Subject:
Year: Month: Date:

جلسه چهارم ۵/ ۱۲/ ۹۷

ادامه مبحث مکانیک کوانتومی ۲ «فصل ۲»: ماتریس چگالی

تا اینجا مسائل کوانتومی در حالت ایده‌آل بودن یا یک ساختار منزوی بوده. بین تعاملات بین و محیط نبود
سیستم و اطراف آن سیستم می‌شود محیط

در این حالت جدا کردن سیستم از محیط مشکل است مثل یک ذره در اصول ذره که 10^{23} ذره
و محیط و سیستم منزوی نیست
بین تعداد زیادی از ذره سیستم را تشکیل داده و باید مکانیک

بعد از دقت ... می‌گیریم

حالا هر چقدر ذرات را بیان کنیم و باید یک نمونه از بین آن‌ها

انتخاب کرد (آنسامبل = انتخاب مجموعه‌ای از دنیای شل هم) و مکانیک آن

آن بیل را بررسی می‌کنیم و آن را به باقی محیط تعمیم می‌دهیم با روابط آماری

برای گذر از مکانیک کلاسیک به دنیای کوانتومی

حالت ... به یک سیستم می‌دهیم از یک حالت به حالت دیگر اطلاعات عوض می‌شود بین هم تک

ذره باید اطلاعات کل 10^{23} ذره دیگر را داشته باشد بین نسبت دادن تک

حالت تک ذره گاه سخت و در بعضی موارد امکان پذیر نیست. بین و محیط

سیستم و محیط را با هم انتقال می‌کنیم

این طور یک سیستم ۱۰۰ تایی می‌گیریم و اطلاعاتی که به آن اطلاق می‌کنیم هم

برای سیستم ارائه می‌شود هم محیط چون عینا یعنی هم چنین حالت را دارد.

آن ویژگی که به چنین سیستمی نسبت می‌دهیم ماتریس چگالی است و کمیتی که هم زمان اطلاعات سیستم و محیط را با خودش دارد

اگر مجموعه ای از عملگرهای کوانتومی سازگار داشته باشیم $\{A, B, C\}$

سازگار یعنی $(X,P)\neq 0 \Rightarrow$

ویژه حالت مشترک دارند پس می توان آن ها

پس فرض کنیم مجموعه ای از مشاهده پذیرهای سازگار را هم زمان اندازه گرفت با قطعیت

$\{\hat{A}\ \hat{B}\ \hat{C}\}$ را در نظر بگیریم چون سازگارند ویژه حالت مشترک ψ_{ABC} را دارند

هم چنین اینطور فرض کنید دستگاه به گونه ای وجود دارد که عملاً غیر ممکن است که در یک بازه ی زمانی

کوچک به سادگی A، B، C را اندازه گیری کنیم پس می توانیم تابع موج A، B، C را مشخص

کنیم چنین سیستمی که نمی توانیم برای آن یک ψ مشخص تعیین کنیم می گوییم سیستم آمیخته است

(پیچیدگی زیادی دارد)

یعنی مثل هلیوم که نوشتار
جبری ترین در حالت

اما اگر بخواهیم در مقابل چنین تفسیری دستگاهی را در نظر بگیریم شامل محیط و سیستم که دارای هامیلتونی

کامل بوده و قاعدتاً تابع موج آن به صورت $\psi(\underset{y}{\text{سیستم}}, \underset{x}{\text{محیط}})$ نشان می دهیم

اگر بتوانیم $\psi(x,y)$ را به صورت جداشده بنویسیم $\psi_1(\text{محیط}) \times \psi_2(\text{سیستم})$

آنگاه به چنین دستگاهی که حالت محیط و سیستمش را توانستیم به صورت حاصلضرب بنویسیم می گوییم

دستگاه (سیستم) در حالت خالص است

تابع موج ← زندگی ذره را کامل در خودش داشت پس اگر به هر دلیلی تابع موج ذره (سیستم) تمام

اطلاعات را داشت پس سیستم در حالت آمیخته اگر نتوانستیم هامیلتونی کامل را به آن نسبت دهیم

(در سیستم های آمیخته نمی توان تک موج نسبت داد)

عملگر چگالی :

بنابراین در هنگام مواجهه با وضعیت هایی که آماده اشرف بود با انواع مثال های متفاوتی (از آن زده) مثل (. . . .) که در آن ها بیشترین اطلاعات درباره ی حالت دستگاه کامل و معمول نیست

دیگر مجبوریم بپذیریم که تابع موج برای دستگاه وجود دارد اما به طور کامل تعیین نشده است.

در چنین شرایطی بعد از چند که برای تعیین تابع موج دستگاه پیش آمده خوب است به جای تابع موج عملگر چگالی را معرفی کنیم اگر توانستیم عملگر چگالی را کسب کنیم آنگاه دیگر مشکلی با تعیین مقدار چشم داشتی یک عملگر در حالت های آن نداریم

$$\langle \hat{A} \rangle = tr\, \hat{\rho} \hat{A}$$

هر عملگر دلخواهی که در فضای هیلبرت اثر بکند می تواند باشد

با داشتن ماتریس چگالی به جای حالت سیستم می توانیم مقدار چشم داشتی را بنویسیم

$$Tr\, \hat{\rho} = 1$$

ماتریس چگالی حالت خالص :

۱- اول بحث ماتریس چگالی را برای سیستم هایی که تابع موج می تواند داشته باشند بررسی می کنیم (دستگاه در حالت خالص است)

پایه های فضای هیلبرت $\{|n\rangle\}$ پایه ها

رابطه کاملیت

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|$$

تصویر ψ روی q

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_q \sum_n \langle \psi | q \rangle \underbrace{\langle q | \hat{A} | n \rangle}_{A_{qn}} \langle n | \psi \rangle$$

تصویر ψ روی n

چون برای $\langle\psi|$ را می نویسیم $\sum_n$ اندیس n را عوض می کنیم

$$\sum_q \sum_n \rho_{nq} A_{qn}$$

a_q = تصویرهای حالت مورد نظر روی q

a_n = تصویر " " " n

بسته به اینکه پایه‌ها چقدر باشند تعداد درایه‌های ماتریس مشخص می‌شود ۴

$$\rho_{nq} = \langle q|\psi\rangle^* \langle n|\psi\rangle = a_q^* a_n$$

$$\Rightarrow \sum_q \sum_n \rho_{nq} A_{qn} = Tr\,\hat{\rho}\,\hat{A}$$

اگر پایه‌ها ۲ تا باشند

$\langle\psi$

$$\rho_{nn} = a_n^* a_n = |a_n|^2 \qquad Tr\,\hat{\rho} = 1$$

عنصر قطری nام ماتریس چگالی ρ همانطور که در بالای صفحه به دست آمد (اندازه $|a_n|^2$) ظاهراً از جنس احتمال می‌باشد (احتمال یافتن دستگاه در حالت $|n\rangle$) بنابراین ظاهراً عناصر قطری ماتریس چگالی از جنس احتمال هستند در نتیجه جمع آن‌ها باید یک بشود پس همیشه

$Tr\,\hat{\rho} = 1$ این برای سیستم در حالت خالص و آمیخته فرض می‌کند

$|\psi\rangle = a_1|n\rangle + a_2|q\rangle$

هرجا جمع چیزی ۱ شود بیانگر احتمال می‌شود

پس قطرهای ماتریس چگالی نباید منفی باشند اگر بشود دیگر از جنس احتمال نیست چون احتمال ماتریس چگالی منفی نیست ۱

۲- ماتریس چگالی حالت آمیخته:

حالت آمیخته مجموعه آنسامبل‌های حالت خالص

اگر بخواهیم ماتریس چگالی را کلی‌تر بحث بکنیم باید بتوانیم برای سیستم‌های آمیخته آن را توضیح دهیم. برای این کار دستگاهی را در حالت آمیخته در نظر می‌گیریم و هم چنین فرض می‌کنیم

عملگر $\hat{N}$ یک خاصیت قابل اندازه‌گیری این دستگاه است مثلاً انرژی است (N عملگر هامیلتونی است)

و ویژه حالت N را با مجموعه‌ی $\{|n\rangle\}$ نمایش می‌دهیم چون اگر دستگاه در یک حالت

Subject:
Year: Month: Date:

آمیخته است بنابراین تصویرهای a_n کمیت های معینی نیستند پس ماتریس چگالی را به

صورت $\rho_{nq} = a_q^* a_n$ نشان می‌دهیم هر چیزی می‌توانند باشد و عنصر قطری به صورت $\rho_{nn} = \overline{a_n^* a_n}$

سطر n ام ستون n ام

(عنصر قطری ρ_{nn} چنین دستگاهی نشان دهنده‌ی احتمال آن است که دستگاهی که

به طور اتفاقی از این مجموعه‌ی آماری یا از آنسامبل های مختلف برگزیده شده است در حالت n یافت

شود)

آنسامبل ← مجموعه ای از ذرات که موجوداتی شبیه هم هستند را اصطلاحا آنسامبل می‌گوییم

طبق تعریف آنسامبل که مجموعه ای مشابه از یک سیستم واحد است به عنوان مثال می‌توانیم طبقه بندی

آنسامبلی برای جعبه ای شامل تعداد زیادی ذره که همه اسپین $\frac{1}{2}$ دارند را به صورت زیر بیان

توضیح دهیم

طبقه بندی اول ← تمامی ذرات در یک حالت اسپینی باشند (مثلا همه در حالت $|\chi_+\rangle$ یا $|\chi_-\rangle$ باشند)

طبقه بندی دوم ← توزیع ذرات به گونه ای باشد (50% $|\chi_+\rangle$, 50% $|\chi_-\rangle$)

طبقه بندی سوم ← ذرات در یک حالت بینابینی باشند (20% $|\chi_+\rangle$, 80% $|\chi_-\rangle$ و ...)

حالات مختلف دارد

پیدا کردن میانگین آنسامبلی برای هزاران نوع آنسامبل در طبقه بندی های موجود:

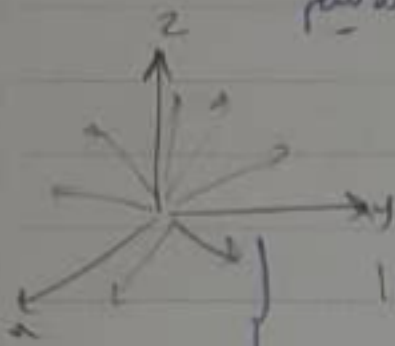
فرض کنید کمیتی را تعریف می‌کند که نشان دهنده درصد حالات در آنسامبل است.

P_i ← نشان دهنده‌ی درصد موجود از هر حالت ذره است.

$$\begin{cases} |\alpha_1\rangle \sim P_1 \\ |\alpha_2\rangle \sim P_2 \end{cases} \Rightarrow \sum P_i = 1$$

PAPCO

پس از این به بعد می‌توانیم برای تعیین آنسامبل می‌توانیم از $\{P_i\}$ ها استفاده کنیم



مثلاً در مورد ذراتی با اسپین $\frac{1}{2}$ $\{|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle\}$

مورد انتظار ۲

$|\alpha_1\rangle \sim P_1$

پس می عاقبت $|\alpha_i\rangle$ ای توان

$|\alpha_2\rangle \sim P_2$

ممکن است جهتی را نشان داد که $(S.n)$

پس تعداد $|\alpha_i\rangle$ ها که نشان دهنده‌ی جهت گیری اسپینی مورد نظر باشد می‌تواند بسیار زیاد باشد و این جهت گیری های مجموعه ذرات اسپینی با اسپین $\frac{1}{2}$ که آن را با $|\alpha_i\rangle$ درون آنسامبل ها نشان می‌دادیم هیچ ارتباطی با بعد فضای حالت سیستم‌مان ندارد.

نکته: یعنی تعداد حالات موجود در یک آنسامبل که با $|\alpha_i\rangle$ نشان می‌دادیم هیچ ربطی به تعداد بردارهای فضای هیلبرت مربوط به سیستم ذرات ندارد.

حال می‌خواهیم تلاش کنیم برای سیستمی با مجموعه آنسامبلی $\{P_i\}$ توصیف می‌شود میانگین آنسامبل (مقدار میانگین) عملگر دلخواه G را حساب کنیم

نشان آنسامبلی بودن سیستم

$$[\hat{G}] = \sum_i P_i \langle \alpha_i | \hat{G} | \alpha_i \rangle$$

میانگین آنسامبل = مقدار چشم داشتی

پس با فرض یک تک حالت آنسامبل = ۱

ولی اینجا حالت‌های α_i داریم بسته به اینکه بین هر یک حالت‌ها تداخل در درجه ضرب وجه را می‌بینیم

$$= P_1 \langle \alpha_1 | \hat{G} | \alpha_1 \rangle + P_2 \langle \alpha_2 | \hat{G} | \alpha_2 \rangle + P_3 \langle \alpha_3 | \hat{G} | \alpha_3 \rangle + \cdots$$

پس این در واقع یک میانگین گیری معمولی کوانتومی است که در ضمن این محاسبات آنسامبلی بودن سیستم هم در آن لحاظ شده است (البته سعی می کنیم این میانگین آنسامبلی را بر اساس ویژه حالت های خود عملگری که داریم میانگین آنسامبلی آن را حساب می کنیم بنویسیم)

$g''\delta_{g'g''}$

$$[\hat{G}] = \sum_{g'} \sum_{g''} \sum_{i} P_i \langle \alpha_i | g' \rangle \langle g' | \hat{G} | g'' \rangle \langle g'' | \alpha_i \rangle$$

حقیقتاً احتمال اینکه حالت α_i در حالت g' باشد

$$= \sum_{g'} \sum_{i} P_i\, g' \, |\langle \alpha_i | g' \rangle|^2$$

که قسمت آخر همان تعبیر مقدار چشم داشتی است. یعنی احتمال پیدا کردن حالت α را در g' حساب کرده و در g' ضرب می کنیم

ولی این چون در پایه های خود عملگر است نمی توان به آن برای کل ماتریس ها حقانیت تعمیم داد

پس برای عمومیت دادن تلاش می کنیم تعریف آنسامبلی را در ویژه حالت های یک عملگر مثل K بیان کنیم
میانگین — تحت

$$[\hat{G}] = \sum_{i} \sum_{k'} \sum_{k''} P_i \langle \alpha_i | k' \rangle \langle k' | G | k'' \rangle \langle k'' | \alpha_i \rangle$$

این ها عدد است می توان آن را جدا کرد.

$$\Rightarrow \sum_{k'k''} \Big(\sum_{i} P_i \langle k'' | \alpha_i \rangle \langle \alpha_i | k' \rangle \Big) \langle k' | \hat{G} | k'' \rangle$$

$\hat{\rho}$

مستقل از عملگر $\hat{G}$ است و به نوعی به تقسیم بندی آنسامبلی هم وابسته است
$|\alpha_i\rangle$

یعنی این پارامتر را می توانیم برای هر آنسامبلی بنویسیم

$S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

با تعریف $\hat{\rho} = \sum p_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$ ← عملگر سیستم های

$$\Rightarrow [\hat{G}] = \sum_{k''} \sum_{k'} \langle k''|\hat{\rho}|k'\rangle\langle k'|\hat{G}|k''\rangle$$

میانگین آنسامبلی را به صورت آخرین رابطه بر اساس ویژه حالات یک عملگر دلخواه و ناشناس می‌نویسیم

$$[\hat{G}] = \sum_{k''} \langle k''|\hat{\rho}\hat{G}|k''\rangle = \underbrace{\text{Tr}\,\hat{\rho}\hat{G}}_{\text{قطری بودن}}$$

نمایش ماتریسی $\hat{\rho}\hat{G}$ در پایه های k

$\hat{\rho} = \sum p_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$ ماتریس چگالی حساب می کنیم بعد عملگر چگالی سیستم های آمیخته

خصوصیات عملگر چگالی:

۱- ماتریس چگالی عملگری است هرمیتی

$$\rho^\dagger = \sum_i p_i^* |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| \Longrightarrow \hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger$$

$p_i^* = p_i$ چون احتمال است و همیشه حقیقی است

۲- تعریف Tr

$$\text{Tr}\,\hat{\rho} = \sum_{k'} \langle k'|\hat{\rho}|k'\rangle = \sum_{k'} \sum_i p_i \langle k'|\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|k'\rangle$$

$$\sum_i p_i \underbrace{\sum_{k'} |\langle k'|\alpha_i\rangle|^2}_{1} = \underbrace{\sum p_i}_{1}$$

در حالت خالص چه آمیخته

$\text{Tr}\,\hat{\rho} = 1$

Subject: Year: Month: Date: $\{|\chi_+\rangle, |\chi_-\rangle\}$

مثال : عملگر چگالی برای مجموعه‌ای از ذرات با اسپین $\frac{1}{2}$ را در پایه‌های S_x محاسبه کنید

$|\chi_+\rangle = |\alpha_i\rangle$

$$\hat{\rho} = \sum P_i \underbrace{|\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|}$$

$$\hat{\rho} = \sum |\chi_+\rangle \quad |\chi_+\rangle\langle\chi_+|$$

$$\rho_{kk'} = \langle k'|\rho|k''\rangle = \rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix}$$

برای بدست آوردن ماتریس ۸ پارامتر می‌خواهیم هر کدام ۸ پارامتر به هم موهومی است هم حقیقی

$$\Rightarrow \rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{12}^* & 1-\rho_{11} \end{pmatrix}$$

چون عناصر قطر اصلی نمی‌تواند موهومی باشد با قطر

عناصر می‌تواند موهومی باشد به شرطی که

$\hat{\rho}^\dagger = \rho$ پس ۳ پارامتر بیشتر نمی‌خواهیم

$$[S_x] = Tr\,\hat{\rho}\,\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\, Tr \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{12}^* & 1-\rho_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{\hbar}{2}\, Tr \begin{pmatrix} \rho_{12} & \rho_{11} \\ 1-\rho_{11} & \rho_{12}^* \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}(\rho_{12}+\rho_{12}^*)$$

برای S_y و S_z میانگین آشکار را حساب کنید

مطلوب است نمایش ماتریسی حالت الف براساس میانگین آشکار S_x, S_y, S_z

$$* \quad \hat{\rho} = \begin{pmatrix} \frac{[S_z]}{\hbar} + \frac{1}{2} & \frac{1}{\hbar}\{[S_x] - i[S_y]\} \\ \frac{1}{\hbar}\{[S_x] + i[S_y]\} & -\frac{1}{\hbar}[S_z] + \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$