Часть 4

ЭВОЛЮЦИЯ КВАНТОВОЙ СИСТЕМЫ ВО ВРЕМЕНИ

Эволюция матрицы плотности во времени. Квантовое уравнение Лиувилля (уравнение фон Неймана)

В разделе "Постулаты квантовой механики" было показано, что вектор состояния $|\,\psi_\ell\,\rangle$ замкнутой квантовой системы, описываемой гамильтонианом $\hat{H}(t)$, в представлении Шредингера ((S)) удовлетворяет уравнению:

$$i\,\hbar\,\frac{\partial\,\left|\,\psi_\ell^{(S)}(t)\,\right\rangle}{\partial\,t} = \hat{H}^{(S)}(t)\,\left|\,\psi_\ell^{(S)}(t)\,\right\rangle$$

с начальным условием $\left|\,\psi_\ell^{(S)}(t=t_0)\,\right\rangle = \left|\,\psi_{\ell\,0}^{(S)}\,\right\rangle$. Решение этого уравнения можно записать при помощи оператора эволюции $\hat{U}(t,\,t_0)$ в следующем виде:

$$\left|\,\psi_\ell^{(S)}(t)\,\right\rangle = \hat{U}(t,\,t_0)\,\left|\,\psi_{\ell\,0}^{(S)}\,\right\rangle.$$

Оператор эволюции обладает следующими свойствами:

$$\hat{U}(t,\,t_0)\,\hat{U}^\dagger(t,\,t_0) = \hat{U}^\dagger(t,\,t_0)\,\hat{U}(t,\,t_0) = \hat{1} \text{ и } \hat{U}(t_0,\,t_0) = \hat{1}.$$

Подставим $\left| \psi_\ell^{(S)}(t) \right\rangle$ в уравнение Шредингера и учтем, что $\left| \psi_{\ell\,0}^{(S)} \right\rangle$ от времени не зависит. Тогда получим уравнение для оператора эволюции:

$$i\,\hbar\,\frac{\partial\,\hat{U}(t,\,t_0)}{\partial\,t} \;=\; \hat{H}^{(S)}(t)\,\hat{U}(t,\,t_0)$$

с начальным условием $\hat{U}(t_0,\,t_0) = \hat{1}$. Учтя, что $\hat{H}^{\dagger}(t) = \hat{H}(t)$, эрмитовым сопряжением предыдущего уравнения получаем уравнение на $\hat{U}^{\dagger}(t,\,t_0)$ в виде:

$$-\,i\,\hbar\,\frac{\partial\,\hat{U}^{\dagger}(t,\,t_0)}{\partial\,t} \;=\; \hat{U}^{\dagger}(t,\,t_0)\,\hat{H}^{(S)}(t).$$

Матрица плотности чистого состояния $\hat{\rho}_\ell^{(S)}(t)$, очевидно, следующим образом зависит от времени:

$$\hat{\rho}_\ell^{(S)}(t) = \left| \psi_\ell^{(S)}(t) \right\rangle \left\langle \psi_\ell^{(S)}(t) \right| = \hat{U}(t,\,t_0)\,\left(\left| \psi_{\ell\,0}^{(S)} \right\rangle \left\langle \psi_{\ell\,0}^{(S)} \right| \right)\,\hat{U}^{\dagger}(t,\,t_0) = \\ = \hat{U}(t,\,t_0)\;\hat{\rho}_{\ell\,0}^{(S)}\;\hat{U}^{\dagger}(t,\,t_0),$$

где $\hat{\rho}_\ell^{(S)}(t = t_0) = \hat{\rho}_{\ell\,0}^{(S)}$ – начальное условие.

Найдем, какому дифференциальному уравнению удовлетворяет матрица плотности $\hat{\rho}_\ell^{(S)}(t)$. Имеем:

$$i\,\hbar\,\frac{\partial\,\hat{\rho}_\ell^{(S)}(t)}{\partial\,t} =$$

$$= \left(i\,\hbar\,\frac{\partial\,\hat{U}(t,\,t_0)}{\partial\,t}\right)\,\hat{\rho}_{\ell\,0}^{(S)}\,\hat{U}^\dagger(t,\,t_0) + \hat{U}(t,\,t_0)\,\hat{\rho}_{\ell\,0}^{(S)}\,\left(i\,\hbar\,\frac{\partial\,\hat{U}^\dagger(t,\,t_0)}{\partial\,t}\right) =$$

$$= \hat{H}^{(S)}(t)\,\hat{U}(t,\,t_0)\,\hat{\rho}_{\ell\,0}^{(S)}\,\hat{U}^\dagger(t,\,t_0) - \hat{U}(t,\,t_0)\,\hat{\rho}_{\ell\,0}^{(S)}\,\hat{U}^\dagger(t,\,t_0)\,\hat{H}^{(S)}(t) =$$

$$= \hat{H}^{(S)}(t)\,\hat{\rho}_\ell^{(S)}(t) - \hat{\rho}_\ell^{(S)}(t)\,\hat{H}^{(S)}(t) = \left[\hat{H}^{(S)}(t),\,\hat{\rho}_\ell^{(S)}(t)\right].$$

Таким образом, матрица плотности чистого состояния $|\,\psi_\ell\,\rangle$ удовлетворяет следующему дифференциальному уравнению

$$i\,\hbar\,\frac{\partial\,\hat{\rho}_\ell^{(S)}(t)}{\partial\,t} = \left[\hat{H}^{(S)}(t),\,\hat{\rho}_\ell^{(S)}(t)\right]$$

с начальным условием $\hat{\rho}_\ell^{(S)}(t = t_0) = \hat{\rho}_{\ell\,0}^{(S)}$. Это уравнение полностью эквивалентно нестационарному уравнению Шредингера для чистого состояния $\left|\,\psi_\ell^{(S)}(t)\,\right\rangle$.

Теперь мы можем найти, какому дифференциальному уравнению удовлетворяет матрица плотности

$$\hat{\rho}^{(S)}(t) = \sum_{\ell} W_\ell \, \hat{\rho}_\ell^{(S)}(t)$$

смешанного состояния в представлении Шредингера. Имеем:

$$\hat{\rho}^{(S)}(t) = \sum_{\ell} W_\ell \, \hat{U}(t,\, t_0) \, \hat{\rho}_{\ell\, 0}^{(S)} \, \hat{U}^\dagger(t,\, t_0) =$$

$$= \hat{U}(t,\, t_0) \left(\sum_{\ell} W_\ell \, \hat{\rho}_{\ell\, 0}^{(S)} \right) \hat{U}^\dagger(t,\, t_0) = \hat{U}(t,\, t_0) \, \hat{\rho}_0^{(S)} \, \hat{U}^\dagger(t,\, t_0).$$

Отсюда видно, что матрица плотности смешанного состояния должна удовлетворять точно такому же уравнению эволюции, как и матрица плотности чистого состояния, то есть:

$$i \hbar \, \frac{\partial \, \hat{\rho}^{(S)}(t)}{\partial \, t} = \left[\hat{H}^{(S)}(t), \, \hat{\rho}^{(S)}(t) \right]$$

с начальным условием $\hat{\rho}^{(S)}(t = t_0) = \hat{\rho}_0^{(S)}$. Это уравнение более общее, чем уравнение Шредингера для чистого состояния! Оно носит название **квантового уравнения Лиувилля** или **уравнения фон Неймана** для матрицы плотности.

Зависимость от времени среднего значения любой наблюдаемой A может быть вычислена согласно свойству д):

$$\langle A \rangle_\rho = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}^{(S)}(t)\,\hat{A}^{(S)}\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{U}(t,\,t_0)\,\hat{\rho}_0^{(S)}\,\hat{U}^\dagger(t,\,t_0)\,\hat{A}^{(S)}\right) =$$
$$= \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}_0^{(S)}\,\hat{U}^\dagger(t,\,t_0)\,\hat{A}^{(S)}\,\hat{U}(t,\,t_0)\right).$$

Воспользуемся определениями лекции "Нестационарное уравнение Шредингера" и перейдем от представления Шредингера к представлению Гейзенберга ((H)). Тогда независящую от времени матрицу $\hat{\rho}_0^{(S)}$ нужно трактовать как матрицу плотности квантовой системы в представлении Гейзенберга, то есть $\hat{\rho}^{(H)} = \hat{\rho}_0^{(S)} \equiv \hat{\rho}_0$. С учетом сделанных замечаний, можем окончательно написать:

$$\langle A \rangle_\rho = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}^{(S)}(t)\,\hat{A}^{(S)}\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}_0\,\hat{A}^{(H)}(t)\right).$$

Квантовое уравнение Лиувилля нужно рассматривать как Постулат N6', который является заменой Постулата N6 из лекции "Нестационарное уравнение Шредингера". Аналоги квантового уравнения Лиувилля несложно написать в представлении Гейзенберга и в представлении взаимодействия (см. раздел "Релаксационное уравнение для частицы в термостате").

Решение квантового уравнения Лиувилля

Будем искать решение квантового уравнения Лиувилля (уравнения фон Неймана)

$$i\,\hbar\,\frac{\partial\,\hat{\rho}^{(S)}(t)}{\partial\,t} = \left[\hat{H}^{(S)}(t),\,\hat{\rho}^{(S)}(t)\right]$$

с начальным условием $\hat{\rho}^{(S)}(t=t_0) = \hat{\rho}_0^{(S)}$ **в виде операторного ряда по степеням гамильтониана** $\hat{H}^{(S)}(t)$**:**

$$\hat{\rho}^{(S)}(t) = \hat{\rho}^{(S,\,0)}(t) + \hat{\rho}^{(S,\,1)}(t) + \hat{\rho}^{(S,\,2)}(t) + \ldots,$$

где слагаемое $\hat{\rho}^{(S,\,k)}(t) \sim \hat{H}(t_k)\,\hat{H}(t_{k-1})\,\ldots\,\hat{H}(t_1)$**. Подставляя этот ряд в уравнение фон Неймана, получаем рекурентное соотношение**

$$i\,\hbar\,\frac{\partial\,\hat{\rho}^{(S,\,k+1)}(t)}{\partial\,t} = \left[\hat{H}^{(S)}(t),\,\hat{\rho}^{(S,\,k)}(t)\right]$$

между членами ряда $\hat{\rho}^{(S,\,k+1)}(t)$ **и** $\hat{\rho}^{(S,\,k)}(t)$**.**

Используем это соотношение пошагово.

1) Пусть $k = 0$**. Тогда:** $i\hbar \dfrac{\partial\, \hat{\rho}^{(S,\,0)}(t)}{\partial\, t} = 0 \;\Rightarrow\; \hat{\rho}^{(S,\,0)}(t) = const = \hat{\rho}_0^{(S)}$**.**

2) Пусть теперь $k = 1$**. Подставляем** $\hat{\rho}_0^{(S)}$ **в правую часть уравнения фон Неймана и получаем:**

$$i\,\hbar\,\frac{\partial\,\hat{\rho}^{(S,\,1)}(t)}{\partial\,t} \;=\; \left[\hat{H}^{(S)}(t),\;\hat{\rho}_0^{(S)}\right],$$

откуда сразу следует решение для $\hat{\rho}^{(S,\,1)}(t)$ **в виде:**

$$\hat{\rho}^{(S,\,1)}(t) = -\,\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_0}^{t} d\tau_1\,\left[\hat{H}^{(S)}(\tau_1),\;\hat{\rho}_0^{(S)}\right].$$

3) Рассмотрим $k = 2$**. Тогда из дифференциального уравнения**

$$i\,\hbar\,\frac{\partial\,\hat{\rho}^{(S,\,2)}(t)}{\partial\,t} \;=\; \left[\hat{H}^{(S)}(t),\;\hat{\rho}^{(S\,1)}(t)\right]$$

получается следующее решение:

$$\hat{\rho}^{(S,2)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_0}^{t} d\tau_2 \left[\hat{H}^{(S)}(\tau_2),\, \hat{\rho}^{(S\,1)}(\tau_2)\right] =$$

$$= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int\limits_{t_0}^{t} d\tau_2 \int\limits_{t_0}^{\tau_2} d\tau_1 \left[\hat{H}^{(S)}(\tau_2),\, \left[\hat{H}^{(S)}(\tau_1),\, \hat{\rho}_0^{(S)}\right]\right].$$

Теперь нетрудно понять, как выглядит полное решение уравнения фон Неймана (квантового уравнения Лиувилля) в виде ряда по степеням гамильтониана $\hat{H}^{(S)}(t)$:

$$\hat{\rho}^{(S)}(t) = \hat{\rho}_0^{(S)} + \sum_{k=1}^{+\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^k \int\limits_{t_0}^{t} d\tau_k \int\limits_{t_0}^{\tau_k} d\tau_{k-1} \ldots \int\limits_{t_0}^{\tau_2} d\tau_1 \cdot$$

$$\cdot \left[\hat{H}^{(S)}(\tau_k),\, \left[\hat{H}^{(S)}(\tau_{k-1}),\, \ldots \left[\hat{H}^{(S)}(\tau_1),\, \hat{\rho}_0^{(S)}\right] \ldots\right]\right].$$

При этом вложенные коммутаторы в каждом из членов ряда располагаются так, что $t \geq \tau_k \geq \tau_{k-1} \geq \ldots \geq \tau_1 \geq t_0$.

Тогда среднее значение любой наблюдаемой A можно вычислить по формуле:

$$\langle A \rangle_\rho = \mathbf{Tr}\left(\hat{A}^{(S)}\hat{\rho}^{(S)}(t)\right) = \sum_{k=0}^{+\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^k \int_{t_0}^{t} d\tau_k \int_{t_0}^{\tau_k} d\tau_{k-1} \ldots \int_{t_0}^{\tau_2} d\tau_1$$

$$\mathbf{Tr}\left(\hat{A}^{(S)} \left[\hat{H}^{(S)}(\tau_k), \left[\hat{H}^{(S)}(\tau_{k-1}), \ldots \left[\hat{H}^{(S)}(\tau_1), \hat{\rho}_0^{(S)}\right] \ldots\right]\right]\right) =$$

$$= \mathbf{Tr}\left(\hat{A}^{(S)}\hat{\rho}_0^{(S)}\right) + \sum_{k=1}^{+\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^k \int_{t_0}^{t} d\tau_k \int_{t_0}^{\tau_k} d\tau_{k-1} \ldots \int_{t_0}^{\tau_2} d\tau_1$$

$$\mathbf{Tr}\left(\left[\ldots\left[\left[\hat{A}^{(S)}, \hat{H}^{(S)}(\tau_k)\right], \hat{H}^{(S)}(\tau_{k-1})\right], \ldots \hat{H}^{(S)}(\tau_1)\right] \hat{\rho}_0^{(S)}\right).$$

При переходе к последнему равенству мы воспользовались известным операторным тождеством:

$$\mathbf{Tr}\left(\hat{A}_1 \left[\hat{A}_2, \left[\hat{A}_3, \ldots \left[\hat{A}_n, \hat{B}\right] \ldots\right]\right]\right) = \mathbf{Tr}\left(\left[\ldots\left[\left[\hat{A}_1, \hat{A}_2\right], \hat{A}_3\right], \ldots \hat{A}_n\right] \hat{B}\right).$$

Докажите его самостоятельно по индукции. Для этого начните с более простого соотношения $\mathbf{Tr}\left(\hat{A}_1 \left[\hat{A}_2, \hat{B}\right]\right) = \mathbf{Tr}\left(\left[\hat{A}_1, \hat{A}_2\right] \hat{B}\right)$.

Важный частный случай

Рассмотрим важный частный случай, когда гамильтониан $\hat{H}^{(S)}$ **явно от времени НЕ зависит, то есть**

$$\hat{H}^{(S)}(\tau_k) = \hat{H}^{(S)}(\tau_{k-1}) = \ldots = \hat{H}^{(S)}(\tau_1) = \hat{H}^{(S)}.$$

Тогда коммутатор

$$\left[\hat{H}^{(S)}(\tau_k), \left[\hat{H}^{(S)}(\tau_{k-1}), \ldots \left[\hat{H}^{(S)}(\tau_1), \hat{\rho}_0^{(S)}\right] \ldots\right]\right] = \left[\hat{H}^{(S)}, \left[\hat{H}^{(S)}, \ldots \left[\hat{H}^{(S)}, \hat{\rho}_0^{(S)}\right] \ldots\right]\right]$$

может быть вынесен из под знака интеграла, а само интегрирование по времени будет равно:

$$\int\limits_{t_0}^{t} d\tau_k \int\limits_{t_0}^{\tau_k} d\tau_{k-1} \ldots \int\limits_{t_0}^{\tau_2} d\tau_1 = \frac{1}{k!} \int\limits_{t_0}^{t} d\tau_k \int\limits_{t_0}^{t} d\tau_{k-1} \ldots \int\limits_{t_0}^{t} d\tau_1 = \frac{(t - t_0)^k}{k!}.$$

С учетом этого, можно написать, что:

$$\hat{\rho}^{(S)}(t) = \hat{\rho}_0^{(S)} + \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{1}{k!} \left(-\frac{i(t-t_0)}{\hbar}\right)^k \left[\hat{H}^{(S)}, \left[\hat{H}^{(S)}, \ldots \left[\hat{H}^{(S)}, \hat{\rho}_0^{(S)}\right] \ldots\right]\right].$$

Воспользуемся формулой

$$e^{\hat{A}}\,\hat{B}\,e^{-\hat{A}} \;=\; \hat{B} + \frac{1}{1!}\left[\hat{A},\,\hat{B}\right] + \frac{1}{2!}\left[\hat{A},\,\left[\hat{A},\,\hat{B}\right]\right] + \ldots,$$

в которой положим $\hat{B} = \hat{\rho}_0^{(S)}$ и $\hat{A} = -i\,\dfrac{t - t_0}{\hbar}\,\hat{H}^{(S)}$. Тогда зависимость матрицы плотности от времени приобретает абсолютно тривиальный вид:

$$\hat{\rho}^{(S)}(t) = e^{-i\,(t-t_0)\hat{H}^{(S)}/\hbar}\,\hat{\rho}_0^{(S)}\,e^{\,i\,(t-t_0)\hat{H}^{(S)}/\hbar}.$$

В большинстве практически важных случаев достаточно использовать именно эту простую формулу. Заметим, что если гамильтониан $\hat{H}^{(S)}$ явно не зависит от времени, то оператор эволюции имеет очень простой вид (докажите самостоятельно!):

$$\hat{U}(t,\,t_0) \;=\; e^{-i\,(t-t_0)\hat{H}^{(S)}/\hbar}.$$

Сложная же формула с $\hat{H}^{(S)}(t)$ может помочь, если, например, рассматривать частицу в термодинамическом окружении.

Уравнение Блоха

Продемонстрируем, как из уравнения фон Неймана следует уравнение Блоха, которое описывает эволюцию среднего значения спина электрона в магнитном поле.

В лекции "Движение квантовых систем в магнитном поле" было показано, что гамильтониан электрона во внешнем постоянном и однородном магнитном поле $\vec{\mathcal{H}}$ имеет вид:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \text{ где } \hat{V} = 2\mu_0 \left(\vec{\mathcal{H}}\,\vec{S}\right) = \mu_0 \left(\vec{\mathcal{H}}\,\vec{\sigma}\right),$$

$\mu_0 = e\hbar/2m_e c$ **– магнетон Бора,** $e = |e|$**, а гамильтониан** $\hat{H}_0$ **не зависит от спиновых переменных.**

Для дальнейших вычислений введем ларморовскую частоту

$$\vec{\Omega} = \frac{2\mu_0}{\hbar}\,\vec{\mathcal{H}} = \frac{e\,\vec{\mathcal{H}}}{m_e\,c}.$$

С учетом этих обозначений полный гамильтониан электрона во внешнем магнитном поле имеет вид:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = \hat{H}_0 + \frac{\hbar}{2}\,\left(\vec{\Omega}\,\vec{\sigma}\right).$$

Зависящая от времени матрица плотности спина $s = 1/2$

$$\hat{\rho}(t) = \frac{1}{2}\,\left(\hat{1} + \vec{p}(t)\,\vec{\sigma}\right); \;\; \vec{p}(t) = 2\,\left\langle\,\vec{S}(t)\,\right\rangle_{\rho}$$

удовлетворяет следующему уравнению фон Неймана

$$\frac{\partial\,\hat{\rho}\,(t)}{\partial\,t} = \frac{i}{\hbar}\,\left[\hat{\rho}(t),\,\hat{H}\right] = \frac{i}{\hbar}\,\left[\hat{\rho}(t),\,\hat{V}\right],$$

поскольку $\left[\hat{\rho}(t),\,\hat{H}_0\right] = 0$ **в силу независимости** $\hat{H}_0$ **от спиновых переменных.**

Расписываем правую часть уравнения фон Неймана:

$$\frac{i}{\hbar}\,\left[\hat{\rho}(t),\,\hat{V}\right] = \frac{i}{\hbar}\,\frac{\hbar}{2}\,\Omega_k\,\left[\hat{\rho}(t),\,\sigma_k\right] = \frac{i}{2}\,\Omega_k\,\frac{p_j(t)}{2}\,\left[\sigma_j,\,\sigma_k\right] =$$

$$= \frac{i}{2}\,\Omega_k\,\left\langle\,S_j\,\right\rangle_{\rho}\,2\,i\,\varepsilon_{jki}\,\sigma_i = -\sigma_i\,\varepsilon_{ijk}\,\left\langle\,S_j\,\right\rangle_{\rho}\,\Omega_k = -\sigma_i\,\left[\left\langle\,\vec{S}(t)\,\right\rangle_{\rho}\,\times\,\vec{\Omega}\right]_i.$$

Левая часть уравнения: $\dfrac{\partial\,\hat{\rho}\,(t)}{\partial\,t} = \dfrac{1}{2}\,\sigma_i\,\dfrac{\partial\,\vec{p}\,(t)}{\partial\,t} = \sigma_i\,\left(\dfrac{\partial\,\langle\,S_i(t)\,\rangle_{\rho}}{\partial\,t}\right).$

Тогда уравнение фон Неймана приобретает вид:

$$\sigma_i \left(\frac{\partial \left\langle S_i(t) \right\rangle_\rho}{\partial t} \right) = -\sigma_i \left[\left\langle \vec{S}(t) \right\rangle_\rho \times \vec{\Omega} \right]_i .$$

Это уравнение задает покомпонентное равенство. Переходя от компонент к векторам и перенося все слагаемые в левую часть окончательно получим

$$\frac{\partial \left\langle \vec{S}(t) \right\rangle_\rho}{\partial t} + \left[\left\langle \vec{S}(t) \right\rangle_\rho \times \vec{\Omega} \right] = 0$$

уравнение Блоха в векторной форме без затухания.

По своей сути уравнение Блоха – это классическое уравнение прецессии. Аналогично ведет себя гироскоп при приложении внешней силы. Уравнение Блоха применяется для описания коллективной динамики спинов, например, классической теории спиновых волн и эффекта спинового эха.

Обобщенная формула фон Неймана

Обобщим формулу фон Неймана для условной вероятности с учетом зависимости матрицы плотности от времени.

Вопрос: какова вероятность того, что в момент времени t_2 в спектре наблюдаемой B будет измерено конкретное значение $b_{k'}$, если в момент времени $t_1 \le t_2$ в спектре наблюдаемой A было измерено значение $a_{n'}$?

Ответ: пусть квантовая система описывается гамильтонианом $\hat{H}^{(S)}(t)$, при помощи которого можно построить оператор эволюции $\hat{U}(t_2,\, t_1)$. Тогда искомая условная вероятность в представлении Шредингера задается формулой:

$$w(b_{k'}, t_2 \,|\, a_{n'}, t_1) = \mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(B)}_{k'}\hat{\rho}^{(A)}_{n'}(t_2)\right) =$$

$$= \lim_{\Delta t \to 0} \mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(B)}_{k'}\hat{U}(t_2,\, t_1+\Delta t)\,\hat{\rho}^{(A)}_{n'}(t_1+\Delta t)\,\hat{U}^{\dagger}(t_2,\, t_1+\Delta t)\right) =$$

$$= \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(B)}_{k'}\,\hat{U}(t_2,\, t_1+\Delta t)\,\hat{P}^{(A)}_{n'}\,\hat{\rho}(t_1-\Delta t)\,\hat{P}^{(A)}_{n'}\,\hat{U}^{\dagger}(t_2,\, t_1+\Delta t)\right)}{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(A)}_{n'}\,\hat{\rho}(t_1-\Delta t)\right)}.$$

Обратите внимание на разные знаки при Δt в матрицах $\hat{\rho}$ и $\hat{\rho}^{(A)}_{n'}$, которые определяют моменты времени до $(-)$ и после $(+)$ измерения наблюдаемой A соответственно.

Квантовый парадокс Зенона

Зенон Элейский (ок. 490 г. до н.э. – ок. 430 г.до н.э.) – греческий философ, посвятивший себя опровержению философских взглядов пифагорейцев при помощи парадоксов или апорий. Самая знаменитая его апория называется "Ахилл и черепаха".

Известный воин Ахилл решил соревноваться в беге с черепахой. Ахилл может бежать в 1000 раз быстрее, чем черепаха. Поэтому перед началом забега Ахилл дает черепахе фору в 1000 метров. Сможет ли Ахилл догнать черепаху? Зенон приводит рассуждение, которое должно убедить читателя в невозможности подобного исхода. Действительно, пока Ахилл пробежит 1000 метров, черепаха проползет 1 метр и окажется впереди Ахилла. Когда Ахилл преодалеет и это расстояние, то черепаха будет опережать его на 1 мм. И так далее. Таким образом, черепаха, пусть на микроскопическое расстояние, но всегда будет впереди Ахилла!

Решение парадокса сводится к суммированию ряда бесконечной геометрической прогрессии, первый член которой равен $1000/v$, а знаменатель $10^{-3} < 1$, где v – скорость бега Ахилла. Если $v = 10$ м/с, то Ахилл догонит черепаху через $100000/999 \approx 100,1$ сек.

Во времена Зенона не существовало понятия предела, а потому не было понятно, что бесконечный ряд может иметь конечную сумму.

Квантовый аналог парадокса Зенона заключается в следующем. Пусть квантовая система, эволюция которой описывается при помощи явно не зависящего от времени гамильтониана $\hat{H}$, в момент времени $t_0 = 0$ находилась в чистом состоянии $|\,\psi_1\,\rangle$. Оказывается, что вероятность найти систему в этом же состоянии в произвольный момент времени зависит от того, с какой частотой мы производим измерение состояния микросистемы! При достаточно большой частоте измерений мы можем **"заморозить"** квантовую систему в начальном состоянии **на сколь угодно большой промежуток времени**.

Для доказательства рассмотрим момент времени $\Delta t \ll 1$. Вероятность микросистеме находиться в состоянии $\hat{\rho}_1 = |\,\psi_1\,\rangle\,\langle\,\psi_1\,|$ в представлении Шредингера задается формулой:

$$w(\Delta t) = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}_1^{(S)}\hat{\rho}^{(S)}(\Delta t)\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}_1^{(S)} e^{-i\,\Delta t\,\hat{H}^{(S)}/\hbar}\,\hat{\rho}_1^{(S)}\,e^{i\,\Delta t\,\hat{H}^{(S)}/\hbar}\right) =$$

$$= \left|\left\langle\,\psi_1^{(S)}\,\middle|\,e^{-\frac{i}{\hbar}\,\hat{H}^{(S)}\,\Delta t}\,\middle|\,\psi_1^{(S)}\,\right\rangle\right|^2 =$$

$$= \left|\left\langle\,\psi_1^{(S)}\,\middle|\,\hat{1} - \frac{i}{\hbar}\,\hat{H}^{(S)}\,\Delta t + \frac{(-i)^2}{\hbar^2}\,\hat{H}^{(S)\,2}\,\Delta t^2 + \ldots\,\middle|\,\psi_1^{(S)}\,\right\rangle\right|^2 \approx$$

$$\approx \left|1 - \frac{i\,\Delta t}{\hbar}\,\left\langle\,\psi_1^{(S)}\,\middle|\,\hat{H}^{(S)}\,\middle|\,\psi_1^{(S)}\,\right\rangle - \frac{\Delta t^2}{2\,\hbar^2}\,\left\langle\,\psi_1^{(S)}\,\middle|\,\hat{H}^{(S)\,2}\,\middle|\,\psi_1^{(S)}\,\right\rangle\right|^2.$$

При разложении оператора эволюции в ряд следует учитывать как слагаемое $\sim \Delta t$, так и слагаемое $\sim \Delta t^2$, поскольку амплитуду вероятности необходимо возводить в квадрат. После возведения в окончательном выражении отсутствует слагаемое, пропорциональное Δt. Тогда, учитывая лишь вклад слагаемого , пропорционального Δt^2, получаем

$$w(\Delta t) \approx 1 - \frac{\Delta t^2}{\hbar^2} \left(\left\langle \psi_1^{(S)} \middle| \hat{H}^{(S)\,2} \middle| \psi_1^{(S)} \right\rangle - \left\langle \psi_1^{(S)} \middle| \hat{H}^{(S)} \middle| \psi_1^{(S)} \right\rangle^2 \right) =$$
$$= 1 - \frac{\Delta t^2}{\hbar^2} \sigma_H.$$

Теперь рассмотрим эволюцию системы за время t. Пусть через малый промежуток Δt производится измерение состояния системы и пусть $t = N\Delta t = const$, но $N \to \infty$ и $\Delta t \to 0$. Тогда вероятность системе остаться в начальном состоянии, когда число измерений $N \to \infty$, есть

$$w(t) = \lim_{N\to\infty} \left(1 - \frac{\Delta t^2}{\hbar^2} \sigma_H\right)^N = \lim_{N\to\infty} \left(1 - \frac{\sigma_H}{\hbar^2} \frac{t^2}{N^2}\right)^N =$$
$$= \lim_{N\to\infty} \left(1 - \frac{\gamma\, t^2/N}{N}\right)^N = \lim_{N\to\infty} e^{-\gamma\, t^2/N} = 1,$$

где $\gamma = \sigma_H/\hbar^2 > 0$. Таким образом, квантовый парадокс Зенона полностью доказан.

Иногда квантовый парадокс Зенона называют парадоксом нетерпеливой хозяйки или парадоксом незакипающего чайника. Это менее звучно, зато ближе к истине.

Действительно, пусть нетерпеливая хозяйка хочет вскипятить чайник. Она ставит чайник на плиту, а затем начинает часто-часто открывать крышку чайника и заглядывать во внутрь, чтобы узнать, закипела ли вода.

Очевидно, что чем чаще хозяйка будет открывать крышку, тем меньше будет температура у поверхности воды (нагретый пар смешивается с холодным воздухом из кухни) и самих верхних слоев воды. Когда образующиеся на дне чайника пузырьки попадают в верхние более холодные слои воды, то пар в них конденсируется, давление насыщенного пара уменьшается и пузырьки схлопываются. Поскольку кипением называется образование пузырьков на поверхности жидкости, то частое открывание крышки чайника увеличивает время до начала кипения.

Аналогия с частым измерением состояния квантовой системы налицо.

Производная оператора по времени для смешанных состояний

Обобщим на смешанные состояния Постулат N7 из раздела "Постулаты квантовой механики" для производной оператора по времени следующим образом.

Постулат N7': оператор $\hat{B} \equiv d\hat{A}/dt$ (читается как единый символ!) называется производной оператора $\hat{A}$ по времени, если выполняется следующее равенство для средних величин наблюдаемой A:

$$\langle\, B\,\rangle_\rho\,(t) \,=\, \frac{d}{dt}\,\Big(\langle\, A\,\rangle_\rho\,(t)\Big).$$

Исходя из этого постулата и уравнения фон Неймана в представлении Шредингера можно получить явный вид оператора $\hat{B}$ в представлении Шредингера. Имеем:

$$\mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}^{(S)}\,\hat{B}^{(S)}\right) = \frac{d}{dt}\,\mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}^{(S)}\,\hat{A}^{(S)}\right) = \mathbf{Tr}\left(\frac{\partial\hat{\rho}^{(S)}}{\partial t}\,\hat{A}^{(S)} + \hat{\rho}^{(S)}\,\frac{\partial\hat{A}^{(S)}}{\partial t}\right) =$$

$$= \mathbf{Tr}\left(\frac{1}{i\hbar}\,\left[\hat{H}^{(S)},\,\hat{\rho}^{(S)}\right]\hat{A}^{(S)} + \hat{\rho}^{(S)}\,\frac{\partial\hat{A}^{(S)}}{\partial t}\right).$$

Чтобы преобразовать первое слагаемое, воспользуемся операторным равенством, которое очень легко доказать:

$$\mathbf{Tr}\left(\left[\hat{A}_1,\, \hat{A}_2\right]\, \hat{B}\right) = -\mathbf{Tr}\left(\hat{A}_2\, \left[\hat{A}_1,\, \hat{B}\right]\right).$$

Тогда:

$$\mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}^{(S)}\, \hat{B}^{(S)}\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}^{(S)}\left(-\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{H}^{(S)},\, \hat{A}^{(S)}\right] + \frac{\partial \hat{A}^{(S)}}{\partial t}\right)\right).$$

Отсюда видно, что

$$\left(\frac{d\hat{A}}{dt}(t)\right)^{(S)} = \hat{B}^{(S)} = \frac{\partial \hat{A}^{(S)}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}^{(S)},\, \hat{A}^{(S)}\right].$$

То есть производная оператора по времени для смешанных состояний выглядит точно также, как и для чистых состояний. Поэтому все рассуждения о законах сохранения тоже остаются в силе.

Квантовое уравнение Лиувилля в координатном представлении

Для практических вычислений запишем уравнение

$$i\,\hbar\,\frac{\partial\,\hat{\rho}\,(t)}{\partial\,t} = \left[\hat{H}(t),\,\hat{\rho}(t)\right]$$

в координатном представлении. Начнем с одномерного случая:

$$i\,\hbar\,\frac{\partial\,(\langle\,x\,|\,\hat{\rho}\,(t)\,|\,x'\,\rangle)}{\partial\,t} = \left\langle\,x\,\middle|\,\hat{H}(t)\,\hat{\rho}(t)\,\middle|\,x'\,\right\rangle - \left\langle\,x\,\middle|\,\hat{\rho}(t)\,\hat{H}(t)\,\middle|\,x'\,\right\rangle.$$

Определим матрицу плотности в координатном представлении как:

$$\rho\,(x,\,x',\,t)\,\equiv\,\langle\,x\,|\,\hat{\rho}\,(t)\,|\,x'\,\rangle.$$

Из стандартных курсов квантовой механики хорошо известно, что ядро оператора Гамильтона $\hat{H}$ в координатном представлении имеет вид:

$$\left\langle\,x\,\middle|\,\hat{H}\,\middle|\,x'\,\right\rangle = \delta(x-x')\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0}\,\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x,\,t)\right) = \left\langle\,x'\,\middle|\,\hat{H}\,\middle|\,x\,\right\rangle.$$

Переход к последнему равенству возможен из-за четности δ-функции. Тогда:

$$\left\langle x \left| \hat{H}\, \hat{\rho}(t) \right| x' \right\rangle = \left\langle x \left| \hat{H}\, \hat{1}_{\tilde{x}}\, \hat{\rho}(t) \right| x' \right\rangle = \int d\tilde{x} \left\langle x \left| \hat{H} \right| \tilde{x} \right\rangle \langle \tilde{x} \,|\, \hat{\rho}(t) \,|\, x' \rangle =$$

$$= \int d\tilde{x}\, \delta(x-\tilde{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x,\, t) \right) \rho\left(\tilde{x},\, x',\, t\right) =$$

$$= \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x,\, t) \right) \rho\left(x,\, x',\, t\right).$$

Аналогично для второго матричного элемента находим:

$$\left\langle x \left| \hat{\rho}(t)\, \hat{H} \right| x' \right\rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial x'^2} + U(x',\, t) \right) \rho\left(x,\, x',\, t\right).$$

Тогда квантовое уравнение Лиувилля (уравнение фон Неймана) в координатном представлении имеет вид:

$$i\hbar \frac{\partial\, \rho\left(x, x', t\right)}{\partial\, t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial x'^2} \right) + \left(U(x,t) - U(x',t) \right) \right) \rho\left(x, x', t\right).$$

Обобщение на трехмерный случай напишите самостоятельно.

Матрица плотности свободной частицы

В качестве простейшего примера решения уравнения фон Неймана в координатном представлении найдем матрицу плотности свободной частицы в одномерном случае. Имеем:

$$i\hbar\frac{\partial\,\rho\,(x,x',t)}{\partial\,t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial x'^2}\right)\rho\,(x,x',t).$$

Данное дифференциальное уравнение допускает разделение переменных в виде:

$$\rho\,(x,x',t)\;=\;\psi(x,t)\,\psi^*(x',t).$$

Подобное разделение переменных имеет простой физический смысл. Поскольку свободная частица не может находиться в смешанном состоянии, то ее матрица плотности должна записываться как матрица плотности чистого состояния, то есть:

$$\hat{\rho}(t) = |\,\psi(t)\,\rangle\,\langle\,\psi(t)\,| = \int dx\,dx'\,|\,x\,\rangle\,\langle\,x\,|\;\psi(t)\,\rangle\;\langle\,\psi(t)\,|\;x'\,\rangle\,\langle\,x'\,| \equiv$$

$$\equiv\;\int dx\,dx'\,|\,x\,\rangle\;\rho\,(x,x',t)\;\langle\,x'\,|,$$

где матрица плотности в координатном представлении

$$\rho\,(x, x', t) = \langle\, x \,|\; \psi\,\rangle\,\langle\,\psi\,|\; x'\,\rangle = \langle\, x \,|\; \psi\,\rangle\,(\langle\, x' \,|\; \psi\,\rangle)^* = \psi(x, t)\,\psi^*(x', t).$$

Подставим эту матрицу плотности в уравнение фон Неймана:

$$\frac{i\hbar\dfrac{\partial\,\psi\,(x, t)}{\partial\, t} + \dfrac{\hbar^2}{2m_0}\dfrac{\partial^2\psi(x, t)}{\partial x^2}}{\psi(x, t)} = \frac{-i\hbar\dfrac{\partial\,\psi^*\,(x', t)}{\partial\, t} + \dfrac{\hbar^2}{2m_0}\dfrac{\partial^2\psi^*(x', t)}{\partial {x'}^2}}{\psi^*(x', t)}.$$

Числители в правой и левой частях равенства представляют собой нестационарные уравнения Шредингера для волновой функции свободной частицы. Поэтому в данном случае уравнение фон Неймана сводится к уравнению

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial\, t} + \frac{\hbar^2}{2m_0}\,\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\,\psi(x, t) = 0,$$

общее решение которого хорошо известно и может быть записано в виде волнового пакета:

$$\psi(x, t) = \sum_{s_z}\int\,\frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,A(p)\,\chi_{s\,s_z}\;e^{-\dfrac{i}{\hbar}\,(E_p t - px)},\ \text{где}\ \ E_p = \frac{p^2}{2m_0}.$$

Вид $A(p)$ задается начальными и/или граничными условиями.

Функции $\chi_{s\,s_z}$ описывают спин частицы. Они нормированы стандартным условием $\chi^{\dagger}_{s\,s_z}\,\chi_{s\,s'_z} = \delta_{s_z\,s'_z}$. Тогда матрица плотности в координатном представлении будет иметь вид:

$$\rho\,(x, x', t) = \frac{2s+1}{2\pi\hbar}\,\int dp\,dp'\,A^*(p)A(p')\,e^{-\dfrac{i}{\hbar}\,((E_{p'} - E_p)t - p'x' + px)},$$

где мы учли, что $\sum\limits_{s_z}\sum\limits_{s'_z}\chi^{\dagger}_{s\,s_z}\,\chi_{s\,s'_z} = \sum\limits_{s_z}\sum\limits_{s'_z}\delta_{s_z\,s'_z} = 2s+1$. Это и есть формула для матрицы плотности свободной частицы в координатном представлении.

Рассмотрим пример. Для монохроматической волны функция $A(p) = \dfrac{\sqrt{2\pi\hbar}}{2s+1}\,\delta(p - p_0)$. Тогда

$$\rho\,(x, x', t) \equiv \rho\,(x, x') = \frac{1}{2s+1}\,e^{-\dfrac{i}{\hbar}\,p_0\,(x - x')}.$$

Свойство **в)** для матрицы плотности соблюдено, поскольку:

$$\mathbf{Tr}\hat{\rho} = \sum_{s_z}\rho\,(x, x, t) = (2s+1)\,\frac{1}{2s+1} = 1.$$