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

А.В.: И вот тогда, друзья, вы и помрёте нахрен. Потому что КТП – эта полная шиза.

Понятие «матрицы плотности» является более общеупотребительным, чем понятие «оператор плотности». Более того, ваши семинаристы будут использовать именно матрицу плотности.

Я считаю, что матрица плотности – бесполезный кусок говна. Но раз он может быть в условии задачи, нам надо научиться с ним работать.

Понятие «оператор плотности» применимо всегда, а «матрица плотности» - не всегда. Из курса линала мы знаем, что любой оператор в конечномерном линейном пространстве мы можем представить в виде матрицы. Однако если пространство бесконечномерным, матрица или будет бесконечна (в случае счётного базиса), или вообще не будет существовать (в случае континуального базиса).
У гамильтониана, например, как правило, счётный базис (но это в связанных состояниях, а не в связанных континуальный). У операторов импульса и координаты тоже (в нормальных условиях) континуальный базис. Поэтому понятие матрицы плотности (в координатном представлении, например) к ним не применимо вовсе.

Поэтому матрица плотности в 99% случаев или в энергетическом, или в спиновом представлении. Спин мы пока не прошли, так что она у нас будет в энергетическом представлении.

2) У матрицы плотности нет физического смысла. Сравните:

Рассмотрим пример: чистое состояние с оператором плотности

$$\hat{\rho} = |\Psi >< \Psi|$$

Мы явно видим, что это чистое состояние: всего одна ВФ, $|\Psi >$, и с вероятностью 1. Какая будет матрица плотности?

Т.к. мы строим энергетическое представление, раскладываем ВФ по СФ гамильтониана:

$$|\Psi > = \sum_k c_k |\varphi_k >$$

Пусть мы считаем, что у нас конечное число ненулевых слагаемых (а если это не так, то матрица будет бесконечной). Тогда матрица плотности будет выглядеть так

$$\begin{matrix} |c_1^2| & c_1 c_2^* & c_1 c_3^* \\ c_1 c_2 & |c_2^2| & c_2 c_3^* \\ c_1 c_3 & c_2 c_3 & |c_3^2| \end{matrix}$$

и так далее…
Заметим, что по внешнему виду матрицы плотности вообще неочевидно, это чистое состояние или нет.
Какая из этих двух матриц соответствует чистому состоянию?
$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$ или $\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$?

Ответ: вторая, она соответствует ВФ $\begin{matrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{matrix}$, а первая – это смешанное состояние

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}|\begin{matrix} 1 \\ 0 \end{matrix}><\begin{matrix} 1 \\ 0 \end{matrix}| + \frac{1}{2}|\begin{matrix} 0 \\ 1 \end{matrix}><\begin{matrix} 0 \\ 1 \end{matrix}|$$

Критерий чистоты состояния: если квадрат матрицы плотности равен матрице плотности – тогда и только тогда состояние чистое.

Так как матрица плотности – бесполезный кусок говна, то в ваших выкладках она может быть только в двух случаев:
1) Она требуется в ответе. Тогда вы все выкладки проделывайте без неё, а матрицу плотности считаете в самом конце.
Задача. Аноним оставил Васе частицу в смешанном состоянии:

$$\hat{\rho} = \frac{5}{8}|\Psi_1><\Psi_1| + \frac{3}{8}|\Psi_2><\Psi_2|$$

где

$$|\Psi_1> = \frac{3}{5}|\varphi_0> + \frac{4}{5}|\varphi_1>$$

$$|\Psi_2> = \sqrt{\frac{1}{3}}\varphi_0 + \sqrt{\frac{2}{3}}\varphi_1>$$

Постройте матрицу плотности.
Решение:
Строим матрицу плотности от $|\Psi_1><\Psi_1|$:

$$\begin{pmatrix} \frac{3}{5}*\frac{3}{5} & \frac{3}{5}*\frac{4}{5} \\ \frac{3}{5}*\frac{4}{5} & \frac{4}{5}*\frac{4}{5} \end{pmatrix} = \frac{1}{25}\begin{pmatrix} 9 & 12 \\ 12 & 16 \end{pmatrix}$$

Проверка: сумма диагональных элементов должна быть равна 1. Сходится
Домножаем на вероятность этой ВФ, т.е. $\frac{5}{8}$:

$$\frac{1}{40}\begin{pmatrix} 9 & 12 \\ 12 & 16 \end{pmatrix}$$

Строим матрицу плотности от $|\Psi_1><\Psi_1|$:

$$\begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{3}*\frac{1}{3}} & \sqrt{\frac{1}{3}*\frac{2}{3}} \\ \sqrt{\frac{1}{3}*\frac{2}{3}} & \sqrt{\frac{2}{3}*\frac{2}{3}} \end{pmatrix} = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 2 \end{pmatrix}$$

Проверка: сумма диагональных элементов должна быть равна 1. Сходится

Домножаем на вероятность этой ВФ, т.е. $\frac{3}{8}$:

$$\frac{1}{8}\begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 2 \end{pmatrix}$$

Складываем и получаем ответ:

$$\frac{1}{40}\begin{pmatrix} 9 & 12 \\ 12 & 16 \end{pmatrix} + \frac{1}{8}\begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 2 \end{pmatrix} = \frac{1}{40}\begin{pmatrix} 14 & 12+5\sqrt{2} \\ 12+5\sqrt{2} & 26 \end{pmatrix}$$

Проверка: сумма диагональных элементов должна быть равна 1. Сходится!

2) Матрица плотности дана в условии задачи. Рассмотрим одну такую, Парфёнов её давал в 2022-м году на зачёте:

(20) Вычислить среднее значение импульса частицы в ящике ($0<x<L$) в состоянии, ненулевые элементы матрицы плотности которого в базисе из СВ гамильтониана $\rho_{11}=\frac{1}{4}, \quad \rho_{22}=\frac{3}{4}, \quad \rho_{12}=-\frac{i}{8}=\rho_{21}{}^{*}$.

Задача похожа на ту, которая была раньше. Только вместо явного вида оператора плотности нам дали матрицу плотности.

И как нам от матрицы плотности перейти к

$$\hat{\rho} = \sum_{j=0}^{\infty} p_j |\Psi_j><\Psi_j|$$

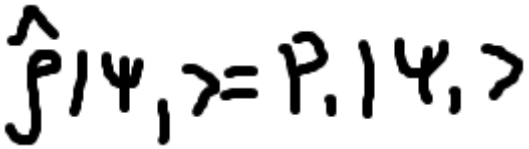
?

Теорема. Чтобы найти вероятности p_j и чистые ВФ $|\Psi_j>$, нужно найти СЗ (это будут вероятности) и СВ (это будет ВФ) матрицы плотности. $|\Psi_j>$, найденные таким образом, будут друг другу ортогональны.

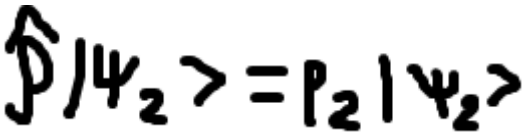
Доказательство – сначала для двух ВФ. Пусть оператор плотности выглядит

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

Домножим справа на $|\Psi_1>$ и воспользуемся ортогональностью $|\Psi_1>$ и $|\Psi_2>$:



Домножим справа на $|\Psi_2>$ и воспользуемся ортогональностью $|\Psi_1>$ и $|\Psi_2>$:



Ч.т.д.

Обобщим результат на произвольное число слагаемых:

$$\hat{\rho} = \sum_{j=0}^{\infty} p_j |\Psi_j><\Psi_j|$$

Домножим справа на $|\Psi_k>$ и воспользуемся ортогональностью:

$$\hat{\rho}|\Psi_k> = p_k|\Psi_k>$$

Ч.т.д.

Коли так, то задача свелась к поиску СВ и СЗ матрицы – это 2-й семестр.
Решаем характеристическое решение:

$$\begin{vmatrix} \frac{1}{4}-\lambda & -\frac{i}{8} \\ \frac{i}{8} & \frac{3}{4}-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

Его решение:

$$\frac{1 \pm \frac{1}{\sqrt[4]{2}}}{2}$$

Проверяем, что оба решения действительны и принадлежат [0..1] (это всё-таки вероятности как-никак).
Ну а СВ ищутся, решая систему:

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{4} & -\frac{i}{8} \\ \frac{i}{8} & \frac{3}{4} \end{pmatrix} \begin{matrix} a \\ b \end{matrix} = \frac{1-\frac{1}{\sqrt[4]{2}}}{2} * \begin{matrix} a \\ b \end{matrix}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{4} & -\frac{i}{8} \\ \frac{i}{8} & \frac{3}{4} \end{pmatrix} \begin{matrix} c \\ d \end{matrix} = \frac{1+\frac{1}{\sqrt[4]{2}}}{2} * \begin{matrix} c \\ d \end{matrix}$$

Откуда находим и СВ. Например, так:

$$\frac{a}{4}-\frac{ib}{8}=\frac{1-\frac{1}{\sqrt[4]{2}}}{2}a+\frac{1-\frac{1}{\sqrt[4]{2}}}{2}b$$

$$a\left(\frac{1}{4}-\frac{1-\frac{1}{\sqrt[4]{2}}}{2}\right)=b\left(\frac{1-\frac{1}{\sqrt[4]{2}}}{2}+\frac{i}{8}\right)$$

$$a\left(-\frac{1}{2}+\frac{1}{\sqrt[4]{2}}\right)=b\left(1-\frac{1}{\sqrt[4]{2}}+\frac{i}{4}\right)$$

Учитывая условие нормировки $|a|^2+|b|^2=1$, получаем

$$a=\frac{1-\frac{1}{\sqrt[4]{2}}+\frac{i}{4}}{\sqrt{\left(-\frac{1}{2}+\frac{1}{\sqrt[4]{2}}\right)^2+\left(1-\frac{1}{\sqrt[4]{2}}\right)^2+\frac{1}{16}}}$$

$$b=\frac{-\frac{1}{2}+\frac{1}{\sqrt[4]{2}}}{\sqrt{\left(-\frac{1}{2}+\frac{1}{\sqrt[4]{2}}\right)^2+\left(1-\frac{1}{\sqrt[4]{2}}\right)^2+\frac{1}{16}}}$$

Аналогично

$$c=\frac{1+\frac{1}{\sqrt[4]{2}}+\frac{i}{4}}{\sqrt{\left(-\frac{1}{2}-\frac{1}{\sqrt[4]{2}}\right)^2+\left(1+\frac{1}{\sqrt[4]{2}}\right)^2+\frac{1}{16}}}$$

$$d=\frac{-\frac{1}{2}-\frac{1}{\sqrt[4]{2}}}{\sqrt{\left(-\frac{1}{2}-\frac{1}{\sqrt[4]{2}}\right)^2+\left(1+\frac{1}{\sqrt[4]{2}}\right)^2+\frac{1}{16}}}$$

Теперь находим те две функции ВФ,

$$|\Psi_1>=a\varphi_1(x)+b\varphi_2(x)=a\sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(\frac{x}{L}\right)+b\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{2x}{L}\right)$$

$$|\Psi_2>=c\varphi_1(x)+d\varphi_2(x)=\mathrm{c}\sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(\frac{x}{L}\right)+d\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{2x}{L}\right)$$

Осталось всё это подставить в формулу. Чтобы не путать, где «p» импульс, а где вероятность, там, где импульс, я буду писать крышку:

$$< \hat{p} >= p_1 < \Psi_1|\hat{p}|\Psi_1 > + p_2 < \Psi_2|\hat{p}|\Psi_2 >$$

Т.е. p считается как матожидание от двух ситуаций: когда аноним нам оставил частицу с ВФ $|\Psi_1>$, тогда среднее значение импульса равно

$$< \Psi_1|\hat{p}|\Psi_1 > = \int_{-L/2}^{L/2} \Psi_1^*(x) * -\frac{i\hbar d\Psi_1(x)}{dx} dx$$

И если частица имеет ВФ $|\Psi_2>$, в этом случае среднее значение импульса равно

$$< \Psi_2|\hat{p}|\Psi_2 > = \int_{-L/2}^{L/2} \Psi_2^*(x) * -\frac{i\hbar d\Psi_2(x)}{dx} dx$$

А выражения для $\Psi_1(x)$ и $\Psi_2(x)$ приведены выше.
Подстановок дофига, но что ж поделать – задачи от Парфёнова сложные.

В заключение (это необязательно к прочтению) посмотрим, какое решение ждёт от нас Парфёнов.
Он хочет, чтобы мы воспользовались формулой:

$$\langle A \rangle = Tr(\hat{A}\hat{\rho})$$

Если A – наблюдаемая величина, то надо просто перемножить его матрицу с матрицей плотности. И потом подсчитать след.
В данной задаче

$$\langle p \rangle = Tr(\hat{p}\hat{\rho})$$

Есть проблема: а что такое матрица импульса? Откуда нам её получить?

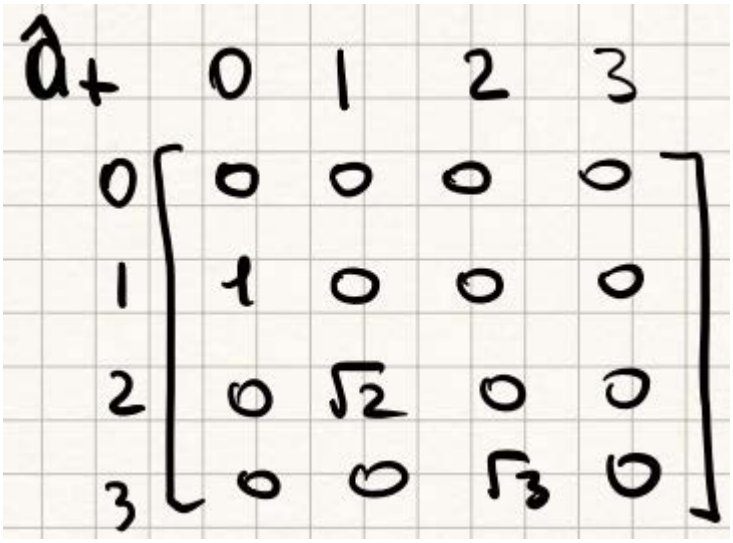
Вам наверняка знаком оператор импульса вот в таком виде:

$$\hat{p}\Psi = -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x}$$

Это координатное представление. В координатном представлении оператор импульса есть производная. А в энергетическом это матрица ☺

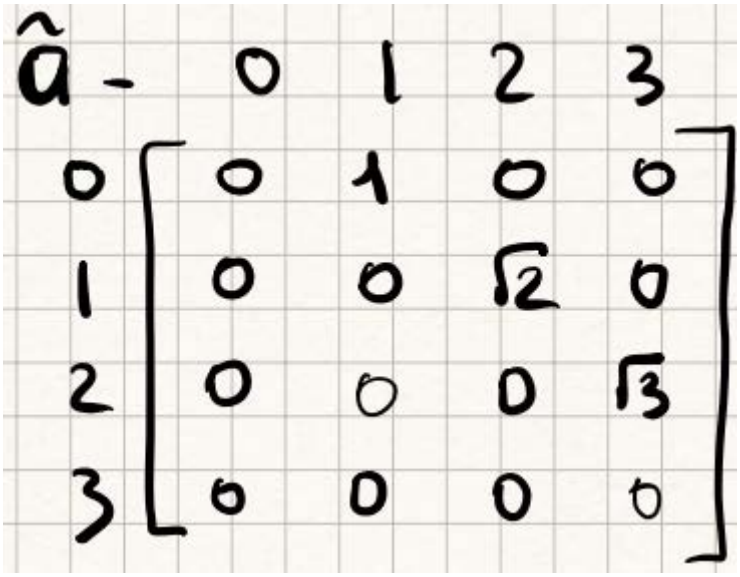
Как её искать?
Потренируемся. Например, найдём матрицу импульса в гармоническом осциллятора.

Для этого сначала построим матрицы операторов рождения и уничтожения:



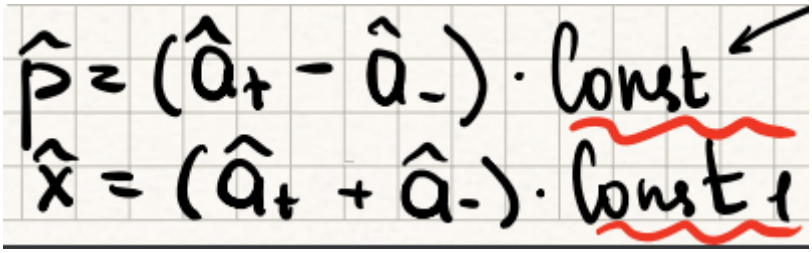
Как получается эта матрица?
Нулевой столбец – действуем повышающим оператором на |0>. Получим 1|1>. Ставим 1 в 1-ю строчку, остальным 0.
Первый столбец – действуем повышающим оператором на |1>. Получим $\sqrt[2]{2}|2>$. Ставим $\sqrt[2]{2}$ во 2-ю строчку, остальным 0.
Второй столбец – действуем повышающим оператором на |2>. Получим $\sqrt[2]{3}|3>$. Ставим $\sqrt[2]{3}$ в 3-ю строчку, остальным 0.
И так далее. Матрица бесконечна, просто всё не пометилось.

Поняли принцип?
А теперь давайте с оператором уничтожения.



Нулевой столбец – если «даунгрейдить» нулевое состояние, то будут всюда нули.
Если первое – то будет нулевое, с коэфом 1.
Если второе – то будет первое, с коэфом $\sqrt[2]{2}$
Если третье – то будет второе, с коэфом $\sqrt[2]{3}$
Поняли принцип?

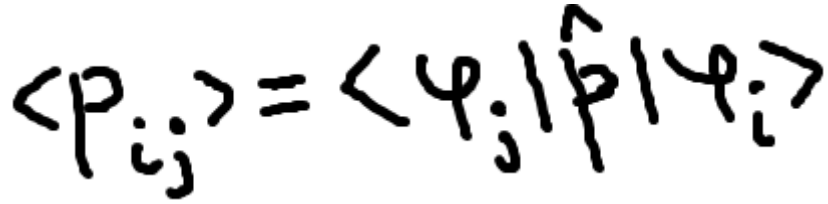
А теперь оператор импульса. Он имеет вид



Где константы – какие-то выражения, зависящие с m и ω.

Чтобы получить матрицу импульса, нужно вычесть матрицу $\hat{a}_+$ из матрицы $\hat{a}_-$. А чтобы получить матрицу координату – сложить.

В общем случае ij-тый элемент матрицы импульса имеет вид матричного элемента:



И в этом основная проблема – очень много надо их считать, матричных элементов. Каждый матричный элемент – интеграл.
Т.е. мы должны взять наши СФ

$$sin(k_n x)$$

Если n нечётно, то СФ, ему соответствующая

$$cos(k_n x)$$

И сосчитать много-много интегралов вида

$$\int_{L/2}^{L/2} j - \text{тый косинус или синус} * \frac{\partial}{\partial x} i - \text{тый косинус или синус} * dx$$

Всё ради того, чтобы потом домножить на матрицу плотности и подставить в ту формулу!