Mešana stanja

Kvantni ansambli. Čista i mešana stanja

Prema postulatu o stanjima, stanje kvantnog sistema se opisuje vektorom stanja (ili talasnom funkcijom) i njegovo (njeno) poznavanje predstavlja maksimalno moguće poznavanje osobina kvantnog sistema u datom trenutku.

Prema postulatu o stanjima, stanje kvantnog sistema se opisuje vektorom stanja (ili talasnom funkcijom) i njegovo (njeno) poznavanje predstavlja maksimalno moguće poznavanje osobina kvantnog sistema u datom trenutku.

$$* * *$$

U kvantnoj statističkoj fizici se umesto pojedinačnog kvantnog sistema posmatra veliki broj istovetnih kvantnih sistema, tzv. <u>kvantni ansambl</u>.

Prema postulatu o stanjima, stanje kvantnog sistema se opisuje vektorom stanja (ili talasnom funkcijom) i njegovo (njeno) poznavanje predstavlja maksimalno moguće poznavanje osobina kvantnog sistema u datom trenutku.

$$* \ * \ *$$

U kvantnoj statističkoj fizici se umesto pojedinačnog kvantnog sistema posmatra veliki broj istovetnih kvantnih sistema, tzv. kvantni ansambl.

Za kvantni ansambl koji se sastoji od kvantnih sistema u istom stanju kažemo da je homogen ili čist. U tom smislu se stanje pojedinačnog kvantnog sistema koji pripada nekom čistom kvantnom ansamblu često naziva i čisto stanje.

Za kvantni ansambl kažemo da je <u>nehomogen</u> ili <u>mešan</u> ako se može dobiti mešanjem (ili, ekvivalentno, ako se može razložiti na) dva ili više različitih (pod)ansambala. Pri tome se podrazumeva da se mešanjem ansambala gubi informacija o tome iz kog od prvobitnih ansambala svaki pojedinačni sistem potiče.

Za kvantni sistem koji pripada nekom nehomogenom kvantnom ansamblu kažemo da je u mešanom stanju.

Za kvantni ansambl kažemo da je nehomogen ili mešan ako se može dobiti mešanjem (ili, ekvivalentno, ako se može razložiti na) dva ili više različitih (pod)ansambala. Pri tome se podrazumeva da se mešanjem ansambala gubi informacija o tome iz kog od prvobitnih ansambala svaki pojedinačni sistem potiče.

Za kvantni sistem koji pripada nekom nehomogenom kvantnom ansamblu kažemo da je u mešanom stanju.

Mešano stanje, medjutim, nije moguće opisati pomoću talasne funkcije. Ono bi se moglo shvatiti kao nekoherentna mešavina različitih čistih stanja, koju treba strogo razlikovati od superpozicije (koherentne mešavine) čistih stanja koja je opet neko čisto stanje.

Za kvantni ansambl kažemo da je nehomogen ili mešan ako se može dobiti mešanjem (ili, ekvivalentno, ako se može razložiti na) dva ili više različitih (pod)ansambala. Pri tome se podrazumeva da se mešanjem ansambala gubi informacija o tome iz kog od prvobitnih ansambala svaki pojedinačni sistem potiče.

Za kvantni sistem koji pripada nekom nehomogenom kvantnom ansamblu kažemo da je u mešanom stanju.

Mešano stanje, medjutim, nije moguće opisati pomoću talasne funkcije. Ono bi se moglo shvatiti kao nekoherentna mešavina različitih čistih stanja, koju treba strogo razlikovati od superpozicije (koherentne mešavine) čistih stanja koja je opet neko čisto stanje.

Kad je kvantni sistem u mešanom stanju to znači da opserver nedovoljno poznaje trenutne osobine sistema, tačnije, nije mu poznato sa kojim pojedinačnim stanjima manipuliše.

Verovatnoća dobijanja odredjene vrednosti opservable pri merenju u mešanom stanju.

Pretpostavimo da je nehomogeni kvantni ansambl dobijen mešanjem K homogenih ansambala sa po N_k $(k = 1, ..., K)$ sistema.

Količnici $w_k = N_k/N$, gde je $N = \sum_{k=1}^{K} N_k$, se nazivaju statističkim težinama prvobitnih homogenih ansambala u dobijenom nadansamblu.

Pretpostavimo da je nehomogeni kvantni ansambl dobijen mešanjem K homogenih ansambala sa po N_k $(k = 1, ..., K)$ sistema.

Količnici $w_k = N_k/N$, gde je $N = \sum_{k=1}^{K} N_k$, se nazivaju statističkim težinama prvobitnih homogenih ansambala u dobijenom nadansamblu.

Pošto se uzima da je broj sistema u nekom ansamblu u principu veoma veliki, u teorijskom opisu uzimamo da $N_k \to \infty$, $\forall k$ (odakle je takodje $N \to \infty$), što ne menja statističke težine, a omogućava opis pomoću verovatnoće.

Očigledno, w_k su pozitivni realni brojevi koji zadovoljavaju uslov

$$\sum_{k=1}^{K} w_k = 1.$$

Neka je data opservabla $\widehat{A}$ i neka je a_n jedna njena diskretna svojstvena vrednost. Verovatnoća da se pri merenju $\widehat{A}$ na sistemima k-tog podansambla (tj. pri merenju u k-tom čistom stanju) dobije vrednost a_n iznosi (po definiciji)

$$\mathcal{P}_{nk} = \lim_{N_k \to \infty} \frac{n_k}{N_k},$$

gde je n_k broj sistema iz k-tog podansambla na kojima je ta vrednost izmerena.

Neka je data opservabla $\hat{A}$ i neka je a_n jedna njena diskretna svojstvena vrednost. Verovatnoća da se pri merenju $\hat{A}$ na sistemima k-tog podansambla (tj. pri merenju u k-tom čistom stanju) dobije vrednost a_n iznosi (po definiciji)

$$\mathcal{P}_{nk} = \lim_{N_k \to \infty} \frac{n_k}{N_k},$$

gde je n_k broj sistema iz k-tog podansambla na kojima je ta vrednost izmerena.

Verovatnoća da se ista vrednost a_n opservable $\hat{A}$ izmeri u mešanom stanju je

$$\mathcal{P}_n = \lim_{N \to \infty} \frac{n}{N},$$

gde je $n = \sum_{k=1}^{K} n_k$ broj sistema iz čitavog (nehomogenog) nadansambla na kojima je vrednost a_n izmerena.

Neka je data opservabla $\hat{A}$ i neka je a_n jedna njena diskretna svojstvena vrednost. Verovatnoća da se pri merenju $\hat{A}$ na sistemima k-tog podansambla (tj. pri merenju u k-tom čistom stanju) dobije vrednost a_n iznosi (po definiciji)

$$\mathcal{P}_{nk} = \lim_{N_k \to \infty} \frac{n_k}{N_k},$$

gde je n_k broj sistema iz k-tog podansambla na kojima je ta vrednost izmerena.

Verovatnoća da se ista vrednost a_n opservable $\hat{A}$ izmeri u mešanom stanju je

$$\mathcal{P}_n = \lim_{N \to \infty} \frac{n}{N},$$

gde je $n = \sum_{k=1}^{K} n_k$ broj sistema iz čitavog (nehomogenog) nadansambla na kojima je vrednost a_n izmerena.

Prema tome, sledi

$$\mathcal{P}_n = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{K} n_k = \lim_{N \to \infty} \sum_{k=1}^{K} \frac{N_k}{N} \frac{n_k}{N_k} = \sum_{k=1}^{K} \lim_{N \to \infty} \frac{N_k}{N} \lim_{N_k \to \infty} \frac{n_k}{N_k},$$

tj.

$$\mathcal{P}_n = \sum_{k=1}^{K} w_k \mathcal{P}_{nk}.$$

Ako je svojstvena vrednost a_n degenerisana g puta, verovatnoća da se pri merenju opservable $\widehat{A}$ u proizvoljnom čistom stanju $|\psi_k\rangle$ dobije vrednost a_n iznosi

$$\mathcal{P}_{nk} = \sum_{i=1}^{g} |\langle\varphi_{n,i}|\psi_k\rangle|^2,$$

gde je $\{|\varphi_{n,i}\rangle, j = 1, ..., g\}$ ortonormiran skup svojstvenih vektora koji odgovaraju svojstvenoj vrednosti a_n (izbor ovog skupa nije jednoznačan).

Ako je svojstvena vrednost a_n degenerisana g puta, verovatnoća da se pri merenju opservable $\widehat{A}$ u proizvoljnom čistom stanju $|\psi_k\rangle$ dobije vrednost a_n iznosi

$$\mathcal{P}_{nk} = \sum_{i=1}^{g} |\langle\varphi_{n,i}|\psi_k\rangle|^2,$$

gde je $\{|\varphi_{n,i}\rangle, j = 1, ..., g\}$ ortonormiran skup svojstvenih vektora koji odgovaraju svojstvenoj vrednosti a_n (izbor ovog skupa nije jednoznačan).

Pošto je $|\langle\varphi_{n,i}|\psi_k\rangle|^2 = \langle\varphi_{n,i}|\psi_k\rangle^* \langle\varphi_{n,i}|\psi_k\rangle = \langle\varphi_{n,i}|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\varphi_{n,i}\rangle$, ovaj izraz se može napisati u obliku

$$\mathcal{P}_n = \sum_{k=1}^{K} w_k \mathcal{P}_{nk} = \sum_{k=1}^{K} w_k \sum_{i=1}^{g} \langle\varphi_{n,i}|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\varphi_{n,i}\rangle = \sum_{i=1}^{g} \langle\varphi_{n,i}| \left(\sum_{k=1}^{K} w_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k| \right) |\varphi_{n,i}\rangle,$$

ili

$$\mathcal{P}_n = \sum_{i=1}^{g} \langle\varphi_{n,i}|\widehat{\rho}|\varphi_{n,i}\rangle,$$

gde je

$$\widehat{\rho} = \sum_{k=1}^{K} w_k \, |\psi_k\rangle\langle\psi_k|.$$

Matrica gustine

Videli smo da operator

$$\hat{\rho} = \sum_k w_k \, |\psi_k\rangle\langle\psi_k|$$

sadrži informaciju o mešanom stanju koja je dovoljna za izračunavanje verovatnoće. Ovo je osnovni preduslov koji neki matematički objekat treba da ispunjava da bi se mogao koristiti za opis stanja.

Videli smo da operator

$$\widehat{\rho} = \sum_k w_k \, |\psi_k\rangle\langle\psi_k|$$

sadrži informaciju o mešanom stanju koja je dovoljna za izračunavanje verovatnoće. Ovo je osnovni preduslov koji neki matematički objekat treba da ispunjava da bi se mogao koristiti za opis stanja.

Navedimo unapred:

- da se pomoću ovakvih operatora takodje mogu izračunati srednje vrednosti opservabli u odgovarajućim mešanim stanjima,
- zatim da se preko njih može opisati vremenska evolucija kao i
- promena stanja pri merenju.

Zahvaljujući navedenim osobinama ovakvi operatori se pokazuju kao pogodni objekti za opis mešanih stanja.

Prve dve tačke ćemo dokazati kasnije, a pre toga ćemo preciznije definisati o kakvoj se vrsti operatora radi.

Da bismo odredili najširu klasu ovakvih operatora pokazaćemo sledeće osobine:

$\hat{\rho}$ je pozitivan operator jediničnog traga.

Da bismo odredili najširu klasu ovakvih operatora pokazaćemo sledeće osobine:

$\widehat{\rho}$ je pozitivan operator jediničnog traga.

Dokaz:

(i) Srednja vrednost od $\widehat{\rho}$ u proizvoljnom stanju $|\psi\rangle$:

$$\langle\psi|\widehat{\rho}|\psi\rangle = \langle\psi| \sum_{k=1}^{K} w_k \, |\psi_k\rangle\langle\psi_k|\psi\rangle = \sum_{k=1}^{K} w_k \, \langle\psi|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\psi\rangle = \sum_{k=1}^{K} w_k \, |\langle\psi_k|\psi\rangle|^2.$$

Pošto su $w_k \geq 0$ sledi $\langle\psi|\widehat{\rho}|\psi\rangle \geq 0$.

Da bismo odredili najširu klasu ovakvih operatora pokazaćemo sledeće osobine:

$\widehat{\rho}$ je pozitivan operator jediničnog traga.

Dokaz:

(i) Srednja vrednost od $\widehat{\rho}$ u proizvoljnom stanju $|\psi\rangle$:

$$\langle\psi|\widehat{\rho}|\psi\rangle = \langle\psi|\sum_{k=1}^{K} w_k\,|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\psi\rangle = \sum_{k=1}^{K} w_k\,\langle\psi|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\psi\rangle = \sum_{k=1}^{K} w_k\,|\langle\psi_k|\psi\rangle|^2.$$

Pošto su $w_k \geq 0$ sledi $\langle\psi|\widehat{\rho}|\psi\rangle \geq 0$.

(ii) Neka je $\{|\varphi_n\rangle\}$ neki ortonormirani bazis u prostoru stanja kvantnog sistema. Kao što je poznato, tada se proizvoljno čisto stanje $|\psi_k\rangle$ razvija po tom bazisu kao $|\psi_k\rangle = \sum_n a_n^{(k)}|\varphi_n\rangle$, pri čemi je $\sum_n |a_n^{(k)}|^2 = 1$. Trag operatora $\widehat{\rho}$ je tada

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}\,\widehat{\rho} &= \sum_n \langle\varphi_n|\widehat{\rho}|\varphi_n\rangle = \sum_n\sum_k w_k\,\langle\varphi_n|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\varphi_n\rangle = \sum_k w_k \sum_n |\langle\varphi_n|\psi_k\rangle|^2 \\ &= \sum_k w_k \sum_n |a_n^{(k)}|^2 = \sum_k w_k = 1.\end{aligned}$$

Medjutim, važi i obrnuto:

Svaki pozitivan operator jediničnog traga $\hat{\rho}$ se može napisati u obliku $\hat{\rho} = \sum_n \rho_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|$, pri čemu su $\rho_n \geq 0$ i $\sum_n \rho_n = 1$.

Medjutim, važi i obrnuto:

Svaki pozitivan operator jediničnog traga $\widehat{\rho}$ se može napisati u obliku $\widehat{\rho} = \sum_n \rho_n \, |\phi_n\rangle\langle\phi_n|$, pri čemu su $\rho_n \geq 0$ i $\sum_n \rho_n = 1$.

<u>Dokaz</u>:

U teoriji Hilbertovih prostora se dokazuje sledeći stav: Svaki pozitivan operator jediničnog traga ima čisto disketan spektar. Na osnovu tog stava, spektralna forma proizvoljnog pozitivnog operatora jediničnog traga $\widehat{\rho}$ ima oblik

$$\widehat{\rho} = \sum_n \rho_n \, |\phi_n\rangle\langle\phi_n|,$$

pri čemu je $\langle\phi_n|\phi_{n'}\rangle = \delta_{n,n'}$ i $\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = \hat{I}$. Pri tome, neke od svojstvenih vrednosti ρ_n mogu biti medjusobno jednake (degenerisan spektar).

Medjutim, važi i obrnuto:

Svaki pozitivan operator jediničnog traga $\widehat{\rho}$ se može napisati u obliku $\widehat{\rho} = \sum_n \rho_n \, |\phi_n\rangle\langle\phi_n|$, pri čemu su $\rho_n \geq 0$ i $\sum_n \rho_n = 1$.

<u>Dokaz</u>:

U teoriji Hilbertovih prostora se dokazuje sledeći stav: Svaki pozitivan operator jediničnog traga ima čisto disketan spektar. Na osnovu tog stava, spektralna forma proizvoljnog pozitivnog operatora jediničnog traga $\widehat{\rho}$ ima oblik

$$\widehat{\rho} = \sum_n \rho_n \, |\phi_n\rangle\langle\phi_n|,$$

pri čemu je $\langle\phi_n|\phi_{n'}\rangle = \delta_{n,n'}$ i $\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = \widehat{I}$. Pri tome, neke od svojstvenih vrednosti ρ_n mogu biti medjusobno jednake (degenerisan spektar).

Dalje imamo

$$\langle\phi_n|\widehat{\rho}|\phi_n\rangle = \langle\phi_n|\Big(\sum_{n'} \rho_{n'} \, |\phi_{n'}\rangle\langle\phi_{n'}|\Big)|\phi_n\rangle = \sum_{n'} \rho_{n'} \, \langle\phi_n|\phi_{n'}\rangle\langle\phi_{n'}|\phi_n\rangle = \sum_{n'} \rho_{n'} \, \delta_{nn'}\delta_{n'n} = \rho_n$$

i

$$\mathrm{Tr}\,\widehat{\rho} = \sum_n \langle\phi_n|\widehat{\rho}|\phi_n\rangle = \sum_n \rho_n.$$

Pošto je $\widehat{\rho}$ pozitivan operator jediničnog traga, neposredno sledi $\rho_n \geq 0$ i $\sum_n \rho_n = 1$, tj. svojstvene vrednosti ρ_n se mogu interpretirati kao statističke težine čistih stanja $|\phi_n\rangle$ koje formiraju mešano stanje opisano operatorom $\widehat{\rho}$.

Na osnovu prethodnog vidimo da su upravo pozitivni operatori jediničnog traga matematički objekti koji omogućavaju opis mešanih stanja. Ovi operatori se nazivaju statistički operatori ili matrice gustine.

Konačno, možemo zaključiti da se svako mešano stanje može opisati nekom matricom gustine i obratno, svakoj matrici gustine odgovara neko mešano stanje.

Na osnovu prethodnog vidimo da su upravo pozitivni operatori jediničnog traga matematički objekti koji omogućavaju opis mešanih stanja. Ovi operatori se nazivaju statistički operatori ili matrice gustine.

Konačno, možemo zaključiti da se svako mešano stanje može opisati nekom matricom gustine i obratno, svakoj matrici gustine odgovara neko mešano stanje.

Napomena 1: Matrica gustine $\widehat{\rho}$ je jednoznačno odredjena kad je dat mešani kvantni ansambl, za razliku od vektora stanja koji je odredjen samo s tačnošću do faznog faktora kad je dat čist ansambl.

Na osnovu prethodnog vidimo da su upravo pozitivni operatori jediničnog traga matematički objekti koji omogućavaju opis mešanih stanja. Ovi operatori se nazivaju statistički operatori ili matrice gustine.

Konačno, možemo zaključiti da se svako mešano stanje može opisati nekom matricom gustine i obratno, svakoj matrici gustine odgovara neko mešano stanje.

Napomena 1: Matrica gustine $\widehat{\rho}$ je jednoznačno odredjena kad je dat mešani kvantni ansambl, za razliku od vektora stanja koji je odredjen samo s tačnošću do faznog faktora kad je dat čist ansambl.

Napomena 2: Ako je data matrica gustine $\widehat{\rho}$, čista stanja koja su pomešana u odgovarajućem mešanom stanju nisu jednoznačno odredjena.

Na osnovu prethodnog vidimo da su upravo pozitivni operatori jediničnog traga matematički objekti koji omogućavaju opis mešanih stanja. Ovi operatori se nazivaju statistički operatori ili matrice gustine.

Konačno, možemo zaključiti da se svako mešano stanje može opisati nekom matricom gustine i obratno, svakoj matrici gustine odgovara neko mešano stanje.

Napomena 1: Matrica gustine $\widehat{\rho}$ je jednoznačno odredjena kad je dat mešani kvantni ansambl, za razliku od vektora stanja koji je odredjen samo s tačnošću do faznog faktora kad je dat čist ansambl.

Napomena 2: Ako je data matrica gustine $\widehat{\rho}$, čista stanja koja su pomešana u odgovarajućem mešanom stanju nisu jednoznačno odredjena.

Poslednja nejednoznačnost, medjutim, ne stvara poteškoće jer se u kvantnoj mehanici dva stanja smatraju jednakim ako pod istim okolnostima daju potpuno iste verovatnoće, što se u slučaju mešanih stanja svodi na jednakost njihovih matrica gustine (a ne pojedinačnih čistih stanja i njihovih statističkih težina u mešavinama).

Primer: Mešano stanje koje opisuje potpuno nepolarizovanu svetlost.

Čista stanja kao trivijalni slučaj mešanih stanja (''mešavina'' tada sadrži samo jedno čisto stanje) se takodje mogu opisivati matricom gustine. Ako je čisto stanje opisano vektorom $|\psi\rangle$, očigledno odgovarajuća matrica gustine biće

$$\widehat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|.$$

Čista stanja kao trivijalni slučaj mešanih stanja (''mešavina'' tada sadrži samo jedno čisto stanje) se takodje mogu opisivati matricom gustine. Ako je čisto stanje opisano vektorom $|\psi\rangle$, očigledno odgovarajuća matrica gustine biće

$$\widehat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|.$$

Osobina: Stanje opisano matricom gustine $\widehat{\rho}$ je čisto ako i samo ako je $\widehat{\rho}^2 = \widehat{\rho}$.

Čista stanja kao trivijalni slučaj mešanih stanja (''mešavina'' tada sadrži samo jedno čisto stanje) se takodje mogu opisivati matricom gustine. Ako je čisto stanje opisano vektorom $|\psi\rangle$, očigledno odgovarajuća matrica gustine biće

$$\widehat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|.$$

Osobina: Stanje opisano matricom gustine $\widehat{\rho}$ je čisto ako i samo ako je $\widehat{\rho}^2 = \widehat{\rho}$.

Dokaz:

(a) Ako $\widehat{\rho}$ opisuje neko čisto stanje, onda je $\widehat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$. Tada je

$$\widehat{\rho}^2 = (|\psi\rangle\langle\psi|)^2 = |\psi\rangle \underbrace{\langle\psi|\psi\rangle}_{1} \langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = \widehat{\rho}.$$

Čista stanja kao trivijalni slučaj mešanih stanja (''mešavina'' tada sadrži samo jedno čisto stanje) se takodje mogu opisivati matricom gustine. Ako je čisto stanje opisano vektorom $|\psi\rangle$, očigledno odgovarajuća matrica gustine biće

$$\widehat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|.$$

Osobina: Stanje opisano matricom gustine $\widehat{\rho}$ je čisto ako i samo ako je $\widehat{\rho}^2 = \widehat{\rho}$.

Dokaz:

(a) Ako $\widehat{\rho}$ opisuje neko čisto stanje, onda je $\widehat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$. Tada je

$$\widehat{\rho}^2 = (|\psi\rangle\langle\psi|)^2 = |\psi\rangle \underbrace{\langle\psi|\psi\rangle}_{1} \langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = \widehat{\rho}.$$

(b) Neka je $\widehat{\rho}^2 = \widehat{\rho}$. Koristeći spektralnu formu matrice gustine $\widehat{\rho} = \sum_n \rho_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|$, sledi

$$\begin{aligned}\widehat{\rho}^2 &= \sum_n \rho_n|\phi_n\rangle\langle\phi_n| \sum_{n'} \rho_{n'}|\phi_{n'}\rangle\langle\phi_{n'}| = \sum_n \sum_{n'} \rho_n\rho_{n'}|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\phi_{n'}\rangle\langle\phi_{n'}| \\ &= \sum_n \sum_{n'} \rho_n\rho_{n'}|\phi_n\rangle\langle\phi_{n'}|\delta_{nn'} = \sum_n \rho_n^2\,|\phi_n\rangle\langle\phi_n|,\end{aligned}$$

odnosno $\widehat{\rho}^2 - \widehat{\rho} = \sum_n (\rho_n^2 - \rho_n)\,|\phi_n\rangle\langle\phi_n|$. Pošto je $\widehat{\rho}^2 - \widehat{\rho} = 0$, desna strana takodje mora biti jednaka nuli, a to je moguće samo ako su $\rho_n^2 - \rho_n = 0$, $\forall n$. Iz ovih uslova sledi da svojstvene vrednosti ρ_n mogu biti ili nule ili jedinice. Konačno, uslov $\sum_n \rho_n = 1$ daje da samo jedna od svojstvenih vrednosti ρ_n može biti jedinica, a sve ostale su nule, tj. stanje je čisto.

Srednja vrednost opservable u mešanom stanju

Srednja vrednost opservable $\widehat{A}$ u mešanom stanju opisanom matricom gustine $\widehat{\rho}$ je

$$\langle \widehat{A} \rangle = \mathsf{Tr}\, \widehat{\rho}\, \widehat{A}.$$

Srednja vrednost opservable $\widehat{A}$ u mešanom stanju opisanom matricom gustine $\widehat{\rho}$ je

$$\langle\widehat{A}\rangle = \mathrm{Tr}\,\widehat{\rho}\,\widehat{A}.$$

<u>Dokaz</u> (za diskretni spektar):

$$\begin{aligned}
\langle\widehat{A}\rangle &= \sum_n a_n\,\mathcal{P}_n = \sum_n a_n \sum_i \langle\varphi_{n,i}|\widehat{\rho}|\varphi_{n,i}\rangle = \sum_{n,i} a_n \langle\varphi_{n,i}|\widehat{I}\widehat{\rho}|\varphi_{n,i}\rangle \\
&= \sum_{n,i} a_n \langle\varphi_{n,i}|\Big(\sum_{n',j}|\varphi_{n',j}\rangle\langle\varphi_{n',j}|\Big)\widehat{\rho}|\varphi_{n,i}\rangle = \sum_{n,i}\sum_{n',j} a_n \langle\varphi_{n,i}|\varphi_{n',j}\rangle\langle\varphi_{n',j}|\widehat{\rho}|\varphi_{n,i}\rangle \\
&= \sum_{n',j}\sum_{n,i} a_n \langle\varphi_{n',j}|\widehat{\rho}|\varphi_{n,i}\rangle\langle\varphi_{n,i}|\varphi_{n',j}\rangle = \sum_{n',j}\langle\varphi_{n',j}|\widehat{\rho}\Big(\sum_{n,i} a_n|\varphi_{n,i}\rangle\langle\varphi_{n,i}|\Big)|\varphi_{n',j}\rangle \\
&= \sum_{n',j}\langle\varphi_{n',j}|\widehat{\rho}\widehat{A}|\varphi_{n',j}\rangle = \mathrm{Tr}\,\widehat{\rho}\widehat{A}.
\end{aligned}$$

Formula za srednju vrednost opservable $\widehat{A}$ preko matrice gustine se u slučaju čistih stanja svodi na standardan izraz preko vektora stanja, tj. ako je $\widehat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$, onda je

$$\langle\widehat{A}\rangle = \mathrm{Tr}\,\widehat{\rho}\widehat{A} \equiv \langle\psi|\widehat{A}|\psi\rangle.$$

Formula za srednju vrednost opservable $\hat{A}$ preko matrice gustine se u slučaju čistih stanja svodi na standardan izraz preko vektora stanja, tj. ako je $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$, onda je

$$\langle\hat{A}\rangle = \mathrm{Tr}\,\hat{\rho}\hat{A} \equiv \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle.$$

<u>Dokaz</u>: Ako je stanje čisto, onda je $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$, odnosno

$$\langle\hat{A}\rangle = \mathrm{Tr}\,\hat{\rho}\hat{A} = \mathrm{Tr}\,|\psi\rangle\langle\psi|\hat{A}.$$

Ako je $\{|\phi_n\rangle\}$ neki bazis u prostoru stanja u kome deluje operator $\hat{A}$, trag se svodi na sumu dijagonalnih matričnih elemenata operatora $|\psi\rangle\langle\psi|\hat{A}$ u tom bazisu, tj.

$$\begin{aligned}\langle\hat{A}\rangle &= \sum_n \langle\phi_n|\psi\rangle\langle\psi|\hat{A}|\phi_n\rangle = \sum_n \langle\psi|\hat{A}|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\psi\rangle \\ &= \langle\psi|\hat{A}\Big(\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|\Big)|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{I}\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle.\end{aligned}$$

Vremenska evolucija mešanog stanja

Ako je $\widehat{H}$ Hamiltonijan sistema, a $\widehat{\rho}(t)$ matrica gustine koja opisuje neko mešano stanje tog sistema u trenutku t, onda je promena stanja sa vremenom odredjena fon Nojmanovom jednačinom

$$i\hbar \frac{\partial \widehat{\rho}(t)}{\partial t} = [\widehat{H}, \widehat{\rho}(t)].$$

Ako je $\widehat{H}$ Hamiltonijan sistema, a $\widehat{\rho}(t)$ matrica gustine koja opisuje neko mešano stanje tog sistema u trenutku t, onda je promena stanja sa vremenom odredjena fon Nojmanovom jednačinom

$$i\hbar\,\frac{\partial\widehat{\rho}(t)}{\partial t} = [\widehat{H}, \widehat{\rho}(t)].$$

Dokaz: Neka je $\widehat{\rho}(t) = \sum_k w_k\,|\psi_k(t)\rangle\langle\psi_k(t)|$ neko razlaganje matrice gustine po čistim stanjima (npr. njena spektralna forma). Tada je

$$i\hbar\,\frac{\partial\widehat{\rho}(t)}{\partial t} = i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\sum_k w_k\,|\psi_k(t)\rangle\langle\psi_k(t)| = i\hbar\sum_k w_k\Big(\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi_k(t)\rangle\Big)\langle\psi_k(t)| + i\hbar\sum_k w_k|\psi_k(t)\rangle\Big(\frac{\partial}{\partial t}\,\langle\psi_k(t)|\Big).$$

Ako je $\widehat{H}$ Hamiltonijan sistema, a $\widehat{\rho}(t)$ matrica gustine koja opisuje neko mešano stanje tog sistema u trenutku t, onda je promena stanja sa vremenom odredjena fon Nojmanovom jednačinom

$$i\hbar\,\frac{\partial\widehat{\rho}(t)}{\partial t}=[\widehat{H},\widehat{\rho}(t)].$$

<u>Dokaz</u>: Neka je $\widehat{\rho}(t)=\sum_k w_k\,|\psi_k(t)\rangle\langle\psi_k(t)|$ neko razlaganje matrice gustine po čistim stanjima (npr. njena spektralna forma). Tada je

$$i\hbar\,\frac{\partial\widehat{\rho}(t)}{\partial t}=i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\sum_k w_k\,|\psi_k(t)\rangle\langle\psi_k(t)|=i\hbar\sum_k w_k\Big(\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi_k(t)\rangle\Big)\langle\psi_k(t)|+i\hbar\sum_k w_k|\psi_k(t)\rangle\Big(\frac{\partial}{\partial t}\,\langle\psi_k(t)|\Big).$$

Pošto je evolucija čistih stanja $|\psi_k(t)\rangle$ odredjena Šredingerovom jednačinom (za ket-vektore)

$$i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi_k(t)\rangle=\widehat{H}|\psi_k(t)\rangle,$$

odnosno odgovarajućom konjugovanom jednačinom (za bra-vektore)

$$-i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\langle\psi_k(t)|=\langle\psi_k(t)|\widehat{H},$$

sledi

$$i\hbar\,\frac{\partial\widehat{\rho}(t)}{\partial t}=\sum_k w_k\widehat{H}|\psi_k(t)\rangle\langle\psi_k(t)|-\sum_k w_k|\psi_k(t)\rangle\langle\psi_k(t)|\widehat{H}=\widehat{H}\widehat{\rho}(t)-\widehat{\rho}(t)\widehat{H}=[\widehat{H},\widehat{\rho}(t)].$$

Alternativno, promena stanja sa vremenom se može izraziti preko evolucionog operatora.

Ako je $\widehat{U}(t,t_0)$ evolucioni operator, a $\widehat{\rho}(t_0)$ matrica gustine koja opisuje stanje posmatranog sistema u početnom trenutku t_0, onda je matrica gustine koja opisuje stanje sistema u proizvoljnom trenutku t

$$\widehat{\rho}(t) = \widehat{U}(t,t_0)\widehat{\rho}(t_0)\widehat{U}^{+}(t,t_0).$$

Alternativno, promena stanja sa vremenom se može izraziti preko evolucionog operatora.

Ako je $\widehat{U}(t,t_0)$ evolucioni operator, a $\widehat{\rho}(t_0)$ matrica gustine koja opisuje stanje posmatranog sistema u početnom trenutku t_0, onda je matrica gustine koja opisuje stanje sistema u proizvoljnom trenutku t

$$\widehat{\rho}(t) = \widehat{U}(t,t_0)\widehat{\rho}(t_0)\widehat{U}^{+}(t,t_0).$$

<u>Dokaz</u>: Neka je $\widehat{\rho}(t) = \sum_k w_k \,|\psi_k(t)\rangle\langle\psi_k(t)|$ neko razlaganje matrice gustine u proizvoljnom trenutku t po čistim stanjima. Pošto je

$$|\psi_k(t)\rangle = \widehat{U}(t,t_0)|\psi_k(t_0)\rangle$$

i

$$\langle\psi_k(t)| = \langle\psi_k(t_0)|\widehat{U}(t,t_0)^{+},$$

sledi

$$\begin{aligned}
\widehat{\rho}(t) &= \sum_k w_k \,|\psi_k(t)\rangle\langle\psi_k(t)| = \sum_k w_k \,\widehat{U}(t,t_0)|\psi_k(t_0)\rangle\langle\psi_k(t_0)|\widehat{U}(t,t_0)^{+} \\
&= \widehat{U}(t,t_0)\Big(\sum_k w_k \,|\psi_k(t_0)\rangle\langle\psi_k(t_0)|\Big)\widehat{U}(t,t_0)^{+} = \widehat{U}(t,t_0)\widehat{\rho}(t_0)\widehat{U}(t,t_0)^{+}.
\end{aligned}$$

Fon Nojmanova entropija

Kao što smo videli, u mešanom stanju (netrivijalni slučaj) opserver <u>ne zna</u> u kojem od pomešanih čistih stanja se pojedinačni kvantni sistem nalazi.

Kao mera nedovoljnog poznavanja trenutnih osobina sistema obično se uzima (fon Nojmanova) <u>entropija</u>

$$S = -k \, \mathrm{Tr} \, \hat{\rho} \ln \hat{\rho},$$

gde je k Bolcmanova konstanta.

Kao što smo videli, u mešanom stanju (netrivijalni slučaj) opserver ne zna u kojem od pomešanih čistih stanja se pojedinačni kvantni sistem nalazi.

Kao mera nedovoljnog poznavanja trenutnih osobina sistema obično se uzima (fon Nojmanova) entropija

$$S = -k \,\mathrm{Tr}\, \hat{\rho} \ln \hat{\rho},$$

gde je k Bolcmanova konstanta.

Ako matricu gustine $\hat{\rho}$ izrazimo u spektralnoj formi i trag izračunamo u njenom svojstvenom bazisu, izraz za entropiju postaje

$$S = -k \sum_n \rho_n \ln \rho_n .$$

U slučaju čistog stanja, kao što smo videli, sve svojstvene vrednosti ρ_n su nule osim jedne koja je jedinica. Očigledno, tada su svi sabirci $\rho_n \ln \rho_n = 0$, tako da je za čisto stanje $S = 0$.