Л Е К Ц И Я 9

КОГЕРЕНТНЫЕ СОСТОЯНИЯ
Продолжение

Чтобы найти волновые функции состояний α в координатном представлении, можно умножить обе части последней формулы слева на $|x\rangle$ и учесть, что

$$\langle x|\alpha\rangle = \psi_\alpha(x),\quad \langle x|n\rangle = \psi_n(x).$$

Тогда получим

$$\psi_\alpha(x) = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\psi_n(x).$$

Просуммировать этот ряд можно, но хлопотливо. Поэтому будем действовать непосредственно. Ставим задачу на собственные значения оператора $\hat{a}_-$ в x -представлении:

$$\hat{a}_-\,\psi_\alpha(x) = \alpha\psi_\alpha(x),$$

или

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\hat{x}}{x_0} + i\,\frac{x_0}{\hbar}\hat{p}\right)\psi_\alpha(x) = \alpha\psi_\alpha(x),$$

или, в явном виде

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}} + \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}\frac{d}{dx}\right)\psi_\alpha(x) = \alpha\psi_\alpha(x).$$

Общее решение уравнения сразу находится разделением переменных:

$$\psi_\alpha(x) = A\ e^{-\left(\sqrt{\frac{\mu\omega}{2\hbar}}x-\alpha\right)^2}.$$

Обозначая $\mathrm{Re}\,\alpha\equiv\alpha_1$, $\mathrm{Im}\alpha\equiv\alpha_2$ и определяя обычным способом A из условия нормировки, найдем

$$\psi_\alpha(x) = \sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}e^{-i\alpha_1\alpha_2}e^{i\sqrt{\frac{2\mu\omega}{\hbar}}\alpha_2 x}\,e^{-\frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}x-\sqrt{2}\alpha_1\right)^2}.$$

Вводя еще обозначения

$$\tilde{x} \equiv \sqrt{\frac{2\hbar}{\mu\omega}}\alpha_1,\qquad \tilde{p} \equiv \sqrt{2\mu\hbar\omega}\,\alpha_2\,,$$

представим искомые волновые функции в виде

$$\psi_\alpha(x) = e^{-i\,\alpha_1\alpha_2}e^{\frac{i}{\hbar}\tilde{p}x}\,\psi_0(x-\tilde{x}),$$

где ψ_0 - волновая функция основного состояния осциллятора.

Состояния α, описываемые векторами $|\alpha\rangle$ (или собственными функциями $\psi_0(y)$ оператора $\hat{a}_-$, называются *когерентными состояниями*. Они обладают рядом замечательных свойств.

1. В состояниях α соотношение неопределенностей минимизируется:

$$\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2 .$$

2. Средние значения координаты (и импульса) в когерентных состояниях меняются во времени по классическому закону:

$$\langle x\rangle_\alpha (t) = x_{кл}(t) = A\cos(\omega t+\varphi).$$

3. Связь между средними x,p и E такая же, как в классике:

$$\langle H\rangle_\alpha = \frac{\langle p\rangle_\alpha^2}{2\mu} + \frac{\mu\omega^2}{2}\langle x\rangle_\alpha^2 .$$

4. «Волновые пакеты», отвечающие когерентным состояниям, не расплываются, т.е. дисперсия координаты (и импульса) остается постоянной.

Можно сказать, что когерентные состояния *наиболее близки к классическим*. Они были открыты в связи с исследованием свойств когерентности лазерного излучения, а сейчас используются в самых разных разделах современной физики, в том числе и в физике низких температур.

СМЕШАННЫЕ СОСТОЯНИЯ И МАТРИЦА ПЛОТНОСТИ

До сих пор мы описывали состояния микросистемы векторами гильбертова пространства $|\psi\rangle$ и волновыми функциями $\psi(q)$ в каком-то заданном q-представлении. Это есть максимально полное квантовомеханическое описание состояний, и они называются *чистыми состояниями*. Но бывает и так, что для некоторых состояний мы не располагаем всей информацией, необходимой для сопоставления им векторов $|\psi\rangle$ или волновых функций $\psi(q)$. Такие состояния называются *смешанными*, и их способ описания - иной.

Начнем с достаточно простого случая системы двух частиц 1 и 2. Для системы из одной частицы 1 пусть волновая функция есть $\psi^{(1)}(q_1)$, а базисные функции обозначим как $\varphi_n^{(1)}(q_1)$, так что

$$\psi^{(1)}(q_1) = \sum_n C_n^{(1)} \varphi_n^{(1)}(q_1).$$

Для системы одной частицы 2 аналогично пусть волновая функция $\psi^{(2)}(q_2)$, а базис образует $\varphi_m^{(2)}(q_2)$:

$$\psi^{(2)}(q_2) = \sum_m C_m^{(2)} \varphi_m^{(2)}(q_2).$$

Если в двухчастичной системе 1-2 отдельные частицы не взаимодействуют, то ее волновая функция есть произведение одночастичных:

$$\psi(q_1,q_2) = \psi^{(1)}(q_1)\psi^{(2)}(q_2) = \sum_{n,m} C_n^{(1)}C_m^{(2)} \varphi_n^{(1)}(q_1)\varphi_m^{(2)}(q_2).$$

Но в общей ситуации, когда частицы взаимодействуют, полную волновую функцию нельзя представить в виде произведения одночастичных. Базис здесь образуют всевозможные произведения $\varphi_n^{(1)}(q_1)\varphi_m^{(2)}(q_2)$, и можно записать разложение

$$\psi(q_1,q_2) = \sum_{n,m} C_{nm}\varphi_{nm}(q_1,q_2) = \sum_{n,m} C_{nm} \varphi_n^{(1)}(q_1)\varphi_m^{(2)}(q_2).$$

Однако, коэффициенты C_{nm} уже нельзя представить в прежней форме

$$C_{nm} \neq C_n^{(1)} C_m^{(2)}.$$

Введем обозначение

$$\sum_m C_{nm} \varphi_m^{(2)}(q_2) \equiv \phi(q_2)$$

и представим общее разложение в форме

$$\psi(q_1,q_2) = \sum_n \phi_n(q_2)\varphi_n^{(1)}(q_1).$$

Пусть теперь нас интересуют характеристики частицы 1 в общей двухчастичной системе 1-2. Например, пусть нас интересует среднее значение какой-то наблюдаемой $\hat{F}^{(1)}$ этой частицы - скажем, ее импульса $\hat{p}^{(1)}$. Тогда в отсутствие взаимодействия мы получим:

$$\left\langle \hat{F}^{(1)} \right\rangle = \int dq_1 dq_2 \psi^*(q_1,q_2)\hat{F}^{(1)}\psi(q_1,q_2) = \int dq_1 \psi^{(1)*}(q_1)\hat{F}^{(1)}\psi^{(1)}(q_1)\underbrace{\int dq_2 \psi^{(2)*}(q_2)\psi^{(2)}(q_2)}_{=1}$$

$$= \int dq_1 \psi^{(1)*}(q_1)\hat{F}^{(1)}\psi^{(1)}(q_1) = \sum_{n,n'} C_n^{(1)*} C_{n'}^{(1)} \int dq_1 \varphi_n^{(1)*}\hat{F}^{(1)}\varphi_n^{(1)} \equiv$$

$$\equiv \sum_{n,n'} \rho_{nn'}^{(1)} \int dq_1 \varphi_n^{(1)*}\hat{F}^{(1)}\varphi_{n'}^{(1)} \equiv \sum_{n,n'} \rho_{nn'}^{(1)} \hat{F}_{nn'}^{(1)},$$

$$\rho_{nn'} \equiv C_n^{(1)*} C_{n'}^{(1)}.$$

Видим, что в случае невзаимодействующих частиц среднее значение наблюдаемой частицы 1 определяется только ее волновой функцией, а наличие частицы 2 вообще несущественно. Это и естественно, поскольку частицы не влияют друг на друга.

Но пусть теперь взаимодействие присутствует. Тогда

$$\left\langle \hat{F}^{(1)} \right\rangle = \int dq_1 dq_2 \psi^*(q_1,q_2)\hat{F}^{(1)}\psi(q_1,q_2) = \int dq_1 dq_2 \left\{ \sum_n \phi_n^*(q_2)\varphi_n^{(1)*}(q_1) \right\} \times$$

$$\times \hat{F}^{(1)} \left\{ \sum_{n'} \phi_{n'}(q_2)\varphi_{n'}^{(1)}(q_1) \right\} =$$

$$= \int dq_1 dq_2 \left\{ \sum_{n,n'} \phi_n^*(q_2)\phi_{n'}(q_2) \right\} \left\{ \varphi_n^{(1)*}(q_1)\hat{F}^{(1)}\varphi_{n'}^{(1)}(q_1) \right\} \equiv$$

$$\equiv \int dq_1 \sum_{n,n'} \rho_{nn'} \left\{ \varphi_n^{(1)*}(q_1)\hat{F}^{(1)}\varphi_{n'}^{(1)}(q_1) \right\} \equiv \sum_{n,n'} \rho_{nn'} \hat{F}_{nn'}^{(1)}.$$

Здесь введена *матрица плотности*

$$\rho_{nn'} \equiv \int dq_2 \phi^*_n(q_2)\varphi_{n'}^{(1)}(q_1).$$

Формально среднее от $\hat{F}^{(1)}$ вычисляется с ее помощью так же, как в предыдущем случае. Но если там (в отсутствие взаимодействия) матрица плотности $\rho^{(1)}_{nn'}$ определялась исключительно поведением частицы 1, то теперь (в общей ситуации) в нее уже входит и поведение частицы 2. Таким образом, при наличии взаимодействия состояние частицы 1 (с точки зрения возможности вычисления средних значений) не может быть описано какой-то волновой функцией вида $\psi(q_1)$. Это состояние описывается матрицей плотности, которая включает характеристики не только частицы 1, но и всей системы в целом. Такое состояние частицы 1 (но не всей системы!) и является смешанным. В нашем примере оно возникло потому, что, строго говоря, частица 1 не образует систему - она есть подсистема более широкой системы 1-2. И естественно, что ее описание самой по себе будет неполным.

Теперь мы хотим ввести понятие смешанного состояния и его характеризации в самой общей ситуации. Для этого начнем с чистого состояния ψ, которое описывается вектором $|\psi\rangle$ и несколько переформулируем известные нам положения. Интересовать нас будут прежде всего средние значения наблюдаемых в заданных состояниях. В обычном формализме

$$\langle F\rangle_\psi = \langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle.$$

Введем ортонормированный базис $|n\rangle$ и перепишем эту формулу, два раза используя разложение единицы:

$$\langle F\rangle_\psi = \langle\psi|\hat{I}\,\hat{F}\,\hat{I}|\psi\rangle = \sum_{n,n'}\langle\psi|n\rangle\langle n|\hat{F}|n'\rangle\langle n'|\psi\rangle \equiv \sum_{n,n'}\left\{\langle n'|\psi\rangle\langle\psi|n\rangle\right\}\langle n|\hat{F}|n'\rangle .$$

Величина

$$|\psi\rangle\langle\psi| \equiv \hat{\rho}_\psi$$

есть оператор - проектор на вектор $|\psi\rangle$. Назовем его *статистическим оператором* данного чистого состояния ψ. Величины

$$\langle n'|\psi\rangle\langle\psi|n\rangle \equiv \langle n'|\rho_\psi|n\rangle \equiv (\rho_\psi)_{n'n}$$

образуют матрицу статистического оператора. Назовем ее *матрицей плотности* данного чистого состояния ψ. Величины

$$\langle n|\hat{F}|n'\rangle \equiv F_{nn'}$$

образуют *матрицу оператора* $\hat{F}$ в заданном базисе. Таким образом,

$$\langle F\rangle_\psi = \sum_{n,n'}(\rho_\psi)_{n'n}F_{nn'} = \sum_{n'}(\hat{\rho}_\psi\hat{F})_{n'n'} ,$$

или

$$\langle F\rangle_\psi = \mathrm{Sp}(\hat{\rho}_\psi\hat{F}) .$$

Итак, среднее значение наблюдаемой F в состоянии ψ можно вычислять или задавая вектор состояния $|\psi\rangle$, или задавая статистический оператор $\hat{\rho}_\psi$ (матрицу плотности). Покажем, что это же справедливо и для вероятностей. Пусть нас интересует вероятность $W\psi(f)$ получить при измерении наблюдаемой F в состоянии ψ значение f. Считая для простоты записи спектр дискретным и простым, получим:

$$W_\psi(f) = \left|\langle f|\psi\rangle\right|^2 = \langle\psi|f\rangle\langle f|\psi\rangle \equiv \langle\psi|\hat{\pi}_f|\psi\rangle,$$

где введен оператор проектирования

$$\hat{\pi}_f \equiv |f\rangle\langle f|$$

на собственный вектор $|f\rangle$ оператора $\hat{F}$, отвечающий интересующему нас собственному значению f. Вычисление вероятности сводится к вычислению среднего значения этого оператора в состоянии ψ, а потому, согласно предыдущему,

$$W_\psi(f) = \mathrm{Sp}(\hat{\rho}_\psi \hat{\pi}_f).$$

РЕЗЮМЕ

Чистое состояние можно задавать как вектором $|\psi\rangle$, так и статистическим оператором $\hat{\rho}_\psi$ (матрицей плотности).

Свойства статистического оператора $\hat{\rho}_\psi$:

1. Как и всякий оператор, он есть эрмитов оператор:

$$\hat{\rho}_\psi^{\,+} = \hat{\rho}_\psi.$$

2. Статистический оператор - положительный:

$$\langle\varphi|\hat{\rho}_\psi|\varphi\rangle \geq 0, \forall\varphi \in \mathrm{H}.$$

Действительно,

$$\langle\varphi|\hat{\rho}_\psi|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle\langle\psi|\varphi\rangle = |\langle\psi|\varphi\rangle|^2 \geq 0.$$

3. Диагональные матричные элементы его лежат в интервале (0,1):

$$0 \leq \langle n|\hat{\rho}_\psi|n\rangle \leq 1.$$

Это сразу следует из того, что

$$\langle n|\hat{\rho}_\psi|n\rangle = |\langle n|\psi\rangle|^2 \equiv |\psi_n|^2.$$

Справа величина неотрицательная, а сумма всех таких величин 1.

4. След статистического оператора равен 1:

$$\mathrm{Sp}\,\hat{\rho}_\psi = 1.$$

Действительно,

$$\mathrm{Sp}\,\hat{\rho}_\psi = \mathrm{Sp}(\hat{\rho}_\psi \hat{I}) = \langle\psi|I|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1.$$

5. Статистический оператор чистого состояния - идемпотентный:

$$\hat{\rho}_\psi^{\,2} = \hat{\rho}_\psi.$$

Это следует из того, что двойное проектирование ничего нового не дает.

6. Статистический оператор подчиняется уравнению

$$i\,\hbar \frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}_\psi = \left[\hat{H}, \hat{\rho}_\psi\right].$$

Это следует из его определения и из уравнения Шредингера:

$$i\,\hbar \frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}_\psi =$$

$$= i\,\hbar \frac{\partial}{\partial t}\left\{\left|\psi\right\rangle\left\langle\psi\right|\right\} = i\hbar\frac{\partial\left|\psi\right\rangle}{\partial t}\left\langle\psi\right| + \left|\psi\right\rangle i\hbar\frac{\partial\left\langle\psi\right|}{\partial t} = \hat{H}\left|\psi\right\rangle\left\langle\psi\right| - \left|\psi\right\rangle\left\langle\psi\right|\hat{H} =$$

$$i = \hat{H}\,\hat{\rho}_\psi - \hat{\rho}_\psi\,\hat{H} = \left[\hat{H}, \hat{\rho}_\psi\right].$$

Проведенное рассмотрение делает естественным следующее обобщение.

Основной постулат квантовой механики

Произвольное состояние квантовомеханической системы описывается статистическим оператором $\hat{\rho}$ общего вида, т.е. некоторым эрмитовым положительным оператором с единичным следом:

$$\hat{\rho}^{+} = \hat{\rho}\,, \quad \hat{\rho} \geq 0, \quad \mathrm{Sp}\,\hat{\rho} = 1.$$

Физический смысл *смешанных состояний*, т.е. состояний, описываемых статистическими операторами общего вида, устанавливает следующее важнейшее утверждение:

Всякий статистический оператор может быть представлен как

$$\hat{\rho} = \sum_a \rho_a \hat{\rho}_{\psi_a}\,,$$

где $\hat{\rho}_{\psi_a}$ - статистические операторы (проекторы) чистых состояний ψ, а ρ_a - числа со свойствами

$$\rho_a \geq 0,\ \sum_a \rho_a = 1.$$

Доказательство основывается на математическом результате, что всякий эрмитов оператор с конечным следом (такие операторы называются ядерными) имеет чисто дискретный спектр. Ставим задачу на собственные значения

$$\hat{\rho}\,|\psi_a\rangle = \rho_a\,|\psi_a\rangle,$$

где числа ρ_a вещественны ($\hat{\rho}^{+} = \hat{\rho}$), а векторы $|\psi_a\rangle$ - ортонормированы

$$\langle\psi_a|\psi_{a'}\rangle = \delta_{aa'}$$

и образуют базис:

$$\sum_a \left|\psi_a\right\rangle\left\langle\psi_a\right| = \hat{I}\,.$$

Умножаем обе части уравнения справа на $\langle\psi_a|$, суммируем по a и учитываем разложение единицы:

$$\hat{\rho} = \sum_a \rho_a \left|\psi_a\right\rangle\left\langle\psi_a\right| = \sum_a \rho_a \hat{\rho}_{\psi_a}\,.$$

Для чисел ρ_a имеем:

$$\rho_a \equiv \rho_a \langle\psi_a|\psi_a\rangle = \langle\psi_a|\rho_a|\psi_a\rangle = \langle\psi_a|\hat{\rho}\ |\psi_a\rangle \geq 0,$$

где использовано уравнение на собственные значения и положительность $\hat{\rho}$.

Наконец, вводя произвольный ортонормированный базис, найдем:

$$\sum_a \rho_a = \sum_a \rho_a \langle\psi_a|\psi_a\rangle = \sum_a\sum_n \rho_a \langle\psi_a|n\rangle\langle n|\psi_a\rangle = \sum_n\sum_a \rho_a \langle n|\psi_a\rangle\langle\psi_a|n\rangle$$

$$= \sum_n \langle n|\left\{\sum_a \rho_a \hat{\rho}_{\psi a}\right\}|n\rangle = \sum_n \langle n|\hat{\rho}|n\rangle = Sp\hat{\rho} = 1,$$

и утверждение доказано.

В основной постулат входит, разумеется, тот же способ вычисления средних значений в произвольном состоянии, что и для чистых состояний:

$$\langle F\rangle_\rho = \mathrm{Sp}(\hat{\rho}\ \hat{F}).$$

Преобразуем эту формулу:

$$\langle F\rangle_\rho = \mathrm{Sp}(\hat{\rho}\ \hat{F}) = \mathrm{Sp}\left\{(\sum_a \rho_a \hat{\rho}_{\psi_a})\hat{F}\right\} = \sum_a \rho_a Sp(\hat{\rho}_{\psi_a}\hat{F}) = \sum_a \rho_a \langle F\rangle_a ,$$

т.е.

$$\langle F\rangle_\rho = \sum_a \rho_a \langle F\rangle_{\psi_a} .$$

Отсюда проистекает *великий смысл* смешанных состояний. Они соответствуют ансамблю, т.е. множеству копий одной и той же системы, каждая из которых находится в каком-то квантовом состоянии ψ_a, но не известно, в каком именно. Об этом мы можем судить лишь вероятностно, причем вероятность того, что при измерении F мы «наткнемся» на систему в состоянии ψ_a равна как раз ρ_a. Тогда среднее значение F в смешанном состоянии будет вычисляться как средневзвешенное отдельных средних $\langle F\rangle_a$ с весами ρ_a:

$$\rho_a \geq 0, \quad \sum_a \rho_a = 1.$$

Обычная терминология здесь такая. Если у статистического оператора $\hat{\rho}$ есть хотя бы два различных собственных значения ρ_a, то состояние называется *смешанным*. Если же у него есть только одно собственное значение (тогда оно равно 1), то состояние - чистое. Последнее естественно, ибо тогда $\hat{\rho}$ сводится к $\hat{\rho}_\psi$, а мы видели, что задание $\hat{\rho}_\psi$ - один из возможных способов описания обычных (чистых) состояний.

Если состояние смешанное, то при вычислении средних приходится проводить *двоякое* усреднение. Первое из них (слагаемые $\langle F\rangle_a$ в последней формуле) - специфическое квантовомеханическое усреднение, от которого никуда не денешься. Оно присуще уже чистым состояниям и не имеет классического аналога. Второе усреднение (суммирование по a с весами ρ_a) проводится по ансамблю и связано лишь с неполнотой описания. Мы с ним встретились в изначальном примере, когда искусственно выщепили одну частицу из единой двухчастичной системы. Такое усреднение не является специфическим для квантовой механики. Оно присуще уже классической физике и составляет основу любого статистического подхода. Поэтому в квантовой механике главенствующая роль принадлежит именно чистым состояниям. А смешанные состояния широко используются в квантовой статистике, а также при описании поляризационных свойств пучков частиц (например, фотонов при наличии у света частичной поляризации).

И в заключение одно замечание технического характера. Найдем квадрат статистического оператора:

$$\hat{\rho}^2 = (\sum_a \rho_a \hat{\rho}_{\psi_a})^2 = (\sum_a \rho_a |\psi_a\rangle\langle\psi_a|(\sum_b \rho_b |\psi_b\rangle\langle\psi_b|) = \sum_{a,b} \rho_a\rho_b |\psi_a\rangle\langle\psi_a|\psi_b\rangle\langle\psi_b|$$

$$= \sum_{a,b} \rho_a\rho_b\delta_{ab} |\psi_a\rangle\langle\psi_b| = \sum_a \rho_a^2 |\psi_a\rangle\langle\psi_a|, \text{ т.е.}$$

$$\hat{\rho}^2 = \sum_a \rho^2{}_a \hat{\rho}_{\psi_a} .$$

Шпур находим сразу, учитывая, что $\mathrm{Sp}(\hat{\rho}_\psi) = 1$:

$$\mathrm{Sp}\ \hat{\rho}^2 = \sum_a \rho_a^2 .$$

А теперь вспомним, что

$$\hat{\rho}_a \geq 0, \sum_a \rho_a = 1.$$

Если состояние чистое, то отлично от нуля только одно $\hat{\rho}_a$, причем оно есть 1. Поэтому для чистого состояния

$$\mathrm{Sp}\ (\hat{\rho}^2)_{\text{чист}} = 1.$$

Для смешанного состояния есть несколько ненулевых $\hat{\rho}_a$. Каждое из них меньше 1, а потому $(\hat{\rho}^2{}_a) < \rho_a$. Это значит, что

$$\sum_a \rho_a^2 < \sum_a \rho_a = 1,$$

т.е. для смешанного состояния

$$\mathrm{Sp}(\hat{\rho}^2{}_{\text{смеш}}) < 1 .$$

В итоге получен критерий, позволяющий определить, не решая задачу на собственные значения оператора $\hat{\rho}$, описывает ли он чистое состояние, или смешанное.