Данная серия методичек посвящается лучшему семинаристу по квантовой теории
Андрею Владимировичу Толоконникову

А.В.: Что это за хреновина? Это НЕВЕДОМАЯ хреновина!

А.В.: Зашибись! Топчик, я бы сказал.

Мы приступаем к смешанным состояниям – одной из двух сложных тем курса (вторая – спин). На лекциях Силаев её рассказывает через спин и опыт Штерна-Герлаха. Мне такой подход кажется неправильным – нельзя две новые темы рассказывать одновременно. Поэтому мы сначала изучим смешанные состояния, потом спин, и лишь потом и то, и то одновременно.

Смешанные и чистые состояния.
Состояния системы бывают чистые и смешанные.
Чистые вероятности описываются ВФ, смешанные ***невозможно описать никакой ВФ.*** Это просто шокирует: мы привыкли, что ВФ можно описать любые состояния на свете. Оказывается, нет!
Смешанных состояний на введении в кванты и атомке нет, мы знакомимся с ними только сейчас. Отметим, что состояние, где ВФ – линкомбинация СФ какого-то оператора, вполне себе чистое. В нём же есть ВФ? Есть. Значит, чистое. Смешанное – это качественно иной уровень.
Вот как об этом сказано в Википедии:

Смешанное состояние отличается от квантовой суперпозиции. На самом деле квантовая суперпозиция чистого состояния — это другое чистое состояние, например, $|\psi\rangle = (|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle)/\sqrt{2}$.

Как появляется смешанное состояние?
Вчера Вася достаточно долго работал в лаборатории, и успешно – получил редкую частицу. Таон какой-нибудь.
Приходит он сегодня, а на двери объявление:
Ночью в твоей лабе побывал я азазазаза и поместил таон с вероятностью p_1 в состояние с ВФ Ψ_1 , а с вероятностью p_2 в состояние с ВФ Ψ_2 . Аноним
Отметим, что это вероятность классическая.
Это очень важно. Я даже выделю капсом:

СМЕШАННЫЕ СОСТОЯНИЯ ВОЗНИКАЮТ ПРИ КЛАССИЧЕСКОЙ ВЕРОЯТНОСТИ!!!

Можете считать, что у анонима была монетка (тогда $p_1=p_2=1/2$). Можете считать, что он открыл random.org у себя на мобилке.

И как теперь Васе быть?
У него теперь таон и не Ψ_1, и не Ψ_2. ***Одной волновой функцией его уже описать!***

Как вариант – вот такая табличка:

Вероятность	ВФ
p_1	Ψ_1
p_2	Ψ_2

Если бы у анонима было бы больше ВФ, то и табличка была длиннее:

Вероятность	ВФ
p_1	Ψ_1
p_2	Ψ_2
p_3	Ψ_3
p_4	Ψ_4

ВФ может быть сколько угодно можно – главное, чтобы сумма вероятностей была 1:

$$\sum_j p_j = 1.$$

Задача 1. Частица находится в некотором потенциале.
Система находится в смешанном состоянии между тремя ВФ - Ψ_1, Ψ_2, Ψ_3 с вероятностями p_1, p_2, p_3. Все они – СФ гамильтониана со СЗ E_1, E_2, E_3.
Найти вероятность измерить каждое из значений энергии и указать среднее значении энергии.
Решение. E_1 с вероятностью p_1, E_2 с вероятностью p_2, E_3 с вероятностью p_3.

$$< E >= p_1E_1 + p_2E_2 + p_3E_3$$

Задача 2. Частица – уже не абы что, а гармонический осциллятор с частотой ω. Система находится в смешанном состоянии между четырьмя ВФ - Ψ_0, Ψ_2, Ψ_3 и Ψ_7 с вероятностями p_0, p_2, p_3 и p_7. Все они – СФ гамильтониана.
Найти среднее значении энергии.
Решение.

$$< E >= p_0E_0 + p_2E_2 + p_3E_3 + p_7E_7$$

Тут вспомним формулу для энергий гармонического осциллятора:

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Поэтому

$$< E >= \hbar\omega\left(p_0 * \frac{1}{2} + p_2 * \frac{5}{2} + p_3 * \frac{7}{2} + p_7 * \frac{15}{2}\right)$$

Отметьте следующий очень важный факт: Ψ были СФ гамильтониана, и просили нас найти именно энергию. Благодаря этому совпадению эти задачи решались очень просто и быстро.

Оператор плотности.
Смешанные состояния описываются не комплекснозначной скалярной волновой функцией, а целым оператором - ***оператором плотности.***

В смешанном состоянии система находится одновременно сразу в нескольких ВФ – с вероятностью p_1 в ВФ $|\Psi_1>$, p_2 в ВФ $|\Psi_2>$ и т.д.
Тогда мы можем соорудить из этих ВФ множество кет-бра операторов-проекторов: из $|\Psi_1>$ соорудим $|\Psi_1><\Psi_1|$, из $|\Psi_2>$ соорудим $|\Psi_2><\Psi_2|$ и т.д.
После чего их сложим с соответствующими вероятностями:

$$\hat{\rho} = \sum_j p_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j|,$$

Где, напомним, $|\Psi_j>$ - ВФ, в которых аноним мог оставить частицу Васе.
Условие нормировки – сумма вероятностей p_j должна быть равна 1.

Т.е., например, для задачи 1

$$\hat{\rho} = p_1|\Psi_1 >< \Psi_1| + p_2|\Psi_2 >< \Psi_2| + p_3|\Psi_3 >< \Psi_3|$$

Кстати, решая задача на смешанное состояние, вам постоянно будет хотеться написать нечто в духе

$$p_1|\Psi_1 > + p_2|\Psi_2 > + p_3|\Psi_3 >$$

Так делать НЕЛЬЗЯ! Это квантовая суперпозиция! Это волновая функция! Это чистое состояние! А вот смешанное состояние на то и смешанное, что оно описывается не одной ВФ, а оператором:

$$\hat{\rho} = p_1|\Psi_1 >< \Psi_1| + p_2|\Psi_2 >< \Psi_2| + p_3|\Psi_3 >< \Psi_3|$$

Задача 3.
Дано смешанное состояние гарм.осциллятора:

$$\hat{\rho} = \sum_n e^{-\alpha n}(1-e^{-\alpha})\,|n><n|$$

Найти <E>.
Решение:
Сперва сообразим, что |n> - это, наверное, n-тые СФ гамильтониана. Другими словами: оператор плотности дан в энергетическом представлении.

$\hat{\rho} = \sum_n p_n |n\rangle\langle n|$, где: p_0 - вероятность того, что система находится в чистом состоянии $|0\rangle$ (с энергией $\frac{\hbar\omega}{2}$)

p_1 - вероятность нахождения в состоянии $|1\rangle$ (с энергией $\frac{3\hbar\omega}{2}$

...

p_n - вероятность нахождения в состоянии $|n\rangle$ (с энергией $\frac{\hbar\omega}{2}(n$

Для данного оператора плотности $p_n = e^{-\alpha n}(1-e^{-\alpha})$

От нас ходят среднее значение энергии, т.е. её мат. ожидание. Из теоремы и здравого смысла вам известна формула для математического ожидания:

$$\langle E\rangle = E_0 p_0 + E_1 p_1 + \ldots = \sum_n E_n p_n$$

Применяем, подставляя выражение для p_n:

$$\langle E\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} E_n p_n = \sum_{n=0}^{\infty} \underbrace{\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)}_{E_n} \cdot \underbrace{e^{-\alpha n}(1-e^{-\alpha})}_{p_n}$$

Далее просто математика. Ряд равен

$$\underbrace{\hbar\omega\,(1-e^{-\alpha})}_{C}\sum_{n=0}^{\infty}\left(n+\tfrac{1}{2}\right)e^{-\alpha n} = C\sum_{n=0}^{\infty} n e^{-\alpha n} + \frac{C}{2}\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\alpha n}.$$

Второй ряд – это сумма геометрич. прогрессии, т.е. $\dfrac{1}{1-e^{-\alpha}}$.

Первый преобразуем: $\sum_{n=0}^{\infty} n e^{-\alpha n} = -\sum_{n=0}^{\infty}(-n)e^{-\alpha n} = -\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\partial}{\partial\alpha}e^{-\alpha n} =$

$$= -\frac{\partial}{\partial\alpha}\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\alpha n} = -\frac{\partial}{\partial\alpha}\frac{1}{1-e^{-\alpha}} = \frac{e^{-\alpha}}{(1-e^{-\alpha})^2}.$$

Ответ: $\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)(1-e^{-\alpha})\left[\dfrac{e^{-\alpha}}{(1-e^{-\alpha})^2} + \dfrac{1}{1-e^{-\alpha}}\right] =$

$$= \hbar\omega\left(n+\tfrac{1}{2}\right)\left[\frac{e^{-\alpha}}{1-e^{-\alpha}} + 1\right] = \hbar\omega\left(n+\tfrac{1}{2}\right)\left[\frac{1}{e^{\alpha}-1} + 1\right] = \hbar\omega\left(n+\tfrac{1}{2}\right)\frac{e^{\alpha}}{e^{\alpha}-1}.$$

Отметим, что оператор плотности $\hat{\rho}$ был дан в энергетическом представлении, и спросили от нас среднее значение энергии. Это надо отслеживать: как правило, от нас спрашивают среднее значение величины, в представлении которой дан $\hat{\rho}$. Если это не так, то выкладки будут больше.

Задача 4: в том же смешанном состоянии вычислить дисперсию энергии. Решение: она есть $\langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2$. Среднее значение энергии у нас уже есть, осталось его только в квадрат возвести. А $\langle E^2\rangle$ как считать? Да очень похоже на то, как мы считали E, только надо квадрат поставить: $\sum_n E_n^2 P_n$.

Вообще $\langle f(\zeta)\rangle$ определяется как $\sum_n f(\zeta_n) P_n$ (в непрерывном случае сумма заменится на интеграл).

$$\langle E^2\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} E_n^2 P_n = \sum_{n=0}^{\infty} \underbrace{\hbar^2\omega^2\left(n+\tfrac{1}{2}\right)^2}_{E_n^2} \cdot \underbrace{e^{-\alpha n}(1-e^{-\alpha})}_{P_n}$$

Не хочется тратить время на математику: в общем, этот ряд считается, и из результата вычитается $\langle E\rangle^2$.

Отметим, что не всегда те ВФ, в одной из которых (из-за анонима!) находится частица, обязаны быть СФ гамильтониана. Аноним нам ничем не обязан.

Задача 5.

$$\hat{\rho} = \frac{1}{3}|\Psi_1 >< \Psi_1| + \frac{2}{3}|\Psi_2 >< \Psi_2|$$

где

$$\left|\Psi_1 > = \frac{3i}{5}\right| \varphi_1 > + \frac{4}{5}|\varphi_3 >$$

$$\left|\Psi_2 > = \frac{12}{13}\right| \varphi_2 > + \frac{5i}{13}|\varphi_3 >$$

Найти вероятность измерить каждое значение энергии, и <E>.

Решение.

С вероятностью 1/3 аноним нам оставил $|\Psi_1 >$. Там с вероятностью $\frac{9}{25}$ E_1 и с вероятностью $\frac{16}{25}$ E_3.

С вероятностью 2/3 аноним нам оставил $|\Psi_2 >$. Там с вероятностью $\frac{144}{169}$ E_2 и с вероятностью $\frac{25}{169}$ E_3.

Чтобы была E_1, требуется, во-первых, чтобы была $|\Psi_1 >$ (вероятность 1/3) и, во-вторых, там ещё вероятность $\frac{9}{25}$. Этакий двойной уровень вероятности – классический и квантовый.

Итого: вероятность измерить E_1 равна $\frac{1}{3} * \frac{9}{25} = \frac{3}{25}$

Чтобы была E_1, требуется, во-первых, чтобы была $|\Psi_2 >$ (вероятность 2/3) и там ещё вероятность $\frac{144}{169}$. Итоговая вероятность $\frac{144}{169} * \frac{2}{3}$.

А для E_3 у нас существуют аж две возможности, и там вероятность $\frac{1}{3} * \frac{9}{25} + \frac{2}{3} * \frac{25}{169}$.