.

$$\hat{P}_a = \sum_k |a,k\rangle\langle a,k|. \tag{11.8}$$

Zde kety $|a,k\rangle$ tvoří ortonormální bázi v daném podprostoru. Pokud a je nedegenerovaná vlastní hodnota, pak $\hat{P}_a = |a\rangle\langle a|$ a vztah (11.7) se zredukuje na

$$W_{\hat{\rho},a} = \mathrm{Tr}\ \left(\hat{P}_a|a\rangle\langle a|\right) = \langle a|\hat{\rho}|a\rangle \equiv W_{\hat{\rho}\to|a\rangle}. \tag{11.9}$$

Pro střední hodnotu $\hat{A}$ ve stavu $\hat{\rho}$ platí

$$\langle\hat{A}\rangle_{\hat{\rho}} = \sum_{a\in\sigma(\hat{A})} aW_{\hat{\rho},a} = \sum_{a\in\sigma(\hat{A})} a\mathrm{Tr}\ \left(\hat{P}_a\hat{\rho}\right) = \mathrm{Tr}\ \left(\hat{A}\hat{\rho}\right). \tag{11.10}$$

Po měření s výsledkem a se stav změní na

$$\hat{\rho}_{\hat{A}=a} = \frac{\hat{P}_a\hat{\rho}\hat{P}_a}{\mathrm{Tr}\ \left(\hat{P}_a\hat{\rho}\hat{P}_a\right)} = \frac{\hat{P}_a\hat{\rho}\hat{P}_a}{\mathrm{Tr}\ \left(\hat{P}_a\hat{\rho}\right)} = \frac{\hat{P}_a\hat{\rho}\hat{P}_a}{W_{\hat{\rho},a}} \tag{11.11}$$

Měření bez rozlišení výsledků

Pokud pozorovatelnou $\hat{A}$ změříme, ale neznáme výsledek měření, pak je stav částice popsán maticí hustoty

$$\hat{\rho}_{\hat{A}} = \sum_{a\in\sigma(\hat{A})} \hat{\rho}_{\hat{A}=a} W_{\hat{\rho},a} = \sum_{a\in\sigma(\hat{A})} \hat{P}_a \hat{\rho} \hat{P}_a. \tag{11.12}$$

Takovýmto měřením se obecně z čistého stavu stane smíšený, jak si ukážeme na následujícím příkladu. Uvažujme pro jednoduchost pozorovatelnou $\hat{A}$ s čistě bodovým spektrem

$$\hat{A}|j\rangle = a_j|j\rangle.$$

Před měřením bude částice v nějakém čistém stavu

$$|\psi\rangle = \sum_j \alpha_j |j\rangle, \quad \alpha_j = \langle j|\psi\rangle.$$

Předpokládáme, že alespoň dvě α_i jsou různé od nuly, tj. $|\psi\rangle$ není vlastní vektor $\hat{A}$. Matice hustoty, která tomuto čistému stavu odpovídá, je rovna

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_{j,k} \overline{\alpha}_j \alpha_k |j\rangle\langle k|. \tag{11.13}$$

Operátor ρ má tedy v bázi vlastních vektorů $\hat{A}$ maticové elementy

$$\langle j|\hat{\rho}|k\rangle = \overline{\alpha}_j \alpha_k, \tag{11.14}$$

takže matice $\hat{\rho}$ je v této bázi nediagonální. Uděláme nyní měření $\hat{A}$ bez rozlišování výsledků. Stav po takovémto měření je podle vztahu (11.12) roven

$$\hat{\rho}_{\hat{A}} = \sum_j |j\rangle\langle j|\hat{\rho}|j\rangle\langle j| = \sum_j |\alpha_j|^2 |j\rangle\langle j|. \tag{11.15}$$

Tento stav má nenulové jen diagonální maticové elementy, protože

$$\langle j|\hat{\rho}_{\hat{A}}|k\rangle = |\alpha_j|^2 \delta_{jk}. \tag{11.16}$$

Protože předpokládáme že $|\psi\rangle$ nebyl vlastní vektor $\hat{A}$, platí pro všechny i nerovnost $0 \leq |\alpha_i|^2 < 1$ a tedy

$$\mathrm{Tr}\ \hat{\rho}_{\hat{A}} = \sum_j |\alpha_j|^4 < 1.$$

Měřením bez rozlišení výsledku se tedy z čistého stavu $|\psi\rangle$ stal smíšený stav $\hat{\rho}_{\hat{A}}$. Poznamenejme, že pravděpodobnosti naměření hodnoty a_i jsou stejné ve stavu $|\psi\rangle$ i $\hat{\rho}_{\hat{A}}$

$$W_{|\psi\rangle,a_i} = |\langle i|\psi\rangle|^2 = |\alpha_i|^2 = \langle i|\hat{\rho}_{\hat{A}}|i\rangle = W_{\hat{\rho}_{\hat{A}},a_i}. \tag{11.17}$$

Více informací už ale ve smíšeném stavu $\hat{\rho}_{\hat{A}}$ není, je závislý pouze na $|\alpha_i|^2$. Smíšený stav $\hat{\rho}_{\hat{A}}$ je tzv. nekoherentní superpozice bazických ketů $|i\rangle$, tj. jejich klasická statistická směs, kdy nevíme nic jiného, než že s pravděpodobností $|\alpha_i|^2$ najdeme částici ve stavu $|i\rangle$. Čistý stav $|\psi\rangle$ obsahuje v určitém smyslu více informací než smíšený stav $\hat{\rho}_{\hat{A}}$, protože $|\psi\rangle$ je určen komplexními čísly α_i. Čistý stav $|\psi\rangle$ je tzv. koherentní superpozice bazických ketů $|j\rangle$ (resp. kvantová superpozice), kde známe i relativní fáze mezi bazickými kety $|j\rangle$.

Entropie kvantového stavu

Množství informací ve stavu můžeme kvantifikovat pomocí von Neumannovy entropie

$$S(\hat{\rho}) = -\mathrm{Tr}\ \left(\hat{\rho}\ln\hat{\rho}\right). \tag{11.18}$$

Z rozkladu (11.4) dostaneme

$$S(\hat{\rho}) = -\sum_i p_i \ln p_i \equiv S(\{p_i\}), \tag{11.19}$$

tj. von Neumannova entropie stavu $\hat{\rho}$ je shodná s Shannonovou entropií pravděpodobnostního rozdělení $\{p_i\}$. Čím větší je entropie tím menší je množství informací obsažené ve stavu $\hat{\rho}$. Pro čisté stavy je jen jedno z $p_i = 1$, ostatní jsou rovné nule, a tedy

$$S(|\psi\rangle\langle\psi|) = 0. \tag{11.20}$$

Čisté stavy obsahují maximální možné množství informací. Poznamenejme, že každý čistý stav lze chápat jako vlastní vektor nějaké úplné množiny pozorovatelných. Smíšené stavy mají kladnou entropii. Pokud má Hilbertův prostor konečnou dimenzi N, pak existuje stav s maximální entropií - tzv. maximálně smíšený stav

$$\hat{\rho} = \frac{1}{N}\hat{I} \tag{11.21}$$

Pro tento stav je $p_i = \frac{1}{N}$, takže jeho entropie je rovna

$$S(\hat{\rho}) = \ln N, \tag{11.22}$$

což je maximální možná hodnota pro pravděpodobnostní rozdělení N prvků. V tomto stavu mají všechny výsledky měření stejnou pravděpodobnost (rovnou $\frac{1}{N}$) pro všechny pozorovatelné s prostým spektrem. V tomto smyslu maximálně smíšený stav nenese žádnou informaci o výsledcích měření.

Dekoherence

Nenulové mimodiagonální prvky matice hustoty se často označují jako kvantové koherence. Proces ztráty těchto nediagonálních prvků se nazývá dekoherence. Důsledkem dekoherence je ztráta kvantových efektů jako např. vymizení interference. Uvažujme dvouštěrbinový experiment. Stav částice po průchodu štěrbinou j označíme jako $|\psi_j\rangle$ (předpokládáme, že $\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij}$). Když není možné rozlišit, kterou štěrbinou částice prošla, je její stav popsán koherentní superpozici

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle\right),$$

což je ekvivalentní matici hustoty

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| = \frac{1}{2}\Big(|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |\psi_1\rangle\langle\psi_2| + |\psi_2\rangle\langle\psi_1| + |\psi_2\rangle\langle\psi_2|\Big)$$

Pravděpodobnostní rozdělení dopadů částice na stínítko je rovno (jde samozřejmě snadno určit i ze vztahu $w(x) = |\langle x|\psi\rangle|^2$)

$$\begin{aligned} w(x) &= \langle x|\hat{\rho}|x\rangle = \frac{1}{2}\Big(\langle x|\psi_1\rangle\langle\psi_1|x\rangle + \langle x|\psi_1\rangle\langle\psi_2|x\rangle + \langle x|\psi_2\rangle\langle\psi_1|x\rangle + \langle x|\psi_2\rangle\langle\psi_2|x\rangle\Big) \\ &= \frac{1}{2}\left(|\psi_1(x)|^2 + \psi_1(x)\overline{\psi}_2(x) + \overline{\psi}_1(x)\psi_2(x) + |\psi_2(x)|^2\right). \end{aligned}$$

Prostřední dva členy způsobují interferenční maxima a minima. V případě, že dojde k dekoherenci, např. interakcí s okolním prostředím nebo vlivem měření trajektorie částice, bude stav částice popsán klasickou statistickou směsí stavů $|\psi_1\rangle$ a $|\psi_2\rangle$

$$\hat{\rho}' = \frac{1}{2}\left(|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |\psi_2\rangle\langle\psi_2|\right),$$

tedy jejich nekoherentní superpozicí. Pravděpodobnostní rozdělení dopadů částice na stínítko bude průměr pravděpodobností dopadu, kdy je otevřena vždy jen jedna štěrbina

$$w(x) = \langle x|\hat{\rho}'|x\rangle = \frac{1}{2}\Big(\langle x|\psi_1\rangle\langle\psi_1|x\rangle + \langle x|\psi_2\rangle\langle\psi_2|x\rangle\Big) = \frac{1}{2}\left(|\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2\right).$$

V důsledku dekoherence dojde ke ztrátě interferenčního obrazce.

Časový vývoj matice hustoty pro uzavřený systém

Pro uzavřený systém se čisté stavy vyvíjí s časem podle Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle. \tag{11.23}$$

Hermitovským sdružením dostaneme vývoj bra

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi(t)| = \langle\psi(t)|\hat{H}. \tag{11.24}$$

Pro matici hustoty, která má v čase $t = 0$ tvar (11.4) platí

$$\hat{\rho}(t) = \sum_i p_i|\psi_i(t)\rangle\langle\psi_i(t)|. \tag{11.25}$$

Určíme časovou derivaci, využijeme Schrödingerovy rovnice (11.23), (11.24) a nalezneme

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} &= \sum_i p_i\left(i\hbar\left(\frac{\partial|\psi_i(t)\rangle}{\partial t}\right)\langle\psi_i(t)| + i\hbar|\psi_i(t)\rangle\left(\frac{\partial\langle\psi_i(t)|}{\partial t}\right)\right) \\ &= \sum_i p_i\left(\hat{H}|\psi_i(t)\rangle\langle\psi_i(t)| - |\psi_i(t)\rangle\langle\psi_i(t)|\hat{H}\right) \\ &= i\hbar\left[\hat{H}, \hat{\rho}\right]. \end{aligned} \tag{11.26}$$

To je tzv. von Neumannova rovnice. Je kvantovou analogií Liovillovy rovnice z klasické statistické mechaniky, která popisuje časový vývoj pravděpodobnostního rozdělení na fázovém prostoru

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \sum_i\left(\frac{\partial H}{\partial x_i}\frac{\partial w}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial w}{\partial x_i}\right) = \{H, w\}. \tag{11.27}$$

Matice hustoty pro spin $\frac{1}{2}$

Jako příklad si ukážeme matici hustoty pro částici se spinem $\frac{1}{2}$, kdy $\mathcal{H} = \text{Span}\ (|z,+\rangle, |z,-\rangle) \simeq \mathbb{C}^2$. Stejný popis lze použít pro jakýkoli kvantový systém s dim $\mathcal{H} = 2$, ale pro spin $\frac{1}{2}$ je interpretace nejnázornější. Budeme pracovat v bázi vlastních vektorů $\hat{S}_z$, tj.

$$|z,+\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |z,-\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{11.28}$$

Operátor $\hat{\rho}$ je pak reprezentován 2×2 maticí ρ. V prostoru 2×2 matic lze zvolit bázi tvořenou jednotkovou maticí I a Pauliho maticemi σ_j. Matici hustoty ρ tak určitě můžeme zapsat ve tvaru

$$\rho = aI + b_j\sigma_j. \tag{11.29}$$

Připomeňme, že pro Pauliho matice platí vztahy

$$\sigma_j = \sigma_j^\dagger, \quad \text{Tr}\ \sigma_j = 0, \tag{11.30}$$

$$\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij}I + i\varepsilon_{ijk}\sigma_k. \tag{11.31}$$

Z (11.30) plyne

$$b_j \in \mathbb{R}, \quad a = \frac{1}{2}. \tag{11.32}$$

Střední hodnoty Pauliho matic ve stavu ρ jsou díky (11.31) rovny

$$\langle\sigma\rangle_\rho = \text{Tr}\ (\sigma\rho) = \text{Tr}\ (a\sigma_i + b_j\sigma_i\sigma_j) = b_i\text{Tr}\ I = 2b_i. \tag{11.33}$$

Zavedeme-li vektor polarizace $\vec{p}$ se složkami

$$p_i = \langle\sigma_i\rangle_\rho, \tag{11.34}$$

pak platí $b_i = \frac{1}{2}p_i$. Obecná matice hustoty pro spin $\frac{1}{2}$ má tedy tvar

$$\rho(\vec{p}) = \frac{1}{2}(I + \vec{p}\cdot\vec{\sigma}) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+p_3 & p_1 - ip_2 \\ p_1 + ip_2 & 1 - p_3 \end{pmatrix}. \tag{11.35}$$

Vlastní čísla matice (11.35) jsou

$$\lambda_\pm = \frac{1 \pm p}{2}, \quad p = \sqrt{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}. \tag{11.36}$$

Aby ρ byla legitimní matice hustoty, musí být pozitivní, tj. její vlastní čísla musí být nezáporná. To je splněno pokud

$$p^2 = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 \leq 1. \tag{11.37}$$

Tato nerovnost definuje tzv. Blochovu sféru. Povrch sféry odpovídá čistým stavům, protože

$$\rho^2 = \frac{1}{4}\left(I + 2p_i\sigma_i + \underbrace{p_ip_j\sigma_i\sigma_j}_{p^2I}\right) = \frac{1}{4}\left((1+p^2)I + 2\vec{p}\cdot\vec{\sigma}\right) \tag{11.38}$$

a tedy

$$\mathrm{Tr}\ \rho^2 = \frac{1}{2}(1+p^2) \stackrel{!}{=} 1 \iff p^2 = 1. \tag{11.39}$$

Vnitřek Blochovy sféry tvoří smíšené stavy.

Řekněme, že budeme měřit projekci spinu do směru určeného jednotkovým vektorem $\vec{n}$. Jsou dva možné výsledky, projekce může být buď kladná nebo záporná. Výsledkům odpovídají stavy $|\vec{n},\pm\rangle$, pro které platí

$$\hat{S}_{\vec{n}}|\vec{n},\pm\rangle = \frac{\hbar}{2}\vec{n}\cdot\vec{\sigma}|\vec{n},\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|\vec{n},\pm\rangle. \tag{11.40}$$

Vektory polarizací těchto čistých stavů jsou $\pm\vec{n}$. Z definice (11.34) totiž plyne

$$\vec{n}\cdot\vec{p} = n_i p_i = n_i\langle\vec{n},\pm|\sigma_i|\vec{n},\pm\rangle = \langle\vec{n},\pm|\vec{n}\cdot\vec{\sigma}|\vec{n},\pm\rangle = \pm 1. \tag{11.41}$$

Protože oba vektory $\vec{n}$ a $\vec{p}$ mají velikost 1, musí být $\vec{p} = \pm\vec{n}$. Projektor na stav $|\vec{n},\pm\rangle$ tedy odpovídá matici hustoty (11.35) s $\vec{p} = \pm\vec{n}$

$$\hat{P}_{\vec{n},\pm} = |\vec{n},\pm\rangle\langle\vec{n},\pm| \equiv \rho(\vec{n}) = \frac{1}{2}\left(I \pm \vec{n}\cdot\vec{\sigma}\right). \tag{11.42}$$

Pravděpodobnosti naměření kladné nebo záporné projekce ve stavu $\rho(\vec{p})$ (11.7) jsou díky (11.30) a (11.31) rovny

$$\begin{aligned} W_{\rho(\vec{p}),\vec{n}\pm} &= \mathrm{Tr}\ \left(\hat{P}_{\vec{n},\pm}\hat{\rho}(\vec{p})\right) = \frac{1}{4}\mathrm{Tr}\ \left(\ (I\pm\vec{n}\cdot\vec{\sigma})\,(I+\vec{p}\cdot\vec{\sigma})\right) \\ &= \frac{1}{4}\mathrm{Tr}\ \left(I \pm \vec{n}\cdot\vec{\sigma} + \vec{p}\cdot\vec{\sigma} \pm \vec{n}\cdot\vec{p}\ I \pm i\varepsilon_{ijk}n_i p_j \sigma_k\right) \\ &= \frac{1}{2}(1\pm\vec{n}\cdot\vec{p}). \end{aligned} \tag{11.43}$$

Pro středí hodnotu projekce spinu do směru $\vec{n}$ pak nalezneme

$$\begin{aligned} \langle\hat{S}_{\vec{n}}\rangle_{\rho(\vec{p})} &= \mathrm{Tr}\ \left(\hat{S}_{\vec{n}\rho(\vec{p})}\right) = \frac{\hbar}{4}\mathrm{Tr}\ \left(\vec{n}\cdot\vec{\sigma}\,(I+\vec{p}\cdot\vec{\sigma})\right) = \frac{\hbar}{4}\mathrm{Tr}\ \left(\vec{n}\cdot\vec{\sigma}+\vec{n}\cdot\vec{p}\ I + i\varepsilon_{ijk}n_i p_j\sigma_k\right) \\ &= \frac{\hbar}{2}\vec{n}\cdot\vec{p} \quad \left(= \frac{\hbar}{2}(W_{\rho(\vec{p}),\vec{n}+} - W_{\rho(\vec{p}),\vec{n}-})\right). \end{aligned} \tag{11.44}$$

Ze vztahů (11.43) je vidět rozdíl mezi čistými a smíšenými stavy pro spin $\frac{1}{2}$. Pro čistý stav ($p = 1$) existuje směr $\vec{n}$, do kterého s pravděpodobností 1 naměříme kladnou projekci - je samozřejmě identický s vektorem polarizace stavu $\vec{p}$. Pro smíšené stavy ($p < 1$) takový směr $\vec{n}$ neexistuje, protože $\vec{n}\cdot\vec{p} < 1$. Ve smíšeném stavu tak můžeme s nenulovou pravděpodobností naměřit kladnou i zápornou projekci spinu do libovolného směru. Speciálně, pro $\vec{p} = 0$ je pravděpodobnost naměření kladné i záporné hodnoty do libovolného směru $\vec{n}$ stejná

$$W_{\rho(0),\vec{n}\pm} = \frac{1}{2}. \tag{11.45}$$

Matice hustoty pro $\vec{p} = 0$ je násobkem jednotkové matice

$$\rho(0) = \frac{1}{2} I, \tag{11.46}$$

a je to tedy maximálně smíšený stav, který nenese žádnou informaci o hodnotě projekce spinu.

Na matici hustoty lze vidět analogii mezi stavy částice se spinem $\frac{1}{2}$ a polarizačními stavy světla. Čisté stavy odpovídají úplně polarizovanému světlu, smíšené částečně polarizovanému světlu a maximálně smíšený stav odpovídá zcela nepolarizovanému světlu. Není to náhoda, polarizace světla je na kvantové úrovni určená projekcí spinu fotonu na jeho směr šíření (tzv. helicitou). Foton má sice spin 1, ale protože se jedná o částici s nulovou klidovou hmotností, helicita může nabývat jen hodnot ± 1. Kladná helicita odpovídá pravotočivé polarizaci, záporná levotočivé.

Uvažujme nyní spin $\frac{1}{2}$ ve stavu $\rho(\vec{p})$ (11.35), na kterém provedeme měření spinu do osy z. Pravděpodobnosti výsledků měření jsou podle (11.43) rovny

$$W_{\rho(\vec{p}),z\pm} = \frac{1}{2}(1 \pm p_3). \tag{11.47}$$

Řekněme, že naměříme kladnou projekci, stav po měření bude podle (11.11) odpovídat čistému stavu $|z,+\rangle$

$$\hat{\rho}_{z,+} = \frac{\hat{P}_{z,+}\hat{\rho}\hat{P}_{z,+}}{\mathrm{Tr}\left(\hat{P}_{z,+}\hat{\rho}\hat{P}_{z,+}\right)} = \frac{|z,+\rangle\langle z,+|\hat{\rho}|z,+\rangle\langle z,+|}{\langle z,+|\hat{\rho}|z,+\rangle} = |z,+\rangle\langle z,+| \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{11.48}$$

Pokud provedeme měření ale nemůžeme rozlišit výsledek, pak stav je podle (11.12) roven

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_z &= \hat{P}_{z,+}\hat{\rho}\hat{P}_{z,+} + \hat{P}_{z,-}\hat{\rho}\hat{P}_{z,-} = |z,+\rangle\langle z,+|\hat{\rho}|z,+\rangle\langle z,+| + |z,-\rangle\langle z,-|\hat{\rho}|z,-\rangle\langle z,-| \\ &= W_{\rho(\vec{p}),z+}|z,+\rangle\langle z,+| + W_{\rho(\vec{p}),z-}|z,-\rangle\langle z,-| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+p_3 & 0 \\ 0 & 1-p_3 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{11.49}$$

Na závěr tohoto příkladu uvažujme časový vývoj matice hustoty (11.35) s hamiltoniánem daným maticí

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} = \frac{E_1 + E_2}{2} I + \frac{E_1 - E_2}{2}\sigma_3. \tag{11.50}$$

(Pro spin $\frac{1}{2}$ v homogenním magnetickém poli ve směru osy z by platilo $H = \mu_0 B \sigma_3$, tj. $E_1 = \mu_0 B$ a $E_2 = -\mu_0 B$.) Z von Neumannovy rovnice (11.26) dostaneme

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\rho}{\partial t} &= [H,\rho] = \frac{E_1 - E_2}{4}\,[\sigma_3, p_i\sigma_i] \\ &= \frac{E_1 - E_2}{2}(p_1\sigma_2 - p_2\sigma_1), \end{aligned} \tag{11.51}$$

což můžeme maticově zapsat ve tvaru

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{p}_3 & \dot{p}_1 - i\dot{p}_2 \\ \dot{p}_1 + i\dot{p}_2 & -\dot{p}_3 \end{pmatrix} = (E_1 - E_2) \begin{pmatrix} 0 & p_1 - ip_2 \\ -(p_1 - ip_2) & 0 \end{pmatrix}. \tag{11.52}$$

Ihned vidíme, že třetí složka vektoru polarizace je konstantní

$$\dot{p}_3 = 0 \Longrightarrow p_3(t) = p_3. \tag{11.53}$$

Označíme si $z = p_1 - ip_2$, rovnice (11.52) jsou pak ekvivalentní

$$i\hbar\dot{z} = (E_1 - E_2)z \longrightarrow z(t) = z(0)e^{-\frac{i}{\hbar}(E_1-E_2)t}. \tag{11.54}$$

Matice hustoty v čase t je pak rovna

$$\rho(t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + p_3 & (p_1 - ip_2)e^{-\frac{i}{\hbar}(E_1-E_2)t} \\ (p_1 + ip_2)e^{\frac{i}{\hbar}(E_1-E_2)t} & 1 - p_3 \end{pmatrix} = \rho(\vec{p}(t)), \tag{11.55}$$

kde vektor polarizace v čase t má tvar (zavedli jsme $\alpha = \frac{E_1-E_2}{\hbar}$)

$$\begin{aligned} p_1(t) &= p_1 \cos\alpha t - p_2 \sin\alpha t, \\ p_2(t) &= p_1 \sin\alpha t + p_2 \cos\alpha t, \\ p_3(t) &= p_3. \end{aligned} \tag{11.56}$$

Časový vývoj odpovídá rotaci vektoru polarizace o úhel αt okolo osy z

$$\vec{p}^T(t) = R_z(\alpha t)\vec{p}^T = \begin{pmatrix} \cos\alpha t & -\sin\alpha t & 0 \\ \sin\alpha t & \cos\alpha t & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_1 \cos\alpha t - p_2 \sin\alpha t \\ p_1 \sin\alpha t + p_2 \cos\alpha t \\ p_3 \end{pmatrix}. \tag{11.57}$$

Matice hustoty složeného kvantového systému, redukované stavy

Uvažujme kvantový systém složený ze dvou částic A, B, s Hilbertovými prostory $\mathcal{H}_A$ a $\mathcal{H}_B$, tj. celkový Hilbertův prostor je $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$. Označíme ON bázi v $\mathcal{H}_A$ pomocí ketů $|m\rangle$ a ON bázi v $\mathcal{H}_B$ pomocí $|\mu\rangle$. Báze v $\mathcal{H}$ je potom tvořena vektory $|m\rangle \otimes |\mu\rangle \equiv |m, \mu\rangle$. Připomeňme nejprve popis čistých stavů složeného systému. Obecný stav lze zapsat v bázi $\{|m, \mu\rangle\}$ jako superpozici

$$|\Psi\rangle = \sum_{m,\mu} \alpha_{m,\mu} |m, \mu\rangle, \quad \alpha_{m,\mu} = \langle m, \mu|\Psi\rangle.$$

Řekneme, že stav $|\Psi^{(sep)}\rangle$ je separovaný (faktorizovaný), pokud existují $|\psi_1\rangle \in \mathcal{H}_A$ a $|\psi_2\rangle \in \mathcal{H}_B$ takové, že platí

$$|\Psi^{(sep)}\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle.$$

Pokud $|\Psi\rangle$ nelze zapsat v tomto tvaru, pak se stav nazývá provázaný (anglicky entangled).

Smíšené stavy rozdělíme analogicky. Obecný smíšený stav je matice hustoty $\hat{\rho}$ na $\mathcal{H}$, tj. pozitivní hermitovský operátor s jednotkovou stopou. V bázi $\{|m,\mu\rangle\}$ má tvar

$$\hat{\rho} = \sum_{m,\mu,n,\nu} \rho_{m\mu,n\nu}|m,\mu\rangle\langle n,\nu|, \quad \rho_{m\mu,n\nu} = \langle m,\mu|\hat{\rho}|n,\nu\rangle. \tag{11.58}$$

Pokud existují matice hustoty $\hat{\rho}_1$ a $\hat{\rho}_2$ působící na $\mathcal{H}_A$ a $\mathcal{H}_B$ takové, že platí

$$\hat{\rho}^{(sep)} = \hat{\rho}_1 \otimes \hat{\rho}_2, \tag{11.59}$$

pak smíšený stav $\hat{\rho}^{(sep)}$ je separabilní. Pokud takový rozklad neexistuje pak stav $\hat{\rho}$ je provázaný.

Uvažujme nyní otázku, jak popsat stav částice A, resp. B, pokud známe stav složeného systému $\hat{\rho}$. Označme tyto tzv. redukované stavy jako $\hat{\rho}_A$, resp. $\hat{\rho}_B$. Redukované stavy jsou určeny požadavkem, aby výsledky měření všech lokálních pozorovatelných na částici A (B) byly v redukovaném stavu $\hat{\rho}_A$ ($\hat{\rho}_B$) stejné, jako ve stavu $\hat{\rho}$, tj.

$$\forall \quad \hat{C}^{(A)} = \hat{C}_A \otimes \hat{I}_B, \quad \langle \hat{C}^{(A)}\rangle_{\hat{\rho}} = \langle \hat{C}_A\rangle_{\hat{\rho}_A}, \tag{11.60}$$

analogicky pro $\hat{\rho}_B$. Pro maticové elementy lokální pozorovatelné na částici A platí

$$C^{(A)}_{m\mu,n\nu} = \langle m,\mu|\hat{C}_A \otimes \hat{I}_B|n,\nu\rangle = \langle m|\hat{C}_A|n\rangle\delta_{\mu\nu} = C_{Am,n}\delta_{\mu\nu}.$$

Ze vztahu pro střední hodnotu pozorovatelné (11.10) dostaneme

$$\begin{aligned}\langle \hat{C}^{(A)}\rangle_{\hat{\rho}} &= \mathrm{Tr}\left(\hat{C}^{(A)}\hat{\rho}\right) = \mathrm{Tr}\left(\sum_{m,\mu,n,\nu}\sum_{k,l,\alpha}\rho_{m\mu,n\nu}C_{Ak,l}|m,\mu\rangle\underbrace{\langle n,\nu|k,\alpha\rangle}_{\delta_{nk}\delta_{\nu\alpha}}\langle l,\alpha|\right)\\ &= \sum_{m,\mu,n}\rho_{m\mu,n\mu}C_{An,m}.\end{aligned} \tag{11.61}$$

Podobným způsobem upravíme střední hodnotu $\hat{C}_A$

$$\begin{aligned}\langle \hat{C}_A\rangle_{\hat{\rho}_A} &= \mathrm{Tr}\left(\hat{C}_A\hat{\rho}_A\right) = \mathrm{Tr}\left(\sum_{m,n}\sum_{k,l}\rho_{Am,n}C_{Ak,l}|m\rangle\underbrace{\langle n|k\rangle}_{\delta_{nk}}\langle l|\right)\\ &= \sum_{m,n}\rho_{Am,n}C_{An,m}.\end{aligned} \tag{11.62}$$

Porovnáním (11.61) a (11.62) nalezneme maticové elementy redukovaného stavu $\hat{\rho}_A$

$$\langle m|\hat{\rho}_A|n\rangle = \rho_{Am,n} = \sum_{\mu}\rho_{m\mu,n\mu}. \tag{11.63}$$

Tímto vztahem se definuje částečná stopa přes systém B

$$\hat{\rho}_A = \mathrm{Tr}_B\ \hat{\rho} = \sum_{m,n}\left(\sum_{\mu}\rho_{m\mu,n\mu}\right)|m\rangle\langle n|. \tag{11.64}$$

Analogicky redukovaný stav částice B dostaneme částečnou stopou přes systém A

$$\hat{\rho}_B = \mathrm{Tr}_A\ \hat{\rho} = \sum_{\mu,\nu}\left(\sum_m \rho_{m\mu,m\nu}\right)|\mu\rangle\langle\nu|. \tag{11.65}$$

V případě, že je smíšený stav $\hat{\rho}$ separabilní (11.59), pak

$$\rho_{m\mu,n\nu} = \langle m,\mu|\hat{\rho}|n,\nu\rangle = \langle m,\mu|\hat{\rho}_1\otimes\hat{\rho}_2|n,\nu\rangle = \langle m|\hat{\rho}_1|n\rangle\langle\mu|\hat{\rho}_2|\nu\rangle = \rho_{1m,n}\rho_{2\mu,\nu} \tag{11.66}$$

a pro redukované stavy platí

$$\begin{aligned}
\hat{\rho}_A &= \sum_{m,n}\rho_{1m,n}\underbrace{\left(\sum_\mu \rho_{2\mu,\mu}\right)}_{\mathrm{Tr}\ \hat{\rho}_2=1}|m\rangle\langle n| = \sum_{m,n}\rho_{1m,n}|m\rangle\langle n| = \hat{\rho}_1,\\
\hat{\rho}_B &= \sum_{\mu,\nu}\rho_{2\mu,\nu}\underbrace{\left(\sum_m \rho_{1m,m}\right)}_{\mathrm{Tr}\ \hat{\rho}_1=1}|\mu\rangle\langle\nu| = \sum_{\mu,\nu}\rho_{2\mu,\nu}|\mu\rangle\langle\nu| = \hat{\rho}_2.
\end{aligned}$$

Separabilní stav je tedy roven tenzorovému součinu redukovaných stavů

$$\hat{\rho}^{(sep)} = \hat{\rho}_A\otimes\hat{\rho}_B.$$

V separabilním stavu jsou výsledky měření lokálních pozorovatelných na sobě zcela nezávislé, tj. nejsou mezi nimi žádné korelace. Naopak, provázané stavy $\hat{\rho}^{(ent)}$ nejsou rovny tenzorovému součinu redukovaných stavů a výsledky měření lokálních pozorovatelných jsou nějakým způsobem korelovány, jak uvidíme na následujícím příkladu.

Dva spiny $\frac{1}{2}$ v singletním stavu

Uvažujme dva spiny $\frac{1}{2}$ v singletním stavu

$$|\psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|z,+\rangle\otimes|z,-\rangle - |z,-\rangle\otimes|z,+\rangle\right).$$

Určíme nejprve matici hustoty tohoto stavu a redukované stavy ρ_A a ρ_B. Budeme pracovat v bázi$\{|z,\pm\rangle\otimes|z,\pm\rangle \equiv |z,\pm;z,\pm\rangle\}$ analogicky jako v (11.28), tj.

$$\begin{aligned}
|z,+\rangle\otimes|z,+\rangle &\equiv |z,+;z,+\rangle \equiv \begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix}, \quad |z,+\rangle\otimes|z,-\rangle \equiv |z,+;z,-\rangle \equiv \begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix},\\
|z,-\rangle\otimes|z,+\rangle &\equiv |z,-;z,+\rangle \equiv \begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix}, \quad |z,-\rangle\otimes|z,-\rangle \equiv |z,-;z,-\rangle \equiv \begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Matice hustoty singletního stavu je projektor

$$
\begin{aligned}
|\psi^-\rangle\langle\psi^-| &= \frac{1}{2}\Big(|z,+;z,-\rangle\langle z,+;z,-| - |z,+;z,-\rangle\langle z,-;z,+| - \\
&\quad - |z,-;z,+\rangle\langle z,+;z,-| + |z,-;z,+\rangle\langle z,-;z,+|\Big) \\
&\equiv \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned}
$$

Redukované stavy obou částic jsou stejné

$$\hat{\rho}_A = \hat{\rho}_B = \frac{1}{2}\Big(\,|z,+\rangle\langle z,+| + |z,-\rangle\langle z,-|\Big) = \frac{1}{2}\hat{I} \equiv \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

jsou rovny maximálně smíšenému stavu. Projekce spinů jednotlivých částic tedy nejsou vůbec určené - do všech směrů jsou pravděpodobnosti kladné i záporné projekce rovné $\frac{1}{2}$. Složený systém je ale v čistém (provázaném) stavu, takže obsahuje maximální možné množství informací. Ty jsou ve vzájemných korelacích mezi výsledky měření projekcí spinů jednotlivých částic. Pokud naměříme kladnou projekci spinu první částice do osy z, pak stav obou částic bude

$$\hat{\rho}_{\hat{S}_z^{(1)}=+\hbar/2} = |z,+;z,-\rangle\langle z,+;z,-|,$$

což je čistý stav kdy druhá částice má zápornou hodnotu projekci spinu do osy z. Pokud výsledek měření na první částici bude záporná projekce, pak stav bude

$$\hat{\rho}_{\hat{S}_z^{(1)}=-\hbar/2} = |z,-;z,+\rangle\langle z,-;z,+|.$$

To je opět čistý stav, kde druhá částice má kladnou projekci spinu do osy z. Výsledky měření projekcí spinu 1. a 2. částice do osy z jsou tedy perfektně antikorelovány. Stejné perfektní antikorelace platí pro měření projekce spinu do jakéhokoli směru $\vec{n}$ stejného pro obě částice. Singletní stav je totiž rotačně invariantní, tj.

$$\hat{R}^{(1)} \otimes \hat{R}^{(2)}|\psi^-\rangle = |\psi^-\rangle,$$

kde $\hat{R}^{(j)}$ jsou stejné rotace spinu částice j. Singlet je vlastní vektor celkového momentu hybnosti s vlastními čísly $j = m = 0$, takže pro všechny složky celkového momentu hybnosti platí $\hat{J}_k|\psi^-\rangle = 0$. Odsud skutečně plyne rotační invariance ($\vec{u}$ je libovolný jednotkový vektor)

$$\hat{R}^{(1)} \otimes \hat{R}^{(2)}|\psi^-\rangle = \hat{R}|\psi^-\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{u}\cdot\hat{\vec{J}}}|\psi^-\rangle = e^0|\psi^-\rangle = |\psi^-\rangle.$$

Označme $\hat{R}(\vec{n})$ rotaci, která změní $|z,\pm\rangle$ na $|\vec{n},\pm\rangle$

$$\hat{R}(\vec{n})|z,\pm\rangle = |\vec{n},\pm\rangle.$$

Díky rotační invarianci pak singletní stav můžeme zapsat ve tvaru

$$|\psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\vec{n},+\rangle \otimes |\vec{n},-\rangle - |\vec{n},-\rangle \otimes |\vec{n},+\rangle\right),$$

pro libovolný směr $\vec{n}$. Projekce spinů 1. a 2. druhé částice do stejného směru jsou tedy vždy perfektně antikorelovány.

Korelace jsou samozřejmě přítomné i v klasické fyzice, resp. v klasické teorii informace, ale kvantové korelace mohou být mnohem silnější. Situace jako u singletního stavu, kdy jsou veškeré informace obsaženy v korelacích, nemůže v klasické fyzice nastat. Uvažujme dvě klasické náhodné veličiny A a B s hodnotami a_m a b_μ, které nalezneme s pravděpodobností $p_{m,\mu}$. Pak můžeme zavést marginální rozdělení veličin A, resp. B, jako

$$p_m^A = \sum_\mu p_{m,\mu}, \quad p_\mu^B = \sum_m p_{m,\mu}.$$

Pokud jsou veličiny A a B nezávislé, pak $p_{m,\mu} = p_m^A p_\mu^B$, v opačném případě mohou být nějakým způsobem korelované. Lze ukázat, že v klasickém případě platí pro Shannonovy entropie pravděpodobnostních rozdělení následující nerovnosti

$$\max\left\{S(\left\{p_m^A\right\}), S(\left\{p_\mu^B\right\})\right\} \leq S(\{p_{m,\mu}\}) \leq S(\left\{p_m^A\right\}) + S(\left\{p_\mu^B\right\}).$$

Společné rozdělení $\{p_{m,\mu}\}$ musí tedy mít alespoň takovou entropii, jakou mají marginální rozdělení $\left\{p_m^A\right\}$, $\left\{p_\mu^B\right\}$. V kvantové mechanice to ale neplatí, jak je vidět na příkladu singletního stavu, kdy

$$\begin{aligned} S(|\psi^-\rangle\langle\psi^-|) &= 0, \\ S(\hat{\rho}_A) = S(\hat{\rho}_B) &= \ln 2. \end{aligned}$$

Pro von Neumannovy entropie matice hustoty složeného systému $\hat{\rho}$ a redukovaných stavů $\hat{\rho}_{A,B}$ lze odvodit tzv. Araki-Liebovy nerovnosti

$$|S(\hat{\rho}_A) - S(\hat{\rho}_B)| \leq S(\hat{\rho}) \leq S(\hat{\rho}_A) + S(\hat{\rho}_B).$$

Časový vývoj otevřeného systému

Pod pojmem otevřený kvantový systém se myslí systém interagující s nějakým okolním prostředím, rezervoárem. Celkový Hilbertův prostor je $\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_R$. Hamiltonán se dá zapsat ve tvaru

$$\hat{H} = \hat{H}_S \otimes \hat{I}_R + \hat{I}_S \otimes \hat{H}_R + \hat{H}_{SR}, \tag{11.67}$$

kde jednotlivé členy postupně popisují hamiltonián systému, rezervoáru a jejich interakci. Řekněme, že v čase $t = 0$ je systém připraven ve stavu ψ_S a rezervoár je ve stavu $|\psi_R\rangle$. Složený systém je pak v separabilním čistém stavu

$$|\Psi(0)\rangle = |\psi_S\rangle \otimes |\psi_R\rangle.$$

Evoluce složeného systému je unitární, tj. z čistého stavu $|\Psi(0)\rangle$ se za čas t stane jiný čistý stav $|\Psi(t)\rangle$ daný vztahem

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\Psi(0)\rangle,$$

kde $\hat{U}(t)$ je operátor časového vývoje pro celkový hamiltonián $\hat{H}$. V případě, kdy $\hat{H}$ nezávisí na čase, je $\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$. Časový vývoj systému nebo rezervoáru ale unitární není, protože $\hat{U}(t) \neq \hat{U}_S(t) \otimes \hat{U}_R(t)$ (pokud je interakční hamiltonián $\hat{H}_{SR}$ netriviální). Vlivem interakce totiž dojde k provázání systému a rezervoáru a stav složeného systému $|\Psi(t)\rangle$ nemusí být separabilní. Redukovaná matice hustoty systému v čase t $\hat{\rho}_S(t)$ je obecně smíšený stav. Vlivem interakce s okolím dochází k dekoherenci stavu systému.

Schrödingerovu rovnici pro složený systéme s hamiltoniánem (11.67) většinou neumíme vyřešit. Nicméně, pro redukovaný stav systému $\hat{\rho}_S$ lze za jistých předpokladů (slabá interakce systému a rezervoáru, Markovovská aproximace) odvodit tzv. řídící rovnici (v Lindbladovském tvaru)

$$\frac{\partial \hat{\rho}_S}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}'_S, \hat{\rho}_S\right] + \sum_i \gamma_i \left(\hat{L}_i \hat{\rho}_S \hat{L}_i^\dagger - \frac{1}{2}\left\{\hat{L}_i^\dagger \hat{L}_i, \hat{\rho}_S\right\}\right). \tag{11.68}$$

První část odpovídá unitárními vývoji s hamiltoniánen $\hat{H}'_S$ (je obecně různý od $\hat{H}_S$), druhá představuje neunitární část, kterou můžeme popsat např. dekoherenci nebo disipaci energie. $\hat{L}_i$ jsou tzv. Lindbladovy skokové operátory.

Příklady

Cvičení 35. *Kvantový LHO je v tepelné rovnováze s okolím o teplotě T. Nalezněte matici hustoty termálního stavu a určete střední hodnotu energie a pravděpodobnost naměření hodnoty energie $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$.*

Návod: Termální stav je kvantovou analogií pravděpodobnostního rozdělení na fázovém prostoru pro kanonický soubor

$$w(x,p) = \frac{1}{z} e^{-\beta H(x,p)}, \quad z = \int_\Gamma e^{-\beta H(x,p)} dx dp, \quad \beta = \frac{1}{kT}.$$

Matice hustoty termálního stavu má tedy tvar

$$\hat{\rho}_T = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{\text{Tr } e^{-\beta \hat{H}}}.$$

Budeme pracovat v energetické reprezentaci, tj. bázi vlastních vektorů hamiltoniánu LHO

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle.$$

Pro hamiltonián, resp. libovolnou funkci $\hat{H}$, máme spektrální rozklad

$$\hat{H} = \sum_{n=0}^{\infty} E_n |n\rangle\langle n| \quad \Longrightarrow \quad f(\hat{H}) = \sum_{n=0}^{\infty} f(E_n)|n\rangle\langle n|.$$

Odsud dostaneme

$$
\begin{aligned}
e^{-\beta\hat{H}} &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n}|n\rangle\langle n|, \\
\mathrm{Tr}\; e^{-\beta\hat{H}} &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} = e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}}\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n} = \frac{e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} = z.
\end{aligned}
$$

Matice hustoty termálního stavu LHO je tedy rovna

$$\hat{\rho}_T = \left(1-e^{-\beta\hbar\omega}\right)\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n}|n\rangle\langle n|.$$

Pro střední hodnotu energie LHO v termálním stavu dostaneme

$$
\begin{aligned}
\langle\hat{H}\rangle_{\hat{\rho}_T} &= \mathrm{Tr}\;\left(\hat{H}\hat{\rho}_T\right) = \left(1-e^{-\beta\hbar\omega}\right)\mathrm{Tr}\;\left(\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n}(m+\frac{1}{2})\hbar\omega|n\rangle\underbrace{\langle n|m\rangle}_{\delta_{nm}}\langle m|\right) \\
&= \left(1-e^{-\beta\hbar\omega}\right)\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n}(n+\frac{1}{2})\hbar\omega = \left(1-e^{-\beta\hbar\omega}\right)\hbar\omega\left(\frac{1}{2}\frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} + \sum_{n=0}^{\infty} n e^{-\beta\hbar\omega n}\right) \\
&= \frac{\hbar\omega}{2} - \left(1-e^{-\beta\hbar\omega}\right)\frac{\partial}{\partial\beta}\frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1}.
\end{aligned}
$$

Energii E_n naměříme s pravděpodobností

$$W_{\hat{\rho}_T,E_n} = \langle n|\hat{\rho}_T|n\rangle = \left(1-e^{-\beta\hbar\omega}\right)e^{-\beta\hbar\omega n} = \frac{1}{z}e^{-\beta E_n}.$$

Cvičení 36. *Uvažujte LHO s* $\omega = \frac{\hbar}{M}$ *v čistém stavu popsaném superpozicí vlastních vektorů hamiltoniánu*

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|0\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|1\rangle.$$

Jaká je střední hodnota energie a polohy LHO v tomto stavu? Provedeme měření energie bez rozlišení výsledků. Jaké budou střední hodnoty energie a polohy po tomto měření?

Návod: Pro střední hodnotu energie v čistém stavu $|\psi\rangle$ platí

$$\langle\hat{H}\rangle_\psi = \frac{1}{3}E_0 + \frac{2}{3}E_1 = \frac{7}{6}\hbar\omega.$$

Operátor polohy rozepíšeme pomocí posunovacích operátorů

$$\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{a}_+ + \hat{a}_-\right), \quad \hat{a}_\pm|n\rangle = \alpha_n^\pm|n\pm 1\rangle.$$

Pro střední hodnotu polohy pak najdeme

$$\begin{aligned}\langle \hat{X}\rangle_\psi &= \frac{1}{3}\underbrace{\langle 0|\hat{X}|0\rangle}_{0}+\frac{\sqrt{2}}{3}\left(\langle 1|\hat{X}|0\rangle+\langle 0|\hat{X}|1\rangle\right)+\frac{2}{3}\underbrace{\langle 1|\hat{X}|1\rangle}_{0}\\ &= \frac{1}{3}(\langle 1|\hat{a}_+|0\rangle+\langle 0|\hat{a}_-|1\rangle)=\frac{1}{3}(\alpha_0^+ +\alpha_1^-)=\frac{2}{3}.\end{aligned}$$

Matice hustoty čistého stavu před měřením energie je

$$\begin{aligned}\hat{\rho} &= |\psi\rangle\langle\psi| = \left(\frac{1}{\sqrt{3}}|0\rangle+\sqrt{\frac{2}{3}}|1\rangle\right)\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\langle 0|+\sqrt{\frac{2}{3}}\langle 1|\right)\\ &= \frac{1}{3}|0\rangle\langle 0|+\frac{\sqrt{2}}{3}(|0\rangle\langle 1|+|1\rangle\langle 0|)+\frac{2}{3}|1\rangle\langle 1|.\end{aligned}$$

Po měření energie bez rozlišení výsledků je LHO ve smíšeném stavu popsaném maticí hustoty

$$\hat{\rho}_{\hat{H}}=\sum_{n=0}^{\infty}\hat{P}_n\hat{\rho}\hat{P}_n=\sum_{n=0}^{\infty}|n\rangle\langle n|\hat{\rho}|n\rangle\langle n|=\frac{1}{3}|0\rangle\langle 0|+\frac{2}{3}|1\rangle\langle 1|.$$

Střední hodnota energie se nezmění

$$\langle \hat{H}\rangle_{\hat{\rho}_{\hat{H}}}=\mathrm{Tr}\,\left(\hat{H}\hat{\rho}\right)=\frac{1}{3}E_0+\frac{2}{3}E_1=\frac{7}{6}\hbar\omega,$$

protože závisí jen na diagonálních maticových elementech, které jsou pro $\hat{\rho}$ a $\hat{\rho}_{\hat{H}}$ stejné. Střední hodnota polohy naopak závisí na nediagonálních maticových elementech, protože operátor polohy je v energetické reprezentaci nediagonální. Střední hodnota polohy ve stavu $\hat{\rho}_{\hat{H}}$ je tedy nulová (využijeme invarianci stopy vůči cyklické záměně)

$$\begin{aligned}\langle \hat{X}\rangle_{\hat{\rho}} &= \mathrm{Tr}\,\left(\hat{X}\hat{\rho}_{\hat{H}}\right)=\mathrm{Tr}\,\left(\hat{X}\left(\frac{1}{3}|0\rangle\langle 0|+\frac{2}{3}|1\rangle\langle 1|\right)\right)=\mathrm{Tr}\,\left(\frac{1}{3}\langle 0|\hat{X}|0\rangle+\frac{2}{3}\langle 1|\hat{X}|1\rangle\right)\\ &= \frac{1}{3}\langle 0|\hat{X}|0\rangle+\frac{2}{3}\langle 1|\hat{X}|1\rangle=0.\end{aligned}$$

Cvičení 37. *Uvažujte dvouhladinový atom s bazickými stavy $|g\rangle$ a $|e\rangle$, které popisují základní a excitovaný stav s energiemi E_g a E_e. Atom interaguje s okolím a může dojít ke spontánní deexcitaci. Tato interakce je popsaná řídící rovnicí s jediným Lindbladovým operátorem $\hat{L}$ ($\gamma > 0$)*

$$\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}\left[\hat{H},\hat{\rho}\right]+\gamma\left(\hat{L}\hat{\rho}\hat{L}^\dagger-\frac{1}{2}\left\{\hat{L}^\dagger\hat{L},\hat{\rho}\right\}\right), \tag{11.69}$$

kde

$$\hat{H}=E_g|g\rangle\langle g|+E_e|e\rangle\langle e|,\quad \hat{L}=|g\rangle\langle e|,\quad \hat{L}^\dagger=|e\rangle\langle g|. \tag{11.70}$$

Najděte stav atomu v čase t, nejprve pro obecný počáteční stav a pak pro čistý stav $|e\rangle$. Jaký je limitní stav pro $t\to\infty$?

Návod: V bázi $\{|g\rangle, |e\rangle\}$ jsou operátory (11.70) reprezentovány maticemi

$$H = \begin{pmatrix} E_g & 0 \\ 0 & E_e \end{pmatrix}, \quad L = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad L^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Obecnou matici hustoty napíšeme jako

$$\rho = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad a, d \in \mathbb{R}, \quad b, c \in \mathbb{C}, \quad a + d = \mathrm{Tr}\ \rho = 1.$$

Řídící rovnici (11.69) lze po roznásobení upravit do tvaru

$$\begin{pmatrix} \dot{a} & \dot{b} \\ \dot{c} & \dot{d} \end{pmatrix} = \frac{i}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & \Delta b \\ -\Delta c & 0 \end{pmatrix} + \gamma \begin{pmatrix} d & -\frac{b}{2} \\ -\frac{c}{2} & -d \end{pmatrix},$$

kde jsme označili $\Delta = E_e - E_g$. Pro jednotlivé členy matice hustoty dostaneme diferenciální rovnice

$$\begin{aligned} \dot{a} &= \gamma d, \\ \dot{b} &= \frac{i}{\hbar} \Delta b - \frac{\gamma}{2} b, \\ \dot{c} &= -\frac{i}{\hbar} \Delta c - \frac{\gamma}{2} c, \\ \dot{d} &= -\gamma d. \end{aligned}$$

Řešení pro b, c, d lze napsat okamžitě

$$\begin{aligned} b(t) &= e^{\frac{i}{\hbar}\Delta t} e^{-\frac{\gamma}{2}t} b(0), \\ c(t) &= e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t} e^{-\frac{\gamma}{2}t} c(0), \\ d(t) &= e^{-\gamma t} d(0). \end{aligned}$$

Vidíme, že maticové elementy b, c, d exponenciálně klesají k nule. Pro a pak najdeme řešení

$$a(t) = a(0) + \left(1 - e^{-\gamma t}\right) d(0).$$

Obecná matice hustoty v čase t je pak rovna

$$\rho(t) = \begin{pmatrix} a(0) + (1 - e^{-\gamma t})\, d(0) & e^{\frac{i}{\hbar}\Delta t} e^{-\frac{\gamma}{2}t} b(0) \\ e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t} e^{-\frac{\gamma}{2}t} c(0) & e^{-\gamma t} d(0) \end{pmatrix}.$$

V limitě $t \to \infty$ bude matice hustoty

$$\lim_{t\to\infty} \rho(t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \equiv |g\rangle\langle g|,$$

nezávisle na počátečním stavu. Atom tedy vždy skončí v základním stavu $|g\rangle$. Pro počáteční stav $|e\rangle$ je $a(0) = b(0) = c(0) = 0$ a $d(0) = 1$. Stav atomu v čase t je potom

$$\rho(t) = \begin{pmatrix} 1 - e^{-\gamma t} & 0 \\ 0 & e^{-\gamma t} \end{pmatrix}.$$

Pravděpodobnost nalezení atomu v excitovaném stavu s časem klesá exponenciálně ($p_e = e^{-\gamma t}$), pravděpodobnost jeho nalezení v základním stavu naopak roste k jedné ($p_g = 1 - e^{-\gamma t}$).

Cvičení 38. *Uvažujte otevřenou dynamiku spinu $\frac{1}{2}$ s řídící rovnicí tvaru (11.68)*

1. *s jedním Lindbladovým operátorem ($\gamma > 0$)*

$$\hat{L} = |z,+\rangle\langle z,+|,$$

2. *se dvěma Lindbladovými operátory ($\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma > 0$)*

$$\begin{aligned} \hat{L}_1 &= |z,+\rangle\langle z,-| + |z,-\rangle\langle z,+|, \\ \hat{L}_2 &= |z,+\rangle\langle z,-| - |z,-\rangle\langle z,+|. \end{aligned}$$

V obou případech je hamiltonián spinu roven $\hat{H} = E|z,+\rangle\langle z,+| - E|z,-\rangle\langle z,-|$. Nalezněte řešení řídící rovnice s počáteční podmínkou $\hat{\rho}(\vec{p}(0)$ tvaru (11.35). Jak se s časem mění vektor polarizace spinu $\vec{p}(t)$? Jaká je jeho limitní hodnota pro $t \to \infty$?

Návod: Budeme pracovat v bázi vlastních vektorů $\hat{S}_z$ (11.28). Hamiltonián je pak reprezentován maticí

$$H = E \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Matici hustoty v čase t zapíšeme ve tvaru (11.35)

$$\rho(\vec{p}(t)) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + p_3(t) & p_1(t) - ip_2(t) \\ p_1(t) + ip_2(t) & 1 - p_3(t) \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + p_3(t) & z(t) \\ \overline{z}(t) & 1 - p_3(t) \end{pmatrix}.$$

Pro unitární část řídící rovnice dostaneme

$$-\frac{i}{\hbar}[H, \rho] = -i\frac{E}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & z \\ -\overline{z} & 0 \end{pmatrix}.$$

1. Matice Lindbladova operátoru je

$$L = L^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Řídící rovnici lze upravit do tvaru

$$\dot{\rho} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \dot{p}_3 & \dot{z} \\ \dot{\overline{z}} & -\dot{p}_3 \end{pmatrix} = -i\frac{E}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & z \\ -\overline{z} & 0 \end{pmatrix} - \frac{\gamma}{4} \begin{pmatrix} 0 & z \\ \overline{z} & 0 \end{pmatrix}.$$

Vidíme, že $\dot{p}_3 = 0$, tj. třetí složka vektoru polarizace se s časem nemění

$$p_3(t) = p_3(0).$$

Pro z máme diferenciální rovnici

$$\dot{z} = -\left(i\frac{2E}{\hbar} + \frac{\gamma}{2}\right) z,$$

jejím řešením je

$$z(t) = e^{-i\frac{2E}{\hbar}t} e^{-\frac{\gamma}{2}t} z(0).$$

Protože $z = p_1 - ip_2$, dostaneme pro složky vektoru polarizace řešení

$$\begin{aligned} p_1(t) &= \frac{z(t) + \overline{z}(t)}{2} = \cos\left(\frac{2E}{\hbar}t\right) e^{-\frac{\gamma}{2}t} p_1(0), \\ p_2(t) &= \frac{\overline{z}(t) - z(t)}{2i} = \sin\left(\frac{2E}{\hbar}t\right) e^{-\frac{\gamma}{2}t} p_2(0). \end{aligned}$$

První dvě složky polarizace s časem exponenciálně klesají k nule. Limitní stav má vektor polarizace $\vec{p}(\infty) = (0, 0, p_3(0))$, což odpovídá matici hustoty

$$\rho(\infty) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 + p_3(0) & 0 \\ 0 & 1 - p_3(0) \end{pmatrix}.$$

Dekoherence tohoto typu je tzv. rozfázování (dephasing) složek polarizace kolmých na osu z.

2. Matice Lindbladových operátorů jsou

$$L_1 = L_1^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_2 = -L_2^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Řídící rovnici lze upravit do tvaru

$$\dot{\rho} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \dot{p}_3 & \dot{z} \\ \dot{\overline{z}} & -\dot{p}_3 \end{pmatrix} = -i\frac{E}{\hbar}\begin{pmatrix} 0 & z \\ -\overline{z} & 0 \end{pmatrix} - \gamma\begin{pmatrix} 2p_3 & z \\ \overline{z} & -2p_3 \end{pmatrix}.$$

Diferenciální rovnice pro třetí složku

$$\dot{p}_3 = -4\gamma p_3$$

má řešení

$$p_3(t) = e^{-4\gamma t} p_3(0).$$

Podobně pro z máme rovnici

$$\dot{z} = -\left(i\frac{2E}{\hbar} + 2\gamma\right) z,$$

jejím řešením je

$$z(t) = e^{-i\frac{2E}{\hbar}t} e^{-2\gamma t} z(0).$$

První dvě složky vektoru polarizace jsou tedy

$$\begin{aligned} p_1(t) &= \cos\left(\frac{2E}{\hbar}t\right) e^{-2\gamma t} p_1(0), \\ p_2(t) &= \sin\left(\frac{2E}{\hbar}t\right) e^{-2\gamma t} p_2(0). \end{aligned}$$

Vidíme, že vektor polarizace klesá s časem k nule, tj. limitou je $\vec{p}(\infty) = (0, 0, 0)$, což odpovídá maximálně smíšenému (nepolarizovanému) stavu

$$\rho(\infty) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Tento typ dekoherence se nazývá depolarizace.