

Курс лекций

Матрица плотности



Н. В. Никитин

Кафедра физики атомного ядра и квантовой теории столкновений

Физический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова

2015 г.

Часть 1

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА ЧИСТЫХ СОСТОЯНИЙ

Постулаты квантовой механики (для чистых состояний)

Квантовая механика основывается на наборе **аксиом** или **постулатов**. Справедливость этих постулатов может быть проверена только путем сравнения предсказаний квантовой теории с экспериментом. Имеется множество практически эквивалентных между собой наборов постулатов (обратите внимание на слово **"практически"**!).

Постулат N1. Квантовая система описывается при помощи вектора состояния $|\psi\rangle$ в конечномерном или бесконечномерном гильбертовом пространстве \mathcal{H} .

Как правило, дополнительно предполагается, что вектор состояния $|\psi\rangle$ несет **максимально возможную информацию** о свойствах квантовой системы. Это **предположение является** до сих пор достаточно **дискуссионным**. Мы рассмотрим его подробнее, когда будем обсуждать **квантовую энтропию**.

Состояния микросистем, которые допускают описание в терминах векторов состояния $|\psi\rangle$, называются **чистыми состояниями**.

Постулат N2. Чистое состояние квантовой системы **определяется только направлением** вектора $|\psi\rangle$ в гильбертовом пространстве \mathcal{H} , но не длиной самого вектора. Иначе, чистое состояние микросистемы **задается лучом** в гильбертовом пространстве.

Чтобы иметь возможность простейшим способом ввести в квантовую теорию понятие **вероятности**, удобно сразу положить норму $\|\psi\| = 1$. То есть, для любого вектора $|\psi\rangle$, который описывает замкнутую (это важно!) микросистему, выполняется **условие нормировки**: $\langle \psi | \psi \rangle = 1$.

Из Постулата N1 и условия нормировки следует, что **эволюция замкнутых квантовых систем** во времени задается **унитарным оператором**. Действительно, если вектор $|\psi(t_0)\rangle$ полностью описывает состояние квантовой системы в начальный момент времени t_0 , то в произвольный момент времени t имеем:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad \text{и} \quad \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1,$$

откуда сразу следует, что $\hat{U}(t, t_0)^\dagger \hat{U}(t, t_0) = \hat{1}$. Поскольку унитарный оператор обратим, то эволюция замкнутой квантовой системы **обратима во времени**.

Постулат N3 или **принцип суперпозиции**. Предположим, что микросистема до измерения описывалась вектором состояния $|\psi\rangle$. Пусть в результате измерения микросистема может перейти в одно из нескольких состояний, которые **различаются при помощи макроприборов** (возможно, для этого нужно выполнить несколько действий). Согласно **Постулату N1**, каждому такому состоянию следует сопоставить свой вектор $|\varphi_n\rangle$. Тогда $|\psi\rangle$ можно представить в виде линейной комбинации (**суперпозиции**) состояний $|\varphi_i\rangle$ по формуле:

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\varphi_i\rangle,$$

где c_i – набор комплексных чисел (и/или функций), которые определяются при помощи скалярного произведения

$$c_i = \langle \varphi_i | \psi \rangle.$$

Формулу для коэффициентов c_i можно получить сразу, если понять, что макроскопически различимые состояния микросистемы должны описываться ортогональными векторами состояния $|\varphi_n\rangle$. При этом набор $\{|\varphi_i\rangle\}$ не обязательно должен образовывать базис в гильбертовом пространстве \mathcal{H} .

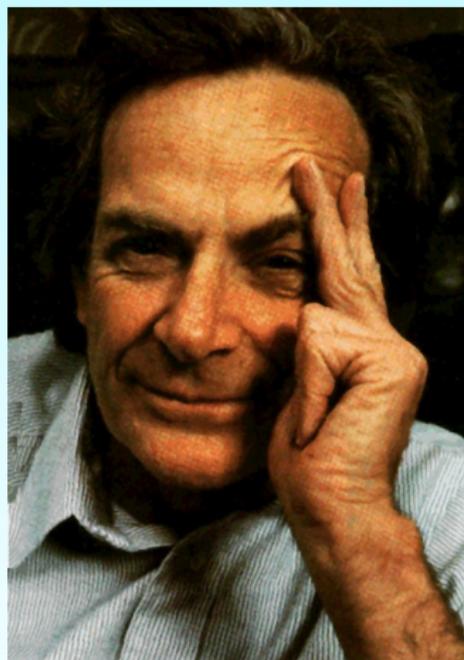
В прекрасных классических учебниках по квантовой механике, таких как книги **П.А.М.Дирака** "Принципы квантовой механики" и **Д.И.Блохинцева** "Принципиальные вопросы квантовой механики" (эти книги ОБЯЗАН прочесть любой студент, который предполагает связать свою жизнь с квантовой теорией!!!), утверждается, что именно принцип суперпозиции является краеугольным камнем квантового подхода к описанию Природы. Если бы квантовую физику можно было сформулировать исключительно в терминах векторов состояния, то это утверждение могло бы считаться правильным. Однако, это не так.

Ниже мы увидим, что более общая **формулировка** квантовой механики может быть дана **в терминах матрицы плотности**. В этой формулировке принцип суперпозиции выглядит весьма надумано. Кроме того, имеется **фейнмановская формулировка** с помощью интегралов по траекториям, в которой принцип суперпозиции играет достаточно второстепенную роль. Можно вспомнить **томографическую формулировку** (разрабатывается группой **В.И.Манько**). В этой формулировке принцип суперпозиции не используется.

Так какую же роль играет принцип суперпозиции? Скорее всего, этот принцип **задает простейший вариант правил корреляции** для состояний в микромире (**граница Цирельсона**), который выделяет квантовую теорию среди других возможных теорий, в том числе и классической физики.



Поль А.М. Дирак
(08.08.1902 – 20.10.1984)



Ричард Фейнман
(11.05.1918 – 15.02.1988)



**Борис Семёнович
Цирельсон**
(род. 04.05.1950)



**Владимир Иванович
Манько**
(род. 1940)

Постулат N4 о физическом смысле коэффициентов разложения c_j . В обозначениях **Постулата N3** **условная вероятность** w_i найти микросистему **ПОСЛЕ** измерения в состоянии $|\varphi_i\rangle$ если **ДО** измерения она находилась в состоянии $|\psi\rangle$ задается формулой:

$$w_i = |c_i|^2 = \langle \psi | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | \psi \rangle \equiv \langle \psi | \hat{P}_{\varphi_i} | \psi \rangle = \text{Tr} \left(\hat{P}_{\psi} \hat{P}_{\varphi_i} \right),$$

где $\hat{P}_{\varphi_i} = |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$ – проектор на чистое состояние $|\varphi_i\rangle$. Коэффициенты c_j носят название **амплитуд вероятности** нахождения системы в состоянии $|\varphi_i\rangle$. Происхождение данного термина очевидно из формулировки **Постулата N4**.

В литературе **Постулат N4** носит название **проекционного постулата Макса Борна** по имени немецкого физика-теоретика, который в **1926** году первым предложил **вероятностное толкование** коэффициентов c_j в принципе суперпозиции (Нобелевская премия по физике за **1954** год).

Постулат N4 предлагает **алгоритм сравнения** предсказаний квантовой механики с экспериментом, то есть открывает **возможность количественной проверки** квантовой теории.

Пусть свойства микросистемы характеризуются некоторой наблюдаемой величиной A . Стандартный эксперимент заключается в том, что при многократном измерении наблюдаемой на множестве идентичных квантовых систем, каждой из которых сопоставлен вектор состояния $|\psi\rangle$, с вероятностью w_1 будет найдено значение a_1 , с вероятностью w_2 – значение a_2 и так далее.

Постулат N5 или **постулат о соответствии наблюдаемых величин и операторов**. Любая микросистема обладает хотя бы одной экспериментально измеряемой физической величиной, которая для краткости называется **наблюдаемой**. Наблюдаемой A ставится в соответствие **эрмитов оператор** \hat{A} , собственные значения $\{a_i\}$ которого численно совпадают со всеми возможными результатами измерения наблюдаемой A . Тогда среднее значение этой наблюдаемой в любом допустимом микросостоянии $|\psi\rangle$ определяется по формуле:

$$\langle A \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \text{Tr} (\hat{P}_\psi \hat{A}).$$

Легко показать, что **вероятность измерения** конкретного значения a_n наблюдаемой A согласно квантовой теории равна $w_n = |c_n|^2$, где $\{c_i\}$ – набор коэффициентов разложения состояния $|\psi\rangle$ по собственным векторам $\{|a_i\rangle\}$ эрмитового оператора \hat{A} .

Пусть квантовая система описывается при помощи гамильтониана $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$. Разбиение гамильтониана зависит от используемого временного представления. Например, в представлении Шредингера $\hat{H}_1 = \hat{H}^{(S)}$ и $\hat{H}_2 = 0$, в представлении Гейзенберга $\hat{H}_1 = 0$ и $\hat{H}_2 = \hat{H}^{(H)}$, а в представлении взаимодействия $\hat{H}_1 = \hat{V}^{(I)}$ – оператор "возмущения" и $\hat{H}_2 = \hat{H}_0^{(I)}$ – оператор "невозмущенной системы". Зависимость или независимость $\hat{H}_{1,2}$ от времени также определяется выбором представления и конкретной задачи.

Постулат N6 об эволюции квантовой системы во времени. Если зависящее от времени среднее значение наблюдаемой A задается выражением

$$\langle A \rangle_\psi(t) \equiv \langle \psi(t) | \hat{A}(t) | \psi(t) \rangle.$$

то эволюция операторов и векторов состояния квантовой системы определяется системой уравнений:

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}_1 |\psi(t)\rangle \\ i\hbar \frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t} = [\hat{A}(t), \hat{H}_2]. \end{cases}$$

Для конкретных вычислений чаще всего пользуются **представлением Шредингера**. В этом представлении операторы явно от времени не зависят, а временная эволюция векторов состояния $|\psi^{(S)}(t)\rangle$ определяется **уравнением Шредингера**

$$i\hbar \frac{\partial |\psi^{(S)}(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}^{(S)} |\psi^{(S)}(t)\rangle$$

с начальным условием $|\psi^{(S)}(t = t_0)\rangle = |\psi_0^{(S)}\rangle$. Линейность уравнения Шредингера не противоречит **Постулату N1** и **Постулату N3 (принципу суперпозиции)**.

Решение этого уравнения удобно искать при помощи оператора эволюции $\hat{U}(t, t_0)$ в виде:

$$|\psi^{(S)}(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi_0^{(S)}\rangle.$$

Оператор эволюции обладает следующими свойствами:

$$\hat{U}(t, t_0) \hat{U}^\dagger(t, t_0) = \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) = \hat{1}, \quad \hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1}$$

и $\hat{U}(t_1, t_3) = \hat{U}(t_1, t_2) \hat{U}(t_2, t_3)$ (групповое свойство).

Постулат N7 о производной оператора по времени. В произвольном представлении сопоставим оператору \hat{A} наблюдаемой A новый оператор \hat{B} на совокупности состояний $|\psi\rangle$ по правилу:

$$\langle B \rangle_{\psi}(t) \equiv \frac{d}{dt} \left(\langle A \rangle_{\psi}(t) \right)$$

Тогда оператор \hat{B} называется **производной оператора \hat{A} по времени** и (не вполне удачно!) обозначается как $\hat{B} \equiv \frac{d\hat{A}}{dt}$. В данном случае обозначение в правой части равенства **следует понимать как ЕДИНЫЙ оператор!!!**

Оператор \hat{B} существует даже тогда, когда оператор \hat{A} явно от времени не зависит. Например, в представлении Шредингера:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle A \rangle_{\psi}(t) &= \frac{d}{dt} \langle \psi^{(s)}(t) | \hat{A}^{(s)} | \psi^{(s)}(t) \rangle = \left(\frac{d \langle \psi^{(s)}(t) |}{dt} \right) \hat{A}^{(s)} | \psi^{(s)}(t) \rangle + \\ &+ \langle \psi^{(s)}(t) | \hat{A}^{(s)} \left(\frac{d | \psi^{(s)}(t) \rangle}{dt} \right) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}^{(s)}, \hat{A}^{(s)}]. \end{aligned}$$

Таким образом $\left(\frac{d\hat{A}}{dt} \right)^{(s)} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}^{(s)}, \hat{A}^{(s)}].$

Теорема о невозможности клонирования произвольного чистого состояния

Пусть **Аленушка** (\equiv Алиса) хочет передать некоторую информацию **Братцуиванушке** (\equiv Бобу) при помощи вектора состояния $|\psi\rangle$. **Теорема утверждает**, что перехватившая это сообщение злобная **Егабаба** (\equiv Ева) **никогда не сможет** создать себе его **точную копию** так, чтобы о несанкционированном перехвате не узнали Аленушка и Братециванушка.

Действительно, чтобы Аленушка и Братециванушка не догадались о перехвате сообщения, Егабаба должна уметь из одного **ПРОИЗВОЛЬНОГО** вектора состояния $|\psi\rangle$ делать как минимум два абсолютно идентичных вектора, чтобы одну копию оставить себе для последующей дешифровки, а другую отослать Братцуиванушке, чтобы он не догадался о факте перехвата. Такой процесс называется **клонированием** вектора состояния.

Для доказательства предположим, что вектор состояния $|\psi\rangle$ представляет собой **суперпозицию** двух векторов состояния $|\varphi_1\rangle$ и $|\varphi_2\rangle$, то есть

$$|\psi\rangle = C_1|\varphi_1\rangle + C_2|\varphi_2\rangle.$$

Предположим, что процедура клонирования существует, и пусть эта процедура из произвольного вектора состояния $|\phi\rangle$ и “пустого” вектора состояния $|0\rangle$ делает две копии вектора $|\phi\rangle$, то есть:

$$|\phi\rangle|0\rangle \rightarrow |\phi\rangle|\phi\rangle.$$

С одной стороны, мы можем применить процедуру клонирования непосредственно к вектору $|\psi\rangle$. Это дает

$$\begin{aligned} |\psi\rangle|0\rangle \rightarrow |\psi\rangle|\psi\rangle &= (C_1|\varphi_1\rangle + C_2|\varphi_2\rangle) \times (C_1|\varphi_1\rangle + C_2|\varphi_2\rangle) = \\ &= C_1^2|\varphi_1\rangle|\varphi_1\rangle + C_2^2|\varphi_2\rangle|\varphi_2\rangle + C_1C_2(|\varphi_1\rangle|\varphi_2\rangle + |\varphi_2\rangle|\varphi_1\rangle). \end{aligned}$$

С другой стороны, гипотетическую операцию клонирования можно применить к каждому из векторов линейной комбинации. В этом случае:

$$|\psi\rangle|0\rangle = C_1|\varphi_1\rangle|0\rangle + C_2|\varphi_2\rangle|0\rangle \rightarrow C_1|\varphi_1\rangle|\varphi_1\rangle + C_2|\varphi_2\rangle|\varphi_2\rangle.$$

Если операция клонирования самосогласованна, то оба результата должны совпадать. Но из-за наличия дополнительного интерференционного слагаемого в первом случае, совпадение обоих способов клонирования состояния $|\psi\rangle$ возможно только при условии $C_1 = C_2 = 0$. В остальных случаях операция клонирования **НЕ согласуется** с **принципом суперпозиции** (Постулатом **N3**). Теорема доказана.

Первооткрыватели “No-cloning theorem”



W.H.Zurek



W.Wootters

Хотя вычисления, ведущие к доказательству теоремы о невозможности клонирования (по-английски “*No-cloning theorem*”), доступны любому студенту, но сама теорема была доказана только в 1982 году (больше чем через полвека после создания квантовой механики!) и опубликована в журнале Nature:

W. K. Wootters and W. H. Zurek, "A Single Quantum Cannot Be Cloned," Nature 299, p.802 (1982).

Совместное клонирование ортогональных состояний

В теореме о невозможности клонирования ключевую роль играет, что вектор состояния **НЕИЗВЕСТЕН**. **Известный вектор клонировать можно!**

Если известен вектор состояния $|\psi\rangle$, то можно найти ортогональные ему вектора. То есть эти вектора тоже известны и, следовательно, их можно клонировать наряду с вектором $|\psi\rangle$. Более того, клонирование может осуществляться одним и тем же унитарным оператором. Действительно, пусть \hat{U} – искомый унитарный оператор. Рассмотрим два состояния $|\psi\rangle$ и $|\varphi\rangle$, для которых осуществляется операция клонирования. Тогда:

$$\hat{U}|\psi\rangle|0\rangle = |\psi\rangle|\psi\rangle$$

$$\hat{U}|\varphi\rangle|0\rangle = |\varphi\rangle|\varphi\rangle$$

Теперь скалярно умножим одно равенство на другое. Получим:

$$|\langle\psi|\varphi\rangle|^2 = \langle 0|\langle\psi|\hat{U}^\dagger\hat{U}|\varphi\rangle|0\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle\langle 0|0\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle.$$

То есть необходимо решить уравнение $|x|^2 = x$, где $x = \langle\psi|\varphi\rangle$. Имеется **два решения**. Первое: $x = 1$ ведет к равенству $|\varphi\rangle \equiv |\psi\rangle$. Второе: $x = 0$ означает, что $|\varphi\rangle = |\psi^{(\perp)}\rangle$. Утверждение доказано.

Отсюда следует, что макроскопическую информацию всегда можно копировать, поскольку вектора состояния двух даже одинаковых с виду макрообъектов ортогональны.

Теорема о невозможности уничтожения копии произвольного чистого состояния

Для “No-cloning theorem” существует, в некотором смысле, **обратная теорема** о невозможности уничтожения одной из копий произвольного чистого состояния (так называемая “No-deleting theorem”). Ключевыми в названии теоремы являются слова “одна из копий” и “произвольного”, поскольку, очевидно, что любое чистое состояние можно уничтожить, например, произведя над ним измерение.

Напомним, что в результате измерения вектор состояния $|\psi\rangle$ переходит в один из векторов $|\varphi_j\rangle$. Говорят, что произошла **РЕДУКЦИЯ** или “стягивание” вектора $|\psi\rangle$ к вектору $|\varphi_j\rangle$. Очевидно, что **процесс редукции необратим**, поскольку в результате редукции полностью теряется информация о всех (комплексных) коэффициентах разложения c_i , которые входят в принцип суперпозиции.

Как сочетается такая **необратимость** с **обратимыми** дифференциальными уравнениями эволюции из **Постулата №6**? Очевидным образом. Уравнения эволюции написаны для **замкнутых** квантовых систем. А измерение подразумевает, что квантовая система становится **открытой**, в ней меняются энтропия и информация. Поэтому уравнения из **Постулата №6** к процессу измерения непосредственно не применимы.

Условие теоремы гласит, что если имеются две копии неизвестного чистого состояния, то невозможно удалить одну из копий так, чтобы другая осталась нетронутой. Иначе говоря, **невозможен процесс**:

$$|\phi\rangle |\phi\rangle \rightarrow |\phi\rangle |0\rangle.$$

Для доказательства рассмотрим некоторое чистое состояние

$$|\psi\rangle = C_1 |\varphi_1\rangle + C_2 |\varphi_2\rangle,$$

которое разложено по базису $|\varphi_i\rangle$ в двумерном гильбертовом пространстве. Коэффициенты C_1 и C_2 подчиняются стандартному условию нормировки

$$|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1.$$

Для предания смысла принципу суперпозиции, дополнительно потребуем, чтобы $C_1 \neq 0$ и $C_2 \neq 0$. В остальном коэффициенты C_1 и C_2 являются абсолютно **произвольными**.

Предположим, что существует процедура уничтожения одной из копий произвольного чистого состояния. Тогда применим эту процедуру к вектору $|\psi\rangle$. Получим:

$$|\psi\rangle |\psi\rangle \rightarrow |\psi\rangle |0\rangle \rightarrow C_1 |\varphi_1\rangle |0\rangle + C_2 |\varphi_2\rangle |0\rangle.$$

Далее рассмотрим $|\psi\rangle$ как линейную комбинацию $|\varphi_1\rangle$ и $|\varphi_2\rangle$ и применим процедуру уничтожения к произведению линейных комбинаций:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle |\psi\rangle &= C_1^2 |\varphi_1\rangle |\varphi_1\rangle + C_2^2 |\varphi_2\rangle |\varphi_2\rangle + C_1 C_2 (|\varphi_1\rangle |\varphi_2\rangle + |\varphi_2\rangle |\varphi_1\rangle) \rightarrow \\ &\rightarrow C_1^2 |\varphi_1\rangle |0\rangle + C_2^2 |\varphi_2\rangle |0\rangle + \sqrt{2} C_1 C_2 |\Phi\rangle, \end{aligned}$$

где $|\Phi\rangle$ – некоторое **вспомогательное состояние**, которое не должно зависеть от коэффициентов C_1 и C_2 .

Найдем, при каких условиях оба выражения совпадают. Для этого решаем уравнение:

$$\text{const} \times (C_1 |\varphi_1\rangle |0\rangle + C_2 |\varphi_2\rangle |0\rangle) = C_1^2 |\varphi_1\rangle |0\rangle + C_2^2 |\varphi_2\rangle |0\rangle + \sqrt{2} C_1 C_2 |\Phi\rangle.$$

Оно превращается в тождество, если

$$\text{const} = C_1 + C_2 \quad \text{и} \quad |\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\varphi_1\rangle + |\varphi_2\rangle) |0\rangle.$$

Заметим, что если $\text{const} = 0$ (то есть, $C_1 = -C_2$), то результаты двух представленных выше версий процедур уничтожения не возможно согласовать друг с другом. То есть процедура уничтожения становится в этом случае противоречивой. Таким образом, например, **копию** состояния

$$|\chi^{(1)}\rangle = |\psi(C_1 = 1/\sqrt{2}, C_2 = -1/\sqrt{2})\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\varphi_1\rangle - |\varphi_2\rangle)$$

уничтожить нельзя. Теперь рассмотрим уничтожение одной из копий чистого состояния

$$|\psi^{(\perp)}\rangle = C_2^* |\varphi_1\rangle - C_1^* |\varphi_2\rangle.$$

Применим искомую процедуру к самому вектору

$$|\psi^{(\perp)}\rangle |\psi^{(\perp)}\rangle \rightarrow |\psi^{(\perp)}\rangle |0\rangle \rightarrow C_2^* |\varphi_1\rangle |0\rangle - C_1^* |\varphi_2\rangle |0\rangle$$

и к его разложению в суперпозицию

$$\begin{aligned} |\psi^{(\perp)}\rangle |\psi^{(\perp)}\rangle &= (C_2^*)^2 |\varphi_1\rangle |\varphi_1\rangle + (C_1^*)^2 |\varphi_2\rangle |\varphi_2\rangle - \\ &- C_1^* C_2^* (|\varphi_1\rangle |\varphi_2\rangle + |\varphi_2\rangle |\varphi_1\rangle) \rightarrow \\ &\rightarrow (C_2^*)^2 |\varphi_1\rangle |0\rangle + (C_1^*)^2 |\varphi_2\rangle |0\rangle - \sqrt{2} C_1^* C_2^* |\Phi\rangle, \end{aligned}$$

где состояние $|\Phi\rangle$ должно быть точно таким же, как и выше.

Результаты обеих процедур уничтожения согласуются, если вы-
брать

$$\text{const} = C_2^* - C_1^*.$$

Исключением является случай, когда $\text{const} = 0$, то есть когда $C_2^* = C_1^*$ или $C_1 = C_2$. Для такого выбора констант процедура уничтожения неопределена. Поэтому **копию** состояния

$$|\chi^{(2)}\rangle = \left| \psi \left(C_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}, C_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\varphi_1\rangle + |\varphi_2\rangle)$$

невозможно уничтожить также, как и копию состояния $|\chi^{(1)}\rangle$.

Состояния $|\chi^{(1)}\rangle$ и $|\chi^{(2)}\rangle$ являются базисом в двумерном гильбертовом пространстве. Следовательно, любое состояние $|\phi\rangle$ можно разложить по этому базису

$$|\phi\rangle = \alpha |\chi^{(1)}\rangle + \beta |\chi^{(2)}\rangle,$$

где α и β – коэффициенты разложения, удовлетворяющие условию нормировки

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1.$$

Для завершения доказательства применим процедуру уничтожения к $|\phi\rangle|\phi\rangle$. С одной стороны она должна давать

$$|\phi\rangle|\phi\rangle \rightarrow |\phi\rangle|0\rangle = \left(\alpha |x^{(1)}\rangle + \beta |x^{(2)}\rangle \right) |0\rangle.$$

С другой стороны, эта процедура невыполнима, поскольку

$$\begin{aligned} |\phi\rangle|\phi\rangle &= \alpha^2 |x^{(1)}\rangle |x^{(1)}\rangle + \beta^2 |x^{(2)}\rangle |x^{(2)}\rangle + \\ &+ \alpha\beta \left(|x^{(1)}\rangle |x^{(2)}\rangle + |x^{(2)}\rangle |x^{(1)}\rangle \right) \rightarrow ?, \end{aligned}$$

а, как было доказано выше, уничтожение копий состояния $|x^{(1)}\rangle$ и $|x^{(2)}\rangle$ невозможно. Получили противоречие.

Таким образом **невозможно уничтожить копию ни одного НЕИЗВЕСТНОГО чистого состояния $|\phi\rangle$** в двумерном гильбертовом пространстве. Рассмотрение многомерного случая аналогично двумерному. Следовательно, теорема доказана. Заметим, что известные состояния можно уничтожать (точно также, как и клонировать).

Люди, доказавшие “No-deleting theorem”



Arun Kumar Pati
род. в 1966 г.



Samuel Leon Braunstein
род. в 1961 г.

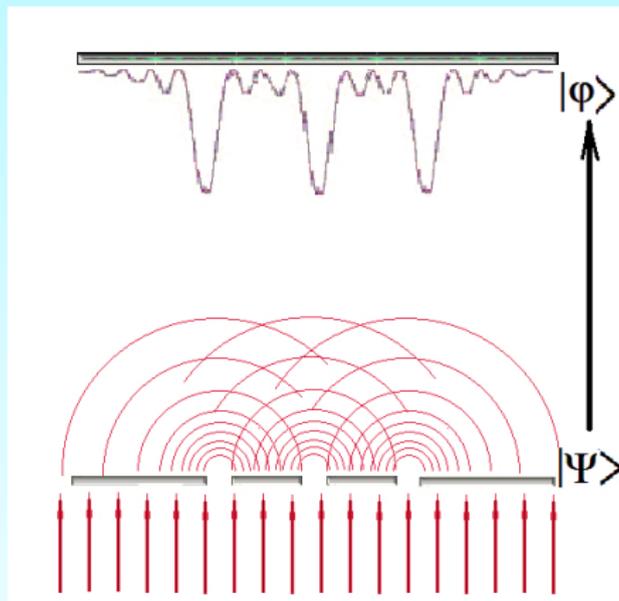
Доказательство было опубликовано в журнале “Nature” спустя 18 лет после доказательства “No-cloning theorem”: **A. K. Pati and S. L. Braunstein, Nature 404, p.164 (2000).**

Правила суперотбора

Принцип суперпозиции не накладывает никаких ограничений на разложения состояния $|\psi\rangle$ по состояниям $|\varphi_i\rangle$. Однако, **все ли такие разложения имеют физический смысл и могут быть реализованы** в реальных микросистемах?

Впервые данный вопрос был сформулирован в работе: **G.C.Wick, A.S.Wightman and E.P.Wigner, "The intrinsic parity of elementary particles", Phys. Rev. 88, p.101, 1952.** Там же дан и **ответ: не все** состояния микросистемы, которые можно записать при помощи принципа суперпозиции, имеют физический смысл и реализуются в Природе.

Рассмотрим красивый **пример**. Пусть монохроматический пучок света низкой интенсивности (будем считать, что в каждый момент времени на экран падает только один фотон) проходит сквозь непрозрачный экран с **ТРЕМЯ** щелями (обычно в учебниках рассматривают эксперименты с двумя щелями; в данном примере щелей три). За этим экраном на некотором расстоянии L находится еще один экран, на котором можно наблюдать интерференционную картину.



Прохождению фотона через первую щель непрозрачного экрана сопоставим базисный вектор $|1\rangle$, через вторую – вектор $|2\rangle$, а через третью – вектор $|3\rangle$. Если пучок достаточно однороден, то вектор состояния фотонов сразу после прохождения экрана с тремя щелями можно написать в виде:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle).$$

На пути от первого экрана до второго фотоны интерферируют друг с другом. Результат интерференции, естественно, зависит от взаимного расположения щелей и расстояния между экранами. Предположим, что мы подобрали расположение щелей и экранов таким образом, что интерференционная картина на втором экране соответствует вектору состояния

$$|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|1\rangle - |2\rangle + |3\rangle).$$

Условная вероятность возникновения этого состояния оказывается вполне значимой: $w(\varphi|\psi) = 1/3$.

Теперь поставим **около щели “3”** детектор фотонов и переставим экраны так, чтобы вектор состояния $|\varphi\rangle$ не изменился. Принцип суперпозиции как и любой другой постулат квантовой теории не запрещает этого делать. Тогда с какой вероятностью в получившейся конфигурации мы зарегистрируем, что фотон прошел через третью щель? Простые вычисления дают:

$$w_3 = 1 - \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \varphi | (|1\rangle + |2\rangle) \right|^2 = 1 - 0 = 1,$$

то есть фотон **всегда** будет проходить **через щель “3”**! Но если фотон всегда проходит через одну щель, **как же** тогда **может возникнуть интерференция**?

Однако на этом сюрпризы не заканчиваются. Поместим теперь детектор фотонов **перед щелью “1”** и зададимся тем же самым вопросом про вероятность прохождения фотонов. Рассуждая аналогично получим, что $w_1 = 1$! Поскольку суммарная вероятность пройти фотону сквозь любую из трех щелей тоже равна единице, то приходим к очередному парадоксальному выводу, что вероятность прохождения фотона через вторую щель $w_2 = 1 - w_1 - w_3 = -1$. То есть мы **получили отрицательную вероятность**, которую не возможно измерить экспериментально!

Данный результат можно интерпретировать следующим образом: хотя **указанная нами “экспериментальная” ситуация** формально не противоречит ни одному из постулатов квантовой теории, но, на самом деле, она **ни в одном эксперименте не может быть реализована**. Следовательно, должны быть введены дополнительные **правила суперотбора**, которые бы запрещали такую ситуацию. Например, правило, что в природе не возможны такие конфигурации макроприборов, которые приводят к отрицательным вероятностям для наблюдаемых величин. Заметим, что для одновременно **НЕ**наблюдаемых величин совместные вероятности в квантовой механике могут быть отрицательными. Но такие вероятности не могут быть измерены, а, потому, не имеют физического смысла.

Часть 2

МАТРИЦА ПЛОТНОСТИ: ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА

Смешанные состояния

До сих пор мы задавали состояния квантовых систем при помощи векторов состояния $|\psi\rangle$ или волновых функций $\psi(a) = \langle a | \psi \rangle$ в некотором a -представлении. Напомним, что такие состояния носят название **чистых состояний**. Однако описание при помощи чистых состояний в квантовой физике **НЕ** является наиболее общим и, более того, **НЕ** всегда возможно!

В реальных экспериментах квантовые системы приготавливаются и/или измеряются при помощи **неидеальных макроскопических приборов**. Поэтому типичная экспериментальная ситуация состоит в том, что микросистема с вероятностью W_1 находится в чистом состоянии $|\psi_1\rangle$, с вероятностью W_2 – в чистом состоянии $|\psi_2\rangle$ и так далее. Но, при этом, **не существует чистого состояния** $|\psi\rangle$, которое можно сопоставить данной микросистеме. Состояний $|\psi_e\rangle$ может быть конечное или бесконечное число. Вектора $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots$ не обязательно образуют базис и даже могут быть неортогональны друг другу.

Состояния, для **полного** описания которых **не достаточно** задания **одного** вектора состояния $|\psi\rangle$, называются **смешанными состояниями**.

Заметим, что тут нет противоречия с **Постулатом N1** из раздела **"Постулаты квантовой механики"**. Например, если микросистема приготовлена в одном из чистых состояний $|\psi_e\rangle$, то вектор состояния несет максимально возможную для макроскопического наблюдателя информацию о квантовой системе в абсолютном согласии с **Постулатом N1**. Но мы не знаем, в каком точно состоянии макроприбор приготовил и/или измерил микросистему. Поэтому возникает дополнительная классическая неопределенность, которая описывается при помощи набора вероятностей W_e , характеризующих данный макроприбор.

Вероятности W_e **НЕ всегда** связаны с неидеальностью классических макроприборов. Например, квантовая система может состоять из нескольких подсистем. Ниже будет показано, что даже если такую систему как целое можно описать при помощи вектора состояния $|\psi\rangle$, то для ее подсистем подобное описание в ряде случаев не возможно.

Таким образом, вероятности W_e могут иметь как **классическую** (в большинстве случаев), так **и квантовую** (в некоторых специальных очень интересных случаях) **природу**.

Матрица плотности чистого состояния

Чистые состояния можно задавать не только при помощи вектора состояния $|\psi\rangle$, но и при помощи проектора (проекционного оператора) $\hat{P}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ на это состояние. Очевидно, что в данном случае проектор несет **ту же информацию** о микросистеме, что и вектор состояния $|\psi\rangle$. Далее для общности описания чистых и смешанных состояний будем называть проектор \hat{P}_ψ **статистическим оператором** или **матрицей плотности** микросистемы и обозначать как $\hat{\rho}$. Таким образом, для **чистых состояний**:

$$\hat{\rho} \equiv \hat{P}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|.$$

Некоторые свойства проекционных операторов уже рассматривались в разделе "**Постулаты квантовой механики (для чистых состояний)**". Ниже мы переформулируем эти свойства в терминах матрицы плотности и добавим новые.

Заметим, что проекторы можно делать не только на базисные состояния, но и на любые чистые состояния $|\psi\rangle$.

Матрица плотности $\hat{\rho}$ чистого состояния удовлетворяет следующим **условиям**:

- а) эрмитовость: $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$;
- б) диагональные элементы ρ_{nn} матрицы плотности $\hat{\rho}$ **неотрицательны**;
- в) след матрицы плотности $\text{Tr } \hat{\rho} = 1$;
- г) след квадрата матрицы плотности $\text{Tr } \hat{\rho}^2 = 1$;
- д) среднее значение любой наблюдаемой A вычисляется по формуле: $\langle A \rangle_\rho = \text{Tr} (\hat{\rho} \hat{A})$.

Понятно, что свойства матрицы плотности имеет смысл рассматривать только, если задан некоторый базис $\{|n_i\rangle\}$.

Условие г) возможно переформулировать в эквивалентной и более очевидной форме как свойство проектора: $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$. Но для общности описания чистых и смешанных состояний мы будем использовать вариант со следом.

Докажем приведенные выше свойства матрицы плотности $\hat{\rho}$ чистого состояния.

а) эрмитовость очевидная из явного вида проектора;

б) в базисе $\{|n_i\rangle\}$ матричный элемент: $\rho_{ii} = \langle n_i | \hat{\rho} | n_i \rangle = \langle n_i | \psi \rangle \langle \psi | n_i \rangle = \langle n_i | \psi \rangle (\langle n_i | \psi \rangle)^* = |\langle n_i | \psi \rangle|^2 \geq 0$;

в) воспользуемся базисом из предыдущего пункта:

$$\begin{aligned} \text{Tr} \hat{\rho} &= \sum_i \langle n_i | \hat{\rho} | n_i \rangle = \sum_i \langle n_i | \psi \rangle \langle \psi | n_i \rangle = \sum_i \langle \psi | n_i \rangle \langle n_i | \psi \rangle = \\ &= \langle \psi | \left(\sum_i |n_i\rangle \langle n_i| \right) | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{1}_n | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1; \end{aligned}$$

г) легко следует из свойств проектора;

д) если доказывать формулу справа налево, то доказательство полностью аналогично доказательству пункта **в)**; проведите его самостоятельно.

Как построить матрицу плотности чистого состояния $|\psi\rangle$?

Для этого сначала необходимо ввести какой-либо базис $\{|n_i\rangle\}$ и разложить по нему вектор состояния: $|\psi\rangle = \sum_i c_i |n_i\rangle$. Тогда в этом базиса элементы матрицы плотности $\hat{\rho}$ будут равны:

$$\rho_{jj'} = \langle n_j | \hat{\rho} | n_{j'} \rangle = \langle n_j | \psi \rangle \langle \psi | n_{j'} \rangle = c_j c_{j'}^*,$$

где индекс j нумерует **строки**, а индекс j' – **столбцы**.

Пример: рассмотрим вектор состояния $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta e^{i\varphi} \end{pmatrix}$ в базисе $|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ и $|2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Имеем:

$$|\psi\rangle = c_1 |1\rangle + c_2 |2\rangle = \cos \theta |1\rangle + \sin \theta e^{i\varphi} |2\rangle.$$

Такому вектору состояния соответствует матрица плотности

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \cos^2 \theta & \cos \theta \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \cos \theta \sin \theta e^{i\varphi} & \sin^2 \theta \end{pmatrix}.$$

Матрица плотности смешанного состояния

Матрицу плотности смешанного состояния можно рассматривать как совокупность проекторов $\hat{P}_{\psi_e} = |\psi_e\rangle\langle\psi_e|$ на состояния $|\psi_e\rangle$. Из физики задачи ясно, что каждый проектор должен “срабатывать” с вероятностью W_e . Тогда матрица плотности имеет вид:

$$\hat{\rho} = \sum_{\ell} W_{\ell} \hat{P}_{\psi_{\ell}} \equiv \sum_{\ell} W_{\ell} \hat{\rho}_{\ell} = \sum_{\ell} W_{\ell} |\psi_{\ell}\rangle\langle\psi_{\ell}|,$$

где $\hat{\rho}_{\ell}$ – матрицы плотности чистых состояний $|\psi_{\ell}\rangle$, свойства которых известны из предыдущего параграфа. По своему смыслу вероятности все W_{ℓ} являются действительными числами, $1 \geq W_{\ell} \geq 0$ и подчиняются обычному условию нормировки:

$$\sum_{\ell} W_{\ell} = 1.$$

Еще раз подчеркнем, что вектора $\{|\psi_{\ell}\rangle\}$ **НЕ** обязательно образуют базис и даже могут быть **НЕ** ортогональны друг другу. Хотя, в реальных задачах, как правило, присутствуют и ортогональность, и базис.

Матрица плотности $\hat{\rho}$ смешанного состояния обладает следующими **свойствами**:

- а) эрмитовость: $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$;
- б) диагональные элементы ρ_{nn} матрицы плотности $\hat{\rho}$ **неотрицательны**;
- в) след матрицы плотности $\text{Tr } \hat{\rho} = 1$;
- г) след квадрата матрицы плотности $\text{Tr } \hat{\rho}^2 \leq 1$; равенство достигается только для чистых состояний;
- д) среднее значение любой наблюдаемой A вычисляется по формуле: $\langle A \rangle_\rho = \text{Tr} (\hat{\rho} \hat{A})$.

Доказательство свойств матрицы плотности для смешанных состояний похоже на доказательство свойств матрицы плотности для чистых состояний. Дополнительно необходимо учитывать нормировку на единицу вероятностей W_ℓ . Рассмотрим, например, доказательство пункта **в**). Имеем:

$$\begin{aligned} \text{Tr } \hat{\rho} &= \sum_i \langle n_i | \hat{\rho} | n_i \rangle = \sum_i \sum_\ell W_\ell \langle n_i | \hat{\rho}_\ell | n_i \rangle = \sum_\ell W_\ell \sum_i \langle n_i | \hat{\rho}_\ell | n_i \rangle = \\ &= \sum_\ell W_\ell \text{Tr } \hat{\rho}_\ell = \sum_\ell W_\ell = 1. \end{aligned}$$

Для доказательства пункта г) следует воспользоваться очевидным неравенством: $\sum_{\ell} W_{\ell} \geq \sum_{\ell} W_{\ell}^2$.

Свойства матриц плотности чистых и смешанных состояний отличаются только пунктом г). Если известен явный вид матрицы плотности некоторой микросистемы, то это отличие можно использовать для проверки чистоты состояния. В силу особой важности для характеристики квантовых систем величина $\mu = \text{Tr } \hat{\rho}^2$ получила собственное название параметра чистоты.

Для двух состояний A и B некоторой микросистемы, которые задаются матрицами плотности $\hat{\rho}_A$ и $\hat{\rho}_B$ соответственно, можно записать вероятность перехода из состояния A в состояние B по формуле (докажите это самостоятельно):

$$w_{AB} = \text{Tr} \left(\hat{\rho}_A \hat{\rho}_B^{\dagger} \right).$$

Данная вероятность получила специальное название "fidelity" (нет устоявшегося термина в русском языке! обычно переводят как "степень совпадения двух состояний").

Примеры матриц плотности

Легко проверить, что матрица

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

удовлетворяет всем свойствам матрицы плотности чистого состояния, а матрица

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \frac{7}{8} & i \\ -i & \frac{1}{8} \end{pmatrix}$$

может описывать только смешанное состояние. Матрица же

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ 1 & 1 & 1 \\ \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

вообще не является матрицей плотности, поскольку $\text{Tr } \hat{\rho}^2 = \frac{3}{2} > 1$. Это лишний раз демонстрирует важность свойства **r)** при изучении матриц плотности микросистем.

"Отцы" матрицы плотности



Лев Давидович Ландау
(09.01.1908 – 01.04.1968)



Джон фон Нейман
(28.12.1903 – 08.02.1957)

Неоднозначность разложения матрицы плотности смешанного состояния на чистые

По виду матрицы плотности смешанного состояния $\hat{\rho}$ не возможно однозначно определить, набору каких чистых состояний $\hat{\rho}_\ell$ она соответствует.

Рассмотрим простой пример. Пусть смешанное состояние описывается матрицей плотности

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Тогда это состояние можно разложить на сумму двух чистых состояний, например, как

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

или как

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1/2 & -1/2 \\ -1/2 & 1/2 \end{pmatrix}.$$

Разные способы разложения матрицы $\hat{\rho}$ соответствуют измерению различных наблюдаемых, операторы которых не коммутируют друг с другом.

Нерелятивистская матрица плотности спина $s = 1/2$

Найдем матрицу плотности для нерелятивистского спина $s = 1/2$. Искомая матрица должна быть матрицей размерности 2×2 . Как было показано в лекции "Матрицы Паули. Сложение моментов" любая подобная матрица может быть разложена по базису, состоящему из единичной матрицы $\hat{1}$ и матриц Паули $\vec{\sigma}$, то есть

$$\hat{\rho} = a\hat{1} + (\vec{b}\vec{\sigma}).$$

Матрица $\hat{\rho}$ может описывать как чистое, так и смешанное состояние. Из свойства **а)** следует, что коэффициенты a и \vec{b} — действительные. Далее, по свойству **в)** находим, что

$$1 = \text{Tr}\hat{\rho} = a \text{Tr}\hat{1} = 2a \Rightarrow a = \frac{1}{2}.$$

Выразим вектор \vec{b} через среднее значение спина электрона $\langle \vec{S} \rangle_{\rho}$.

При помощи свойства **д)** получаем:

$$\langle S_i \rangle_{\rho} = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{S}_i) = \frac{1}{2} \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{\sigma}_i) = \frac{1}{4} \text{Tr}\hat{\sigma}_i + \frac{1}{2} b_j \text{Tr}(\hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_i) = \frac{1}{2} b_j 2\delta_{ji} = b_i.$$

Отсюда следует, что $\vec{b} = \langle \vec{S} \rangle_\rho$. Вместо вектора \vec{b} удобно ввести **вектор поляризации** по формуле $\vec{p} = 2\vec{b} = 2\langle \vec{S} \rangle_\rho$.

Тогда матрица плотности нерелятивистской частицы со $s = 1/2$ окончательно запишется в виде:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} (\hat{1} + (\vec{p}\vec{\sigma})),$$

где **вектор поляризации** $\vec{p} = 2\langle \vec{S} \rangle_\rho$. В экспериментах вектор поляризации измеряют, изучая угловые распределения взаимодействующих частиц.

Из свойства **г)** следует, что для чистых состояний $|\vec{p}| = 1$, а для смешанных $|\vec{p}| < 1$ (покажите это самостоятельно). Это еще один критерий определения чистоты состояния для частиц со спином $s = 1/2$.

Теорема Глисона (1957 г.)

Вопрос: насколько общим является формализм матрицы плотности?

Ответ: вариант ответа на этот вопрос дает **теорема Глисона** (или **Глисона**). Это *чисто математическая теорема* об одном следствии из свойств меры в гильбертовых пространствах. Для формулировки теоремы удобно переобозначить $W_e \equiv W(\hat{P}_e)$, где $\hat{P}_e = |\psi_e\rangle\langle\psi_e|$ – проектор на чистое состояние $|\psi_e\rangle$.

Теперь рассмотрим отображение $W(\hat{P})$, которое каждому проектору \hat{P} из гильбертова пространства \mathcal{H} ставит в соответствие число из интервала $[0, 1]$ так, что:

- 1) $W(\hat{0}) = 0$ – измерение не производится;
- 2) $W(\hat{1}) \equiv W\left(\sum_e \hat{P}_e\right) = 1$ – выполнены измерения всего спектра некоторой наблюдаемой рассматриваемой микросистемы;
- 3) $W(\hat{P}_1 + \hat{P}_2) = W(\hat{P}_1) + W(\hat{P}_2)$, если $\text{Tr}(\hat{P}_1 \hat{P}_2) = 0$.

Тогда в гильбертовом пространстве размерности $N > 2$ для любого подобного отображения существует оператор $\hat{\rho}$, который обладает всеми сформулированными выше свойствами **а) – д)** матрицы плотности.

Доказательство теоремы можно найти в оригинальной работе: **A. M. Gleason**, “Measures on the closed subspaces of a Hilbert space”. *Indiana University Mathematics Journal* 6, pp.885–893 (1957).

Иными словами, **теорема Глизна** при помощи **Постулатов N4** (проекционного постулата М.Борна) и **N5** (постулата о среднем значении) плюс “интуитивно понятного” **определения свойств вероятности** для макроскопически различимых состояний утверждает, что любая квантовая система должна описываться при помощи формализма матрицы плотности.

Однако использование Глизоном “интуитивно ясных” свойств вероятности в условии теоремы часто **подвергается критике**: “В самом деле, теорема Глизна в настоящее время по праву является известным и общепринятым результатом, который лежит в основании квантовой теории. Это строгая математическая теорема, как и все теоремы о мере в гильбертовом пространстве. Тем не менее, с физической точки зрения данный результат следует признать совершенно неудовлетворительным. **Теорема не дает понимания физического смысла квантовой вероятности. В частности неясно, почему наблюдатель должен использовать вероятности, которые обладают свойствами меры из теоремы Глизна.**”

W.H.Zurek, “Probabilities from entanglement, Born’s rule $p_k = |\psi_k|^2$ from envariance”, Phys. Rev. A 71, 052105 (2005).

В двумерном пространстве свойство “3)” не работает. Для иллюстрации можно рассмотреть два фермиона с различными поляризациями \vec{a} и \vec{b} в чистом состоянии, которые описываются проекционными операторами $\hat{P}_a = \frac{1}{2} (\hat{1} + (\vec{a}\vec{\sigma}))$ и $\hat{P}_b = \frac{1}{2} (\hat{1} + (\vec{b}\vec{\sigma}))$.

С одной стороны, $\text{Tr} (\hat{P}_a \hat{P}_b) = 1 + (\vec{a}\vec{b}) = 0$ только если $\vec{a} = -\vec{b}$.

С другой же стороны $W(\hat{P}_a + \hat{P}_b) = W(\hat{P}_a) + W(\hat{P}_b)$ при любых \vec{a} и \vec{b} .



W.H.Zurek

подбирается с критикой



Эндрю Глизон

(04.11.1921 – 17.10.2008)

Количественное сравнение квантовых состояний

Вопрос: какие существуют **количественные критерии**, при помощи которых можно заключить, что два квантовых состояния A и B , описываемые матрицами плотности $\hat{\rho}_A$ и $\hat{\rho}_B$ соответственно, похожи или близки друг к другу?

Ответ:

Все количественные критерии делятся на две группы: **степени совпадения** и **метрики**.

1) Введенная выше величина **"fidelity"** или **степень совпадения** двух состояний:

$$W_{AB} \equiv F_0(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B) = \text{Tr} \left(\hat{\rho}_A \hat{\rho}_B^\dagger \right).$$

2) Имеется альтернативное определение степени совпадения **по Ульману**:

$$F_1(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B) = \text{Tr} \sqrt{\hat{\rho}_A^{1/2} \hat{\rho}_B \hat{\rho}_A^{1/2}}.$$

Выражение $\hat{B} = \sqrt{\hat{A}}$ следует понимать как условную запись того факта, что операторы \hat{A} и \hat{B} связаны соотношением $\hat{A} = \hat{B}^2$.

3) Метрика Гильберта-Шмидта (Hilbert-Schmidt distance):

$$D_{HS}(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B) = \sqrt{\text{Tr}(\hat{\rho}_A - \hat{\rho}_B)^2}.$$

4) Следовая метрика (trace distance):

$$D_{Tr}(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B) = \frac{1}{2} \text{Tr} \left(\sqrt{(\hat{\rho}_A - \hat{\rho}_B)^\dagger (\hat{\rho}_A - \hat{\rho}_B)} \right) \equiv \frac{1}{2} \text{Tr} |\hat{\rho}_A - \hat{\rho}_B|,$$

где было введено определение модуля оператора $\hat{\sigma} = \hat{\rho}_A - \hat{\rho}_B$ по формуле: $|\hat{\sigma}| = \sqrt{\hat{\sigma}^\dagger \hat{\sigma}}$.

5) Метрика Буреса (Bures distance):

$$D_B(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B) = \sqrt{\text{Tr} \hat{\rho}_A + \text{Tr} \hat{\rho}_B - 2 F_1(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B)} = \sqrt{2 (1 - F_1(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B))}.$$

Переход от первого определения ко второму был сделан при помощи свойства **в**) матрицы плотности.

6) "Угол" между двумя квантовыми состояниями (Bures angle):

$$D_A(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B) = \arccos F_1(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B)$$

также является метрикой.

7) Относительная энтропия или метрика Кульбака – Лейблера (relative entropy or Kullback – Leibler distance):

$$D_{KL}(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B) = \hat{\rho}_A \ln \hat{\rho}_B - \hat{\rho}_A \ln \hat{\rho}_A.$$

Основные свойства степеней совпадения ($i = \{0, 1\}$):

1. $0 \leq F_i(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B) \leq 1$ – **ограниченность** снизу и сверху (практически очевидна, если рассматривать степень совпадения как вероятность);
2. $F_i(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B) = F_i(\hat{\rho}_B, \hat{\rho}_A)$ – **симметричность** по аргументам;
3. $F_i(\hat{U}\hat{\rho}_A\hat{U}^\dagger, \hat{U}\hat{\rho}_B\hat{U}^\dagger) = F_i(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B)$ – **инвариантность** относительно любых унитарных преобразований \hat{U} (для доказательства используется факт, что для положительного оператора $\hat{\rho}$ выполняется условие $\sqrt{\hat{U}\hat{\rho}\hat{U}^\dagger} = \hat{U}\sqrt{\hat{\rho}}\hat{U}^\dagger$);
4. $F_i\left(\hat{\rho}_A, \sum_\ell W_\ell \hat{\rho}_\ell\right) \geq \sum_\ell W_\ell F_i(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_\ell)$ – **вогнутость** степени совпадения.

Последнее свойство легко обобщается до так называемой **сильной вогнутости**:

$$F_i\left(\sum_\ell W_\ell^{(A)} \hat{\rho}_{A\ell}, \sum_\ell W_\ell^{(B)} \hat{\rho}_{B\ell}\right) \geq \sum_\ell \sqrt{W_\ell^{(A)} W_\ell^{(B)}} F_i(\hat{\rho}_{A\ell}, \hat{\rho}_{B\ell}).$$

Основные свойства метрик ($i = \{HS, Tr, B, A, KL\}$):

1. Все метрики удовлетворяют **неравенству треугольника**:

$$D_i(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B) \leq D_i(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_C) + D_i(\hat{\rho}_C, \hat{\rho}_B).$$

Это основное свойство, которое отличает метрики от степеней совпадения;

2. $D_i(\hat{U}\hat{\rho}_A\hat{U}^\dagger, \hat{U}\hat{\rho}_B\hat{U}^\dagger) = D_i(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B)$ – **инвариантность** относительно любых унитарных преобразований \hat{U} . Затруднение вызывает доказательство инвариантности только для относительной энтропии. Оно будет дано в лекции, посвященной квантовой энтропии;

3. $D_{Tr}(\hat{\rho}_A, \sum_\ell W_\ell \hat{\rho}_\ell) \leq \sum_\ell W_\ell D_{Tr}(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_\ell)$ – **выпуклость** следовой метрики;

4. $D_B^2(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B)/2 = 1 - F_1(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B) \leq D_{Tr}(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B) \leq \sqrt{1 - F_1^2(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B)}$;

5. В случае чистых состояний $|A\rangle$ и $|B\rangle$

$$D_A(|A\rangle, |B\rangle) = \arccos \left(\frac{\langle A|B\rangle}{\|A\|\|B\|} \right),$$

что делает очевидным, почему данную метрику можно интерпретировать как "угол".

Как найти $F_1(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B)$?

Рассмотрим матрицу $\hat{\sigma} = \sqrt{\hat{\rho}_A^{1/2} \hat{\rho}_B \hat{\rho}_A^{1/2}}$. Это положительно определенная матрица (то есть все ее собственные значения $\sigma_i \geq 0$), поскольку она составлена из матриц плотности, которые положительно определены по построению (действительно, $W_\ell^{(A), (B)} \geq 0$). Собственные значения матрицы $\hat{\sigma}$ находятся при помощи условия: $\hat{\sigma} |\sigma_i\rangle = \sigma_i |\sigma_i\rangle$.

Из линейной алгебры известно, что для положительно определенной матрицы всегда существует унитарное преобразование \hat{U}_σ , которое приводит эту матрицу к диагональному виду $\hat{\sigma}_{diag} = \hat{U}_\sigma \hat{\sigma} \hat{U}_\sigma^\dagger$. Отсюда получаем, что:

$$F_1(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B) = \text{Tr} \hat{\sigma} = \text{Tr} \left(\hat{U}_\sigma^\dagger \hat{U}_\sigma \hat{\sigma} \right) = \text{Tr} \left(\hat{U}_\sigma \hat{\sigma} \hat{U}_\sigma^\dagger \right) = \text{Tr} \hat{\sigma}_{diag} = \sum_i \sigma_i.$$

Далее рассмотрим матрицу $\hat{\rho} = \hat{\rho}_A^{1/2} \hat{\rho}_B \hat{\rho}_A^{1/2} = \hat{\sigma}^2$. Очевидно, что $[\hat{\rho}, \hat{\sigma}] = 0$. Поэтому операторы $\hat{\rho}$ и $\hat{\sigma}$ имеют общую систему собственных векторов $\{|\sigma_i\rangle\}$. Тогда

$$\rho_i |\sigma_i\rangle = \hat{\rho} |\sigma_i\rangle = \hat{\sigma} \hat{\sigma} |\sigma_i\rangle = \sigma_i \hat{\sigma} |\sigma_i\rangle = \sigma_i^2 |\sigma_i\rangle.$$

Учитывая положительность матриц $\hat{\rho}$ и $\hat{\sigma}$ находим, что $\sigma_i = +\sqrt{\rho_i}$. Окончательно:

$$F_1(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B) = \sum_i \sqrt{\rho_i}.$$

Как найти $D_{Tr}(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B)$?

Определим матрицу $\hat{\sigma} = \hat{\rho}_A - \hat{\rho}_B$. Тогда матрица $\hat{\rho} = \hat{\sigma}^\dagger \hat{\sigma}$ – это положительно определенная матрица с собственными значениями $\hat{\rho}_i = |\sigma_i|^2$ (докажите самостоятельно!). Поэтому для нее существует унитарная матрица \hat{U}_ρ такая, что $\hat{\rho}_{diag} = \hat{U}_\rho \hat{\rho} \hat{U}_\rho^\dagger$.

Кроме того напомним, что для положительно определенного оператора $\hat{\rho}$ выполняется равенство $\hat{U} \sqrt{\hat{\rho}} \hat{U}^\dagger = \sqrt{\hat{U} \hat{\rho} \hat{U}^\dagger}$.

Тогда для $D_{Tr}(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B)$ можем написать:

$$\begin{aligned} D_{Tr}(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B) &= \frac{1}{2} \text{Tr} \left(\sqrt{\hat{\rho}} \right) = \frac{1}{2} \text{Tr} \left(\hat{U}^\dagger \hat{U} \sqrt{\hat{\rho}} \right) = \frac{1}{2} \text{Tr} \left(\hat{U} \sqrt{\hat{\rho}} \hat{U}^\dagger \right) = \\ &= \frac{1}{2} \text{Tr} \left(\sqrt{\hat{U} \hat{\rho} \hat{U}^\dagger} \right) = \frac{1}{2} \text{Tr} \left(\sqrt{\hat{\rho}_{diag}} \right) = \frac{1}{2} \sum_i |\sigma_i|, \end{aligned}$$

что дает алгоритм вычисления метрики $D_{Tr}(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B)$.

Пример вычисления $F_1(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B)$ и $D_{Tr}(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B)$

Рассмотрим две матрицы плотности

$$\hat{\rho}_A = \begin{pmatrix} 3/4 & 0 \\ 0 & 1/4 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \hat{\rho}_B = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/6 \\ 1/6 & 1/2 \end{pmatrix}.$$

Матрица $\hat{\rho} = \hat{\rho}_A^{1/2} \hat{\rho}_B \hat{\rho}_A^{1/2} = \hat{\rho}_A = \frac{1}{24} \begin{pmatrix} 9 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & 3 \end{pmatrix}$ имеет собственные значения $\rho_{1,2} = \frac{1}{4\sqrt{3}} (\sqrt{3} \pm 1) \geq 0$ (т.е. эта матрица, действительно, положительно определена). Поэтому

$$F_1(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B) = \sum_{i=1}^2 \sqrt{\rho_i} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left(\sqrt{\sqrt{3}+1} + \sqrt{\sqrt{3}-1} \right) \approx 0,95.$$

Далее, матрица $\hat{\sigma} = \hat{\rho}_A - \hat{\rho}_B = \begin{pmatrix} 1/4 & -1/6 \\ -1/6 & -1/4 \end{pmatrix}$ имеет собственные значения $\sigma_{1,2} = \pm \sqrt{13}/12$. Отсюда:

$$D_{Tr}(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B) = \frac{1}{2} \sum_i |\sigma_i| = \sqrt{13}/12 \approx 0,30.$$

Тогда: $1 - F_1(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B) \leq D_{Tr}(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B) \leq \sqrt{1 - F_1^2(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B)} \Leftrightarrow 0,05 \leq 0,30 \leq 0,31$.
Таким образом мы явно проверили, что неравенства выполнены.

Пример вычисления остальных степеней совпадения и метрик

Для матриц

$$\hat{\rho}_A = \begin{pmatrix} 3/4 & 0 \\ 0 & 1/4 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \hat{\rho}_B = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/6 \\ 1/6 & 1/2 \end{pmatrix}.$$

находим, что

$$F_0(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B) = \frac{1}{24} \text{Tr} \begin{pmatrix} 9 & 3 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} = 0,5.$$

Легко вычисляются три метрики:

$$D_B(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B) = \sqrt{2(1 - 0,95)} = \sqrt{0,1} \approx 0,32,$$

$$D_A(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B) = \arccos(0,95) \approx 0,32.$$

и

$$\begin{aligned} D_{HS}(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B) &= \sqrt{\text{Tr}(\hat{\sigma})^2} = \frac{1}{2} \sqrt{\text{Tr} \begin{pmatrix} 1/2 & -1/3 \\ -1/3 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & -1/3 \\ -1/3 & -1/2 \end{pmatrix}} = \\ &= \frac{\sqrt{26}}{12} \approx 0,42. \end{aligned}$$

Метрика **Кульбака – Лейблера** будет получена позже.

Матрица плотности составной системы

Пусть некоторая квантовая система, описываемая матрицей плотности $\hat{\rho}$, состоит из двух подсистем “A” и “B”. Тогда матрица плотности $\hat{\rho}_A$ подсистемы “A” может быть найдена по формуле

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B \hat{\rho},$$

где Tr_B означает след по квантовым числам, характеризующим подсистему “B”. Аналогичное утверждение можно сформулировать для матрицы плотности $\hat{\rho}_B$ подсистемы “B”. Такая конструкция получила название **частичного следа** матрицы плотности $\hat{\rho}$.

Для доказательства рассмотрим некоторую наблюдаемую F , которая относится только к подсистеме “A”. Тогда:

$$\langle F \rangle_{\rho} = \langle F \rangle_{\rho_A} \Rightarrow \text{Tr}(\hat{F} \hat{\rho}) = \text{Tr}(\hat{F} \hat{\rho}_A).$$

Пусть $\{|a_i\rangle\}$ – базис в гильбертовом пространстве \mathcal{H}_A подсистемы “A” и $\{|b_j\rangle\}$ – базис в гильбертовом пространстве \mathcal{H}_B подсистемы “B”. Базис для всей системы состоит из векторов вида $|n_{ij}\rangle = |a_i\rangle |b_j\rangle$.

Тогда:

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}(\hat{F}\hat{\rho}) &= \sum_{i,j} \langle n_{ij} | \hat{F}\hat{\rho} | n_{ij} \rangle = \sum_i \sum_j \langle b_j | \langle a_i | \hat{F}\hat{\rho} | a_i \rangle | b_j \rangle = \\ &= \sum_j \sum_i \sum_k \langle a_i | \hat{F} | a_k \rangle \langle b_j | \langle a_k | \hat{\rho} | a_i \rangle | b_j \rangle.\end{aligned}$$

С другой стороны,

$$\mathrm{Tr}(\hat{F}\hat{\rho}) = \mathrm{Tr}(\hat{F}\hat{\rho}_A) = \sum_i \sum_k \langle a_i | \hat{F} | a_k \rangle \langle a_k | \hat{\rho}_A | a_i \rangle.$$

Сравнивая обе формулы для $\mathrm{Tr}(\hat{F}\hat{\rho})$, немедленно находим:

$$\langle a_k | \hat{\rho}_A | a_i \rangle = \langle a_k | \left(\sum_j \langle b_j | \hat{\rho} | b_j \rangle \right) | a_i \rangle,$$

то есть $\hat{\rho}_A = \mathrm{Tr}_B \hat{\rho}$, что и требовалось доказать. Для практических вычислений частичного следа лучше всего пользоваться последней формулой.

Запутанные состояния

Запутанными состояниями называются такие состояния, в которых определенные характеристики входящих в них микросистем **связаны** (“запутаны”) между собой **каким-либо законом сохранения**. Эти состояния играют чрезвычайно важную роль при проверке оснований квантовой механики. С их помощью формулируются **парадокс Эйнштейна-Подольского-Розена**, **парадокс кота Шредингера**, **неравенства Белла**, **концепция измерений** в нерелятивистской квантовой механике и многое другое.

Простейший **пример запутанного состояния**: две частицы “1” и “2” со спинами $s = 1/2$ каждая находятся в состоянии с суммарным спином $S = 0$. Проекция суммарного спина на любую ось, задаваемую единичным вектором \vec{a} , есть $S_{\vec{a}} = 0$. Тогда по правилу сложения моментов количества движения:

$$0 = S_{\vec{a}} = s_{\vec{a}}^{(1)} + s_{\vec{a}}^{(2)} \quad \Rightarrow \quad s_{\vec{a}}^{(1)} = -s_{\vec{a}}^{(2)},$$

а их общая волновая функция:

$$|S = 0, S_{\vec{a}} = 0\rangle = \frac{|s_{\vec{a}}^{(1)} = +\frac{1}{2}\rangle |s_{\vec{a}}^{(2)} = -\frac{1}{2}\rangle - |s_{\vec{a}}^{(1)} = -\frac{1}{2}\rangle |s_{\vec{a}}^{(2)} = +\frac{1}{2}\rangle}{\sqrt{2}}.$$

Квантовое происхождение вероятностей W_ℓ

Вопрос: в каком состоянии находится частица “1” из примера на предыдущем слайде?

Ответ. Без потери общности отождествим ось \vec{a} с осью z . Для упрощения обозначений положим, что:

$$\left| s^{(i)} = \frac{1}{2}, s_z^{(i)} = \pm \frac{1}{2} \right\rangle \equiv \left| s_z^{(i)} = \pm \frac{1}{2} \right\rangle \equiv \left| \pm^{(i)} \right\rangle, \text{ где } i = \{1, 2\}.$$

Тогда вектор состояния $|S = 0, S_z = 0\rangle$ можно написать в виде:

$$|S = 0, S_z = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| +^{(1)} \right\rangle \left| -^{(2)} \right\rangle - \left| -^{(1)} \right\rangle \left| +^{(2)} \right\rangle \right).$$

Матрицу плотности этого **чистого (!)** состояния

$$\hat{\rho} = |S = 0, S_z = 0\rangle \langle S = 0, S_z = 0|$$

естественно строить в базисе:

$$|1\rangle \equiv |+\langle^{(1)}\rangle |-\langle^{(2)}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad |2\rangle \equiv |-\langle^{(1)}\rangle |+\langle^{(2)}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Тогда в этом базисе получаем:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} (|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2| - |1\rangle\langle 2| - |2\rangle\langle 1|) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Матрица плотности частицы “1” равна

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^{(1)} &= \text{Tr}_{(2)} \hat{\rho} = \langle +\langle^{(2)} | \hat{\rho} | +\langle^{(2)} \rangle + \langle -\langle^{(2)} | \hat{\rho} | -\langle^{(2)} \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \hat{1}, \end{aligned}$$

где по логике вычислений матрица $\hat{\rho}^{(1)}$ записана в базисе

$$|+\langle^{(1)}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\langle^{(1)}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Легко видеть, что $\text{Tr} (\hat{\rho}^{(1)})^2 = 1/2 < 1$. Таким образом, частица “1” находится в смешанном состоянии, несмотря на то, что вся система “1” + “2” находится в чистом состоянии!!! С вероятностью $W_+^{(1)} = 1/2$ частицу “1” можно измерить в состоянии $|+^{(1)}\rangle$, а с вероятностью $W_-^{(1)} = 1/2$ – в состоянии $|-^{(1)}\rangle$. И **принципиально** НЕ существует вектора состояния, который бы описывал частицу “1” в рассматриваемой ситуации!

Этот простой пример иллюстрирует, как возникают вероятности W_ℓ в самих квантовых системах без учета их приготовления или измерения макросприборами.

Таким образом, в квантовой физике знание максимально возможной информации о всей микросистеме НЕ гарантирует получение полной информации о каждой из ее подсистем. С точки зрения классической физики подобное утверждение – абсолютный нонсенс. Там знание всей информации о макроскопической системе автоматически приводит к получению полной информации о каждой из ее макроскопических подсистем.

Клонирование помогает запутанности?

Рассмотрим **ортогональные** базисные состояния $|\pm\rangle$ в двумерном гильбертовом пространстве. Поскольку ИЗВЕСТНОЕ ($|+\rangle$) и ортогональное ему ($|-\rangle$) состояния клонировать можно, то существует унитарное преобразование \hat{U} такое, что

$$\hat{U} | +^{(1)} \rangle | 0^{(2)} \rangle \rightarrow | +^{(1)} \rangle | +^{(2)} \rangle \text{ и } \hat{U} | -^{(1)} \rangle | 0^{(2)} \rangle \rightarrow | -^{(1)} \rangle | -^{(2)} \rangle.$$

Кроме того, определим **оператор инверсии** \hat{Z} по правилу $\hat{Z} |\pm\rangle = | \mp \rangle$. Такой оператор тривиально построить. Теперь создадим состояние $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle - |-\rangle)$. Тогда:

$$(\hat{I}^{(1)} \otimes \hat{Z}^{(2)}) \hat{U} | \psi^{(1)} \rangle | 0^{(2)} \rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (| +^{(1)} \rangle | -^{(2)} \rangle - | -^{(1)} \rangle | +^{(2)} \rangle).$$

Таким образом, при помощи процедуры клонирования известного состояния можно построить запутанное состояние. Этот частный пример иллюстрирует гипотезу о том, что **ЕДИНСТВЕННЫМ** способом создания запутанности между двумя микросистемами является **непосредственное взаимодействие** этих микросистем друг с другом (в нашем примере, при помощи \hat{U}).

Матрица плотности и постулаты квантовой механики

В разделе "Постулаты квантовой механики" была предложена система постулатов, на которых основывается нерелятивистская квантовая теория. Все эти постулаты сформулированы для чистых состояний. Очевидно, что мы могли бы строить квантовую механику сразу для смешанных состояний. Это бы потребовало введение **альтернативной системы** постулатов.

Вопрос: каким образом могли бы звучать первые два постулата из альтернативной аксиоматики?

Постулат N1': квантовая система описывается при помощи эрмитовой матрицы плотности $\hat{\rho}$, которая определена на прямом произведении $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$ гильбертовых пространств. Для чистых состояний $|\psi\rangle$ матрица плотности записывается в виде: $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ (проектор на состояние $|\psi\rangle$).

Постулат N2' или условие нормировки: след матрицы плотности $\text{Tr } \hat{\rho} = 1$. След квадрата матрицы плотности $\text{Tr } \hat{\rho}^2 \leq 1$. Равенство достигается только для чистых состояний.

Факторизация матрицы плотности

Вопрос: разве, классическая физика не является частным случаем квантовой физики в пределе $\hbar \rightarrow 0$? Так в каком смысле в рамках классической физики можно говорить о знании полной информации для каждой из макроскопических подсистем?

Ответ: тут ключевым является прилагательное "макроскопический". Даже при наличии взаимодействия между макроскопическими подсистемами одной системы эти подсистемы **с точностью до выполнения соотношения неопределенностей Гейзенберга** можно считать разделенными в пространстве. Тогда вектор состояния макроскопической системы с хорошей степенью точности можно рассматривать как прямое произведение векторов состояния каждой из макроскопических подсистем

$$|\psi\rangle = |\psi^{(1)}\rangle |\psi^{(2)}\rangle,$$

то есть, состояние $|\psi\rangle$ факторизуется (это простейший случай так называемых **сепарабельных состояний**). Тогда матрица плотности системы "1" + "2" тоже факторизуется.

Действительно,

$$\begin{aligned}\hat{\rho} &= |\psi\rangle\langle\psi| = (|\psi^{(1)}\rangle|\psi^{(2)}\rangle)(\langle\psi^{(1)}|\langle\psi^{(2)}|) = \\ &= (|\psi^{(1)}\rangle\langle\psi^{(1)}|) \otimes (|\psi^{(2)}\rangle\langle\psi^{(2)}|) = \hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)},\end{aligned}$$

где $\hat{\rho}^{(1)}$ и $\hat{\rho}^{(2)}$ – матрицы плотности чистых состояний $|\psi^{(1)}\rangle$ и $|\psi^{(2)}\rangle$ соответственно.

Таким образом, если мы умеем разделять подсистемы между собой (что по определению реализуется в классической физике!), то каждая из подсистем описывается матрицей плотности чистого состояния. И знание полной информации о всей системе автоматически приводит к знанию полной информации о каждой из ее подсистем.

Очевидно, что знание полной информации о каждой из подсистем, как правило, не приводит к получению полной информации о всей системе как в квантовой, так и в классической физике. Например, в классической физике необходимо дополнительно знать информацию о взаимодействии между подсистемами внутри одной макросистемы.

Разложение Шмидта

Однако есть один **важный частный случай**, когда знание информации о каждой из подсистем некоторой микросистемы приводит к знанию информации о микросистеме в целом. Он следует из чисто *математической теоремы Шмидта*.

Теорема Шмидта. Пусть квантовая система находится в чистом состоянии $|\psi\rangle$ и состоит из двух подсистем “A” и “B”. Тогда в подсистеме “A” всегда можно выбрать базис $\{|a_i\rangle\}$, а в подсистеме “B” базис $\{|b_j\rangle\}$ такие, что состояние $|\psi\rangle$ представимо в виде разложения:

$$|\psi\rangle = \sum_{\ell} \sqrt{W_{\ell}} |a_{\ell}\rangle |b_{\ell}\rangle, \quad \text{где} \quad \sum_{\ell} W_{\ell} = 1.$$

Докажем теорему. Прежде всего заметим, что **утверждение** теоремы весьма **нетривиально**. В самом деле, если в подсистеме “A” имеется какой-либо базис $\{|a_i\rangle\}$, а в подсистеме “B” другой базис $\{|\tilde{b}_j\rangle\}$, то самое общее разложение состояния $|\psi\rangle$ по базису обеих подсистем будет иметь вид:

$$|\psi\rangle = \sum_{\ell} \sum_j \psi_{\ell j} |a_{\ell}\rangle |\tilde{b}_j\rangle = \sum_{\ell} |a_{\ell}\rangle |\beta_{\ell}\rangle,$$

где

$$|\beta_e\rangle = \sum_j \psi_{ej} |\tilde{b}_j\rangle.$$

А priori совсем неясно, почему можно выбрать $\langle \beta_e | \beta_{e'} \rangle \sim \delta_{ee'}$.

Покажем, что такой выбор возможен. Пусть $\{|a_e\rangle\}$ – базис, в котором матрица плотности $\hat{\rho}_A$ подсистемы “A” имеет **диагональный вид**, то есть

$$\hat{\rho}_A = \sum_e W_e |a_e\rangle \langle a_e|.$$

Матрицу плотности $\hat{\rho}_A$ также можно получить, если взять частичный след от матрицы плотности $\hat{\rho} = |\psi\rangle \langle \psi|$ всей микросистемы по квантовым числам подсистемы “B”. В этом случае имеем:

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B \hat{\rho} = \text{Tr}_B \left(\sum_{e e'} |a_e\rangle |\beta_e\rangle \langle a_{e'} | \langle \beta_{e'} | \right) = \sum_{e e'} \langle \beta_{e'} | \beta_e \rangle |a_e\rangle \langle a_{e'}|.$$

Сравнивая оба выражения для матрицы плотности $\hat{\rho}_A$ приходим к выводу, что $\langle \beta_{e'} | \beta_e \rangle = W_e \delta_{e' e}$. То есть состояния $|\beta_e\rangle$ и $|\beta_{e'}\rangle$ действительно можно выбрать ортогональными! Теперь введем ортонормированный базис $|b_e\rangle = |\beta_e\rangle / \sqrt{W_e}$ и теорема Шмидта доказана.

Прямым вычислением можно показать, что матрица плотности подсистемы “ B ” в выбранном базисе также диагональна и имеет вид:

$$\hat{\rho}_B = \text{Tr}_A \hat{\rho} = \sum_e W_e |b_e\rangle \langle b_e|.$$

Сделайте это простое упражнение самостоятельно.

Таким образом, **наборы ненулевых собственных значений матриц плотности $\hat{\rho}_A$ и $\hat{\rho}_B$ совпадают!** При этом матрицы $\hat{\rho}_A$ и $\hat{\rho}_B$ не обязаны иметь одинаковую размерность, поскольку, например, количество нулевых собственных значений для каждой из матриц плотности может быть различно.

Если **все ненулевые собственные значения обеих матриц невырождены** (то есть каждому значению W_e можно сопоставить строго один вектор $|a_e\rangle$ и один вектор $|b_e\rangle$), то **разложение Шмидта однозначно**. И в этом специальном случае знание информации о каждой из подсистем полностью определяет состояние микросистемы как целого! Даже с учетом того, что подсистемы “ A ” и “ B ” могут взаимодействовать друг с другом неконтролируемым образом!

Если же, например, матрица плотности $\hat{\rho}_A$ имеет ненулевые вырожденные собственные значения, то дополнительно нужно знать, какая конкретно из ортогональных комбинаций, соответствующих вырожденному значению подсистемы "A", объединяется с данным базисным вектором подсистемы "B". Для этого необходима дополнительная информация о взаимодействии между подсистемами. Этот результат имеет полную аналогию с классикой.

Теперь рассмотрим ту же самую квантовую систему, но в другом чистом состоянии. Обозначим это состояние при помощи вектора $|\varphi\rangle$. Очевидно, что для данного вектора можно написать разложение Шмидта

$$|\varphi\rangle = \sum_n \sqrt{W'_n} |a'_n\rangle |b'_n\rangle, \quad \text{где} \quad \sum_n W'_n = 1.$$

В таком разложении, по сравнению с разложением для $|\psi\rangle$, вообще говоря, **будут иными** не только **вероятности** W'_n (это понятно, поскольку $|\psi\rangle$ и $|\varphi\rangle$ являются различными состояниями), **но также и ортонормированные базисы** $\{|a'_k\rangle\}$ и $\{|b'_n\rangle\}$, что чуть менее тривиально. Доказательство утверждения относительно базисов проведите самостоятельно.

Число Шмидта и запутанные состояния

Определение: количество ненулевых значений $\sqrt{W_\ell}$ называют **числом Шмидта** для данного состояния $|\psi\rangle$.

С помощью числа Шмидта можно **КОЛИЧЕСТВЕННО** определить **степень запутывания** чистого состояния $|\psi\rangle$ микросистемы, которая состоит из **ДВУХ** подсистем. Очевидно, что состояние $|\psi\rangle$ такой системы следует считать *запутанным*, если число Шмидта больше единицы. Если число Шмидта равно 1, то состояние $|\psi\rangle$ должно быть *сепарабельным*.

Примеры:

1) запутанное состояние:

$$|S=0, S_z=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+\^{(1)}\rangle |-\^{(2)}\rangle - |-\^{(1)}\rangle |+\^{(2)}\rangle \right)$$

имеет $\sqrt{W_1} = 1/\sqrt{2}$, $\sqrt{W_2} = -1/\sqrt{2}$ и **число Шмидта = 2**.

На этом примере хорошо видно, почему число Шмидта лучше считать по количеству ненулевых значений $\sqrt{W_\ell}$, а не самих W_ℓ . Действительно, в рассматриваемом примере $W_1 = W_2 = 1/2$, то есть значение $1/2$ является двукратно вырожденным.

2) **запутанное состояние:**

$$|S = 1, S_z = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+\rangle^{(1)} |-\rangle^{(2)} + |-\rangle^{(1)} |+\rangle^{(2)} \right)$$

имеет $\sqrt{W_1} = \sqrt{W_2} = 1/\sqrt{2}$ и число Шмидта = 2, поскольку значение $\sqrt{W_\ell} = 1/\sqrt{2}$ вырождено двукратно.

3) **сепарабельное состояние:**

$$|S = 1, S_z = +1\rangle = |+\rangle^{(1)} |+\rangle^{(2)}$$

для которого, очевидно, число Шмидта = 1.

Важное практическое свойство: число Шмидта сохраняется при унитарных преобразованиях только подсистемы “A” или только подсистемы “B”.

Действительно, пусть $\hat{U} = \hat{U}_A \otimes \hat{1}_B$ – унитарное преобразование подсистемы “A”. Тогда разложение Шмидта для $\hat{U}|\psi\rangle$ имеет вид $\sum_\ell \sqrt{W_\ell} \left(\hat{U}_A |a_\ell\rangle \right) |b_\ell\rangle$, из которого сразу видно, что числа

Шмидта для векторов $|\psi\rangle$ и $\hat{U}|\psi\rangle$ совпадают.

Разложение Шмидта для трех и более подсистем

Казалось бы, можно применить индукцию и “легко” обобщить разложение Шмидта для микросистемы, которая состоит из трех и более подсистем. Однако это **НЕ верно**. Приведем соответствующий **пример**. Рассмотрим состояние

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+\rangle^{(A)} \left(|+\rangle^{(B)} |+\rangle^{(C)} + |-\rangle^{(B)} |-\rangle^{(C)} \right) \right).$$

Тогда

$$\hat{\rho}^{(A)} = \text{Tr}_B \text{Tr}_C \left(|\psi\rangle \langle \psi| \right) = |+\rangle^{(A)} \langle +|^{(A)}.$$

Аналогично

$$\hat{\rho}^{(B)} = \text{Tr}_A \text{Tr}_C \left(|\psi\rangle \langle \psi| \right) = \frac{1}{2} \left(|+\rangle^{(B)} \langle +|^{(B)} + |-\rangle^{(B)} \langle -|^{(B)} \right).$$

и

$$\hat{\rho}^{(C)} = \text{Tr}_A \text{Tr}_B \left(|\psi\rangle \langle \psi| \right) = \frac{1}{2} \left(|+\rangle^{(C)} \langle +|^{(C)} + |-\rangle^{(C)} \langle -|^{(C)} \right).$$

Таким образом собственные значения матрицы $\hat{\rho}^{(A)}$ есть $W_\ell = \{1, 0\}$, а собственные значения матриц $\hat{\rho}^{(B)}$ и $\hat{\rho}^{(C)}$ равны $W_\ell = \{1/2, 1/2\}$. Это **разные наборы** собственных значений, из которых, очевидно, **нельзя построить суммы** вида $\sum_\ell \sqrt{W_\ell} |e^{(A)}\rangle |e^{(B)}\rangle |e^{(C)}\rangle$, где $e = \{+, -\}$.

Состояния Белла (the Bell states)

Изучая сложение двух спинов $s = 1/2$ мы нашли два запутанных состояния $|S = 0, S_z = 0\rangle$ и $|S = 1, S_z = 0\rangle$. Данные состояния, наряду с двумя им ортогональными, играют центральную роль в квантовой теории информации, при изучении феномена запутанности и квантовых корреляций. Поэтому эти состояния получили специальное название – **состояния Белла** – по имени выдающегося ирландского физика-теоретика **Джона Стюарта Белла**, который был одним из пионеров количественного исследования оснований квантовой теории (**неравенства Белла**).

Чаще всего состояния Белла обозначают следующим образом:

$$|\psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+\rangle^{(1)} |-\rangle^{(2)} + |-\rangle^{(1)} |+\rangle^{(2)} \right);$$

$$|\psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+\rangle^{(1)} |-\rangle^{(2)} - |-\rangle^{(1)} |+\rangle^{(2)} \right);$$

$$|\phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+\rangle^{(1)} |+\rangle^{(2)} + |-\rangle^{(1)} |-\rangle^{(2)} \right);$$

$$|\phi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+\rangle^{(1)} |+\rangle^{(2)} - |-\rangle^{(1)} |-\rangle^{(2)} \right).$$

Очевидно, что эти состояния **образуют базис** в пространстве двух спинов $s = 1/2$.

Необходимое условие сепарабельности А.Переса

Чтобы его сформулировать заметим, что если $\hat{\rho}$ – матрица плотности некоторой микросистемы, то матрица $\hat{R} = \hat{\rho}^T$ также удовлетворяет всем свойствам матрицы плотности. Проверьте это самостоятельно.

Пусть теперь микросистема состоит из двух подсистем “A” и “B”. Тогда, если состояние микросистемы сепарабельно, то ее матрица плотности имеет вид:

$$\hat{\rho} = \sum_{\ell} W_{\ell} \left(\hat{\rho}_{\ell}^{(A)} \otimes \hat{\rho}_{\ell}^{(B)} \right).$$

Теперь транспонируем, например, матрицу плотности подсистемы “B”. Тогда

$$(\hat{\rho})^{T_B} = \sum_{\ell} W_{\ell} \left(\hat{\rho}_{\ell}^{(A)} \otimes \hat{R}_{\ell}^{(B)} \right).$$

Такая операция называется **частичным транспонированием** матрицы $\hat{\rho}$. Очевидно, что матрица $(\hat{\rho})^{T_B}$ удовлетворяет всем условиям, которые накладываются на матрицы плотности.

Это наблюдение позволяет сформулировать **критерий сепарабельности А.Переса**: если после частичного транспонирования матрица плотности $\hat{\rho}$ перешла в другую матрицу $(\hat{\rho})^{TB}$, которая удовлетворяет всем свойствам матрицы плотности, то **исходное состояние может быть сепарабельным**.

Доказательство критерия, фактически, было дано выше. Еще раз подчеркнем, что критерий А.Переса представляет собой **только необходимое условие**, но **НЕ достаточное**. Но есть, если данный критерий нарушен, то состояние **ТОЧНО** является запутанным. Если выполнен, то состояние может быть как сепарабельным, так и запутанным.

Рассматриваемый критерий был предложен независимо и почти одновременно в двух работах: **Asher Peres, “Separability Criterion for Density Matrices”, Phys. Rev. Lett. 77, 1413 (1996)** и **М.Horodecki, Р.Horodecki, R.Horodecki, “Separability of mixed states: necessary and sufficient conditions”, Phys. Lett. A 223, pp. 1–8 (1996)**. Поэтому часто данный критерий называют **критерием Переса-Городецкого (Peres–Horodecki criterion)**.

А.Перес и клан Городецких



Ашер Перес

(30.01.1934 – 01.01.2005)



Семья Городецких:

Михал, Ядвига, Ричард и Павел

Михал и Павел Городецкие - младший и старший братья соответственно. Ричард (р. 1943 г.) - их отец - один из самых известных польских физиков. Его работы цитировались более 12000 раз! Все трое Городецких в настоящее время работают в Университете города Гданьска (Польша). А.Перес работал в Технионе (Израиль).

Состояние Вернера и критерий сепарабельности Переса

Состоянием Вернера называется состояние в пространстве двух спинов $s = 1/2$, описываемое матрицей плотности вида

$$\hat{\rho}^{(W)} = x |\Psi^-\rangle \langle \Psi^-| + \frac{1}{4}(1-x)\hat{1},$$

где $0 \leq x \leq 1$, оператор $\hat{1}$ – единичная матрица размерности 4×4 (сумма проекторов на все состояния Белла) и $|\Psi^-\rangle$ – состояние Белла, отвечающее спиновому синглету. Матрица плотности состояния Вернера не изменяется, когда на каждый из спинов действует один и тот же произвольный унитарный оператор, то есть:

$$\left(\hat{U}^{(1)} \otimes \hat{U}^{(2)}\right) \hat{\rho}^{(W)} \left(\hat{U}^{(1)} \otimes \hat{U}^{(2)}\right)^\dagger = \hat{\rho}^{(W)}.$$

Чтобы получить явный вид матрицы $\hat{\rho}^{(W)}$, введем следующий базис в пространстве двух спинов $s = 1/2$:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= \left| +^{(1)} \right\rangle \left| +^{(2)} \right\rangle, |2\rangle = \left| -^{(1)} \right\rangle \left| +^{(2)} \right\rangle, \\ |3\rangle &= \left| +^{(1)} \right\rangle \left| -^{(2)} \right\rangle, |4\rangle = \left| -^{(1)} \right\rangle \left| -^{(2)} \right\rangle. \end{aligned}$$

В этом базисе

$$\hat{\rho}^{(W)} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1-x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1+x & -2x & 0 \\ 0 & -2x & 1+x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-x \end{pmatrix}.$$

Легко видеть, что матрица 4×4 состоит из четырех **независимых** блоков 2×2 . Поэтому частичное транспонирование по переменным подсистемы “ B ” можно провести в каждом из четырех блоков отдельно. Такое транспонирование, очевидно, эквивалентно взаимной перестановке антидиагональных матричных элементов. В результате получаем:

$$\left(\hat{\rho}^{(W)}\right)^{T_B} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1-x & 0 & 0 & -2x \\ 0 & 1+x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1+x & 0 \\ -2x & 0 & 0 & 1-x \end{pmatrix}.$$

Чтобы исследовать свойства матриц $\hat{\rho}^{(W)}$ и $\left(\hat{\rho}^{(W)}\right)^{T_B}$, **приведем** эти матрицы **к диагональному виду**.

Имеем:

$$\hat{\rho}_{\text{diag}}^{(W)} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1-x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1-x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1-x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1+3x \end{pmatrix}$$

и

$$\left(\hat{\rho}^{(W)}\right)_{\text{diag}}^{T_B} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1+x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1+x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1+x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-3x \end{pmatrix}.$$

Из всех свойств матрицы плотности **а) - д) критическим** в данном случае является **свойство б)** “о неотрицательности диагональных матричных элементов”. Для матрицы $\hat{\rho}_{\text{diag}}^{(W)}$ оно выполняется всегда (вспомните, что $0 \leq x \leq 1$), а для матрицы $\left(\hat{\rho}^{(W)}\right)_{\text{diag}}^{T_B}$ только при $0 \leq x \leq 1/3$. Таким образом, в диапазоне

$$1/3 \leq x \leq 1$$

согласно критерию Переса состояние Вернера **ГАРАНТИРОВАННО** оказывается **запутанным**.

Редукционное условие сепарабельности

Можно сформулировать еще одно **необходимое условие сепарабельности**, которое получило название **редукционного критерия** (“Reduction criterion”).

Напомним, что **положительно определенной матрицей** (оператором) называется матрица (оператор), у которой (которого) **все собственные значения ≥ 0** . И что любая матрица плотности обладает свойством положительной определенности по построению.

Сначала рассмотрим **отображение**

$$\Lambda(\hat{\rho}) = \hat{1} \text{Tr} \hat{\rho} - \hat{\rho}.$$

Если $\hat{\rho}$ – положительно определенная матрица, то $\Lambda(\hat{\rho})$ также **положительно определена**.

Это легко доказать. Для любой положительно определенной матрицы $\hat{\rho}$ существует унитарное преобразование \hat{U}_ρ , которое приводит эту матрицу к диагональному виду. Тогда:

$$\begin{aligned} \hat{U}_\rho \Lambda(\hat{\rho}) \hat{U}_\rho^\dagger &= \hat{U}_\rho \left(\hat{\mathbf{1}} \operatorname{Tr} \left(\hat{U}_\rho^\dagger \hat{U}_\rho \hat{\rho} \right) - \hat{\rho} \right) \hat{U}_\rho^\dagger = \hat{\mathbf{1}} \operatorname{Tr} \left(\hat{U}_\rho \hat{\rho} \hat{U}_\rho^\dagger \right) - \hat{U}_\rho \hat{\rho} \hat{U}_\rho^\dagger = \\ &= \hat{\mathbf{1}} \operatorname{Tr} \hat{\rho}_{\text{diag}} - \hat{\rho}_{\text{diag}} = \begin{pmatrix} \sum_i \rho_i - \rho_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sum_i \rho_i - \rho_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \sum_i \rho_i - \rho_n \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

где $\rho_j \geq 0$ – собственные значения матрицы плотности $\hat{\rho}$. Поэтому очевидно, что для любого конкретного j

$$\sum_i \rho_i - \rho_j = \sum_{i \neq j} \rho_i \geq 0.$$

Таким образом утверждение о положительности отображения $\Lambda(\hat{\rho})$ доказано.

Теперь рассмотрим **сепарабельное состояние**

$$\hat{\rho} = \sum_{\ell} W_{\ell} \left(\hat{\rho}_{\ell}^{(A)} \otimes \hat{\rho}_{\ell}^{(B)} \right),$$

на которое **подействуем отображением** $\left(\hat{\mathbf{I}}^{(A)} \otimes \Lambda^{(B)} \right)$. Тогда получаем:

$$\begin{aligned} \left(\hat{\mathbf{I}}^{(A)} \otimes \Lambda^{(B)} \right) \hat{\rho} &= \sum_{\ell} W_{\ell} \hat{\rho}_{\ell}^{(A)} \Lambda \left(\hat{\rho}_{\ell}^{(B)} \right) = \sum_{\ell} W_{\ell} \hat{\rho}_{\ell}^{(A)} \left(\hat{\mathbf{I}}^{(B)} \text{Tr} \hat{\rho}_{\ell}^{(B)} - \hat{\rho}_{\ell}^{(B)} \right) = \\ &= \sum_{\ell} W_{\ell} \hat{\rho}_{\ell}^{(A)} \otimes \hat{\mathbf{I}}^{(B)} - \sum_{\ell} W_{\ell} \hat{\rho}_{\ell}^{(A)} \hat{\rho}_{\ell}^{(B)} = \\ &= \left(\text{Tr}_B \hat{\rho} \right) \otimes \hat{\mathbf{I}}^{(B)} - \hat{\rho} = \hat{\rho}_A \otimes \hat{\mathbf{I}}^{(B)} - \hat{\rho}. \end{aligned}$$

Поскольку отображение $\left(\hat{\mathbf{I}}^{(A)} \otimes \Lambda^{(B)} \right) \hat{\rho}$ положительно определено, то для сепарабельных состояний **матрица**

$$\hat{\rho}_A \otimes \hat{\mathbf{I}}^{(B)} - \hat{\rho}$$

обязана быть **положительно определена**. Полностью аналогично доказывается, что для сепарабельного состояния **матрица**

$$\hat{\mathbf{I}}^{(A)} \otimes \hat{\rho}_B - \hat{\rho}$$

тоже **положительно определена**.

Таким образом, для того, чтобы состояние микросистемы, которое описывается матрицей плотности $\hat{\rho}$, было сепарабельным необходима **положительность** матриц

$$\hat{\rho}_A \otimes \hat{\rho}^{(B)} - \hat{\rho}$$

и

$$\hat{\rho}^{(A)} \otimes \hat{\rho}_B - \hat{\rho}.$$

В этом заключается **редукционный критерий сепарабельности**. Как и критерий А.Переса, это **только необходимый**, но не достаточный критерий.

Впервые редукционный критерий был предложен в работе **N. J. Cerf and C. Adami, "Quantum extension of conditional probability", Phys.Rev.A 60, p.893, 1999**. Спустя пол-года (даты взяты по появлению работ на сайте arXiv.org) этот критерий при помощи гораздо более простых рассуждений был независимо найден в статье **M.Horodecki and P.Horodecki, "Reduction criterion of separability and limits for a class of distillation protocols", Phys. Rev. A 59, p.4206, 1999**. В лекциях мы воспроизвели изложение последней из двух работ.

Состояние Вернера и редуционный критерий

Применим редуционный критерий к **состоянию Вернера**. Имеем:

$$\hat{\rho}_A^{(W)} = \text{Tr}_B \hat{\rho}^{(W)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \text{Tr}_A \hat{\rho}^{(W)} = \hat{\rho}_B^{(W)}.$$

Тогда

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_A^{(W)} \otimes \hat{1}^{(B)} - \hat{\rho}^{(W)} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1-x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1+x & -2x & 0 \\ 0 & -2x & 1+x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-x \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1+x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1-x & 2x & 0 \\ 0 & 2x & 1-x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1+x \end{pmatrix} = \hat{1}^{(A)} \otimes \hat{\rho}_B^{(W)} - \hat{\rho}^{(W)}. \end{aligned}$$

Чтобы исследовать получившуюся матрицу на положительность, ее необходимо диагонализировать.

Простые стандартные вычисления дают:

$$\begin{aligned} \left(\hat{\rho}_A^{(W)} \otimes \hat{1}^{(B)} - \hat{\rho}^{(W)} \right)_{diag} &= \left(\hat{1}^{(A)} \otimes \hat{\rho}_B^{(W)} - \hat{\rho}^{(W)} \right)_{diag} = \\ &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1+x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1+x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1+x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-3x \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Эти матрицы **совпадают** с матрицей $(\hat{\rho}^{(W)})_{diag}^{T_B}$, которая исследовалась на положительность при применении критерия А.Переса.

Следовательно, **согласно редуccionному критерию** при

$$1/3 \leq x \leq 1$$

состояние Вернера **ГАРАНТИРОВАННО** оказывается **запутанным**. Этот результат **совпадает** с результатом, полученным из **критерия А.Переса**. Заметим, что совпадение результатов обоих критериев обусловлено спецификой состояния Вернера и не выполняется при анализе произвольного состояния.

Часть 3

ФОРМУЛА ФОН НЕЙМАНА И ЕЕ СЛЕДСТВИЯ

Условная матрица плотности и формула фон Неймана

Пусть квантовая система, которая описывается матрицей плотности $\hat{\rho} = \sum_{\ell} W_{\ell} \rho_{\ell}$, обладает некоторой наблюдаемой характеристикой A . Сопоставим этой характеристике эрмитов оператор \hat{A} с дискретным невырожденным спектром $\{a_n\}$ (для простоты). Хорошо известно, что собственные вектора $|a_n\rangle$ наблюдаемой A образуют базис, по которому раскладывается любой вектор $|\psi_{\ell}\rangle$:

$$|\psi_{\ell}\rangle = \sum_n C_{\ell n} |a_n\rangle, \text{ где } \langle a_{n'} | a_{n''}\rangle = \delta_{n' n''}.$$

Вопрос: как будет выглядеть матрица плотности системы, если проведенное над системой измерение показало определенное значение $a_{n'}$ наблюдаемой A ?

Ответ: При измерении наблюдаемой A конкретное значение $a_{n'}$ из спектра будет найдено с вероятностью

$$w_{n'} = \sum_{\ell} W_{\ell} w(a_{n'}|\ell),$$

где $w(a_{n'}|\ell)$ – **условная вероятность**, которая определяет вероятность измерения значения $a_{n'}$ при условии, что среди всех возможных чистых состояний матрицы $\hat{\rho}$ реализовалось именно состояние $\hat{\rho}_\ell = |\psi_\ell\rangle\langle\psi_\ell|$.

Легко видеть, что условная вероятность $w(a_{n'}|\ell)$ определяется по формуле:

$$w(a_{n'}|\ell) = |C_{\ell n'}|^2 = |\langle a_{n'} | \psi_\ell \rangle|^2 = \langle a_{n'} | \psi_\ell \rangle \langle \psi_\ell | a_{n'} \rangle = \text{Tr} \left(\hat{P}_{n'}^{(A)} \hat{\rho}_\ell \right),$$

где $\hat{P}_{n'}^{(A)} = |a_{n'}\rangle\langle a_{n'}|$ – проектор на состояние $|a_{n'}\rangle$. Тогда вероятность $w_{n'}$ равна:

$$\begin{aligned} w_{n'} &= \sum_\ell W_\ell \text{Tr} \left(\hat{P}_{n'}^{(A)} \hat{\rho}_\ell \right) = \text{Tr} \left(\hat{P}_{n'}^{(A)} \sum_\ell W_\ell \hat{\rho}_\ell \right) = \\ &= \text{Tr} \left(\hat{P}_{n'}^{(A)} \hat{\rho} \right) = \text{Tr} \left(\hat{P}_{n'}^{(A)} \hat{\rho} \hat{P}_{n'}^{(A)} \right). \end{aligned}$$

В последнем равенстве мы учли основное свойство проектора $\hat{P}_{n'}^{(A)} = \left(\hat{P}_{n'}^{(A)} \right)^2$ и свойство циклической перестановки под знаком следа: $\text{Tr} \left(\hat{A} \hat{B} \hat{C} \right) = \text{Tr} \left(\hat{B} \hat{C} \hat{A} \right)$.

Введем новый оператор:

$$\hat{\rho}_{n'}^{(A)} = \frac{\hat{P}_{n'}^{(A)} \hat{\rho} \hat{P}_{n'}^{(A)}}{w_{n'}} = \frac{\hat{P}_{n'}^{(A)} \hat{\rho} \hat{P}_{n'}^{(A)}}{\text{Tr} \left(\hat{P}_{n'}^{(A)} \hat{\rho} \right)}.$$

Можно проверить, что этот оператор удовлетворяет всем свойствам матрицы плотности. Назовем его **условной матрицей плотности**. Из проведенных выше вычислений следует, что оператор $\hat{\rho}_{n'}^{(A)}$ нужно трактовать как матрицу плотности квантовой системы, если измерение наблюдаемой A дало значение $a_{n'}$. Этим решается поставленная задача.

Пусть теперь в системе помимо наблюдаемой A имеется другая наблюдаемая B . Легко вычислить условную вероятность, что в спектре наблюдаемой B будет измерено конкретное значение $b_{k'}$, если до этого в спектре наблюдаемой A было измерено значение $a_{n'}$. Соответствующая условная вероятность:

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

носит название **формулы фон Неймана**.

Редукция матрицы плотности и парадокс друга Вигнера

Формула фон Неймана легко объясняет, почему два наблюдателя увидят один и тот же результат измерения. Пусть два экспериментатора измеряют спектр наблюдаемой A . Назовем этих ученых **Аленушкой** и **Братцевиванушкой** (благодарю О.Чекерес за прекрасную идею!). Хотя, обычно, их называют **Алисой** и **Бобом**. Пусть Аленушка измерила значение $a_{n'}$. Тогда матрица плотности квантовой системы станет $\hat{\rho}_{n'}^{(A)}$. Далее за приборы встает Братцевиванушка. Если он умел и оперативен, то к началу его измерений матрица плотности микросистемы не успеет эволюционировать. Следовательно, вероятность найти в спектре наблюдаемой A значение $a_{k'}$ равна:

$$w(a_{k'} | a_{n'}) = \text{Tr} \left(\hat{\rho}_{k'}^{(A)} \hat{\rho}_{n'}^{(A)} \right) = \frac{\text{Tr} \left(\hat{\rho}_{k'}^{(A)} \hat{\rho}_{n'}^{(A)} \hat{\rho} \hat{\rho}_{n'}^{(A)} \right)}{\text{Tr} \left(\hat{\rho}_{n'}^{(A)} \hat{\rho} \right)}.$$

Поскольку различным значениям a_n соответствуют ортогональные проекторы, то $\hat{\rho}_{k'}^{(A)} \hat{\rho}_{n'}^{(A)} = \delta_{k' n'}$. Тогда:

$$w(a_{k'} | a_{n'}) = \delta_{k' n'} \frac{\text{Tr} \left(\hat{\rho} \hat{\rho}_{n'}^{(A)} \right)}{\text{Tr} \left(\hat{\rho}_{n'}^{(A)} \hat{\rho} \right)} = \delta_{k' n'}.$$

Этот тривиальный математический факт часто облачают в форму парадоксального суждения.

Введем очень **важное определение**: переход от матрицы плотности $\hat{\rho}$ к матрице плотности $\hat{\rho}_{n'}^{(A)}$ в результате измерения называется **РЕДУКЦИЕЙ** (или **стягиванием**) матрицы плотности к одной из своих компонент. Выше понятие редукции относилось к чистым состояниям, сконструированным при помощи принципа суперпозиции. Теперь мы будем применять его также к смешанным состояниям и матрице плотности.

Вопрос: где происходит редукция в данном конкретном измерении? В самой микросистеме при ее взаимодействии с макроприбором? В макроприборе при измерении состояния микросистемы? В компьютере, обрабатывающем сигналы макроприбора? А, может быть, в мозгу у наблюдателя, который воспринимает и интерпретирует данные компьютера?

В последнем случае человек становится одним из главных элементов мироздания. Можно сказать, что благодаря человеку Вселенная существует в одном конкретном состоянии, а не в их суперпозиции или смеси.

Чтобы опровергнуть эту идеалистическую точку зрения американский физик–теоретик **Юджин Вигнер** придумал элегантное рассуждение. Оно получило название "**парадокса друга Вигнера**". Хотя никакого парадокса в нем не содержится.

Пусть Аленушка провела измерение микросистемы в одиночестве и нашла значение $a_{n'}$. В ее мозгу микросистема **УЖЕ** находится в состоянии $\hat{\rho}_{n'}^{(A)}$. Но для Братцаиванушки, который в лаборатории еще не появлялся, микросистема **ПО-ПРЕЖНЕМУ** находится в состоянии $\hat{\rho}$. Так кто из них двоих определяет состояние микросистемы? Чей мозг (в тайне от санитаров) управляет состоянием Вселенной? И что измерит Братециванушка, когда, наконец, доберется до лаборатории? Квантовая механика дает однозначные ответы на поставленные вопросы (см. выше). И эти ответы **НЕ нуждаются** в особой роли мозга (души, печени и левой пятки) любого (не)разумного наблюдателя!

Проекционный постулат М.Борна и проекционный постулат Дирака-фон Неймана

В разделе "Постулаты квантовой механики" мы сформулировали **Постулат N4** о физическом смысле коэффициентов разложения в принципе суперпозиции, который в литературе обычно называют **проекционным постулатом Макса Борна**. Данный постулат предлагает рецепт сравнения предсказаний квантовой теории с экспериментом, если квантовая система **находится в чистом состоянии**.

В терминах измерений **Постулат N4** можно сформулировать следующим образом. Пусть **ДО** измерения микросистема находилась в чистом состоянии $|\psi\rangle$. Если измерение наблюдаемой A дало значение $a_{n'}$, то следует полагать, что сразу **ПОСЛЕ** измерения квантовая система перешла в состояние $|a_{n'}\rangle$. Вероятность измерить значение $a_{n'}$ в состоянии $|\psi\rangle$ задается выражением

$$w_{n'} = |\langle a_{n'} | \psi \rangle|^2 = \langle \psi | a_{n'} \rangle \langle a_{n'} | \psi \rangle = \text{Tr} \left(\hat{P}_{n'}^{(A)} \hat{P}_\psi \right).$$

Вопрос: как обобщить проекционный постулат Борна на смешанные состояния?

Ответ: опираясь на изложенный выше материал мы могли бы сформулировать этот постулат следующим образом (**проекционный постулат Дирака-фон Неймана**):

Постулат N4': Пусть **ДО** измерения микросистема находилась в смешанном состоянии $\hat{\rho}$. Если измерение наблюдаемой A дало значение $a_{n'}$, то следует полагать, что сразу после измерения квантовая система перешла в состояние

$$\hat{\rho}_{n'}^{(A)} = \frac{\hat{P}_{n'}^{(A)} \hat{\rho} \hat{P}_{n'}^{(A)}}{\text{Tr} \left(\hat{P}_{n'}^{(A)} \hat{\rho} \right)}.$$

Вероятность измерить значение $a_{n'}$ в состоянии $\hat{\rho}$ задается величиной "fidelity":

$$w_{n'} = \text{Tr} \left(\hat{P}_{n'}^{(A)} \hat{\rho} \right).$$

Note: заметим, что так сформулированные проекционные постулаты Борна и Дирака-фон Неймана автоматически решают **вопрос о приготовлении микросистемы** в заданном квантовом состоянии при помощи макроскопических приборов

Постулат о среднем значении операторов

Если продолжать последовательно строить аксиоматику квантовой теории в терминах матрицы плотности, то необходимо сформулировать постулат для вычисления средних значений наблюдаемых. Очевидно, что в качестве этого постулата следует использовать свойство **д)** матрицы плотности, которое выше было выведено при помощи аксиоматики квантовой механики в терминах векторов состояния.

Постулат N5': любая микросистема обладает хотя бы одной наблюдаемой. В квантовой теории любой наблюдаемой A ставится в соответствие эрмитов оператор \hat{A} так, что среднее значение этой наблюдаемой в состоянии микросистемы, которое описывается матрицей плотности $\hat{\rho}$, вычисляется по формуле:

$$\langle A \rangle_{\rho} = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A}).$$

Заметим, что в формулировке данной аксиомы как самоочевидное предполагалось, что микросистему характеризуют только средние значения наблюдаемых.

Модель измерения по фон Нейману

Проекционные постулаты Борна и Дирака-фон Неймана выражают вероятности измерения через коэффициенты разложения волновой функции или след матрицы плотности микросистемы. Но измерения проводятся при помощи макроприборов. И информацию о микросистеме экспериментатору передает макроприбор. Как связаны между собой вероятности, полученные на основе описания микросистемы, и вероятности, которые измеряет макроприбор?

Ясно, что для ответа на этот вопрос необходимо привлечь какую-нибудь модель измерения. Одну из таких моделей предложил фон Нейман. Изучим эту модель подробно.

Рассмотрим квантовую микросистему (обозначим "Q") и измерительный макроприбор (обозначим "D"). До начала измерения квантовая микросистема находится в состоянии, описываемом матрицей плотности

$$\hat{\rho}_Q^{(in)} = \sum_{\ell} W_{\ell} \hat{\rho}_{Q_{\ell}},$$

где $\hat{\rho}_{Q_{\ell}} = |Q_{\ell}\rangle\langle Q_{\ell}|$ – проекторы на чистые состояния, $\hat{\rho}_{Q_{\ell}}^2 = \hat{\rho}_{Q_{\ell}}$.

Очевидно, что до начала измерения макроприбор не должен ничего показывать. Поскольку любой макроприбор состоит из атомов и молекул, то логично предположить, что состояние макроприбора тоже можно описывать при помощи многочастичной матрицы плотности. Пусть до измерения это была матрица плотности $\hat{\rho}_{D_0}$. Если до начала измерения между микросистемой и макроприбором не происходило никаких взаимодействий, то начальную матрицу плотности всей системы можно написать в факторизованном виде:

$$\hat{\rho}^{(in)} = \hat{\rho}_Q^{(in)} \hat{\rho}_{D_0}.$$

Процесс измерения по фон Нейману представляет собой запутывание состояний микросистемы и макроприбора в результате взаимодействия. Тогда после измерения матрица плотности всей системы становится равной

$$\hat{\rho}^{(out)} = W_0 \hat{\rho}^{(in)} + \sum_{\ell} W_{\ell} \hat{\rho}_{\ell}.$$

Если **измерение однозначное**, то есть каждому **измеренному** состоянию микросистемы соответствует только одно состояние макроприбора и наоборот, то матрицы плотности $\hat{\rho}_{\ell}$ должны быть устроены следующим образом:

$$\hat{P}_{D_\ell} \hat{\rho}_{\ell'} \hat{P}_{D_\ell} = \delta_{\ell \ell'} \hat{\rho}_\ell \Rightarrow \hat{P}_{D_\ell} \hat{\rho}^{(out)} \hat{P}_{D_\ell} = W_\ell \hat{\rho}_\ell, \quad D_\ell \neq D_0$$

и аналогично

$$\hat{\rho}_{Q_\ell} \hat{\rho}_{\ell'} \hat{\rho}_{Q_\ell} = \delta_{\ell \ell'} \hat{\rho}_\ell \Rightarrow \hat{\rho}_{Q_\ell} \hat{\rho}^{(out)} \hat{\rho}_{Q_\ell} = W_\ell (W_0 + 1) \hat{\rho}_\ell.$$

Из приведенных выше правил имеются простые следствия:

$$\text{Tr} \left(\hat{\rho}^{(out)} \hat{P}_{D_\ell} \right) = \text{Tr} \left(\hat{P}_{D_\ell} \hat{\rho}^{(out)} \hat{P}_{D_\ell} \right) = W_\ell \text{Tr} \left(\hat{\rho}_\ell \right) = W_\ell$$

и

$$\text{Tr} \left(\hat{\rho}_{Q_{\ell'}} \hat{\rho}_\ell \right) = \text{Tr} \left(\hat{\rho}_{Q_{\ell'}} \hat{\rho}_\ell \hat{\rho}_{Q_{\ell'}} \right) = \delta_{\ell \ell'} \text{Tr} \left(\hat{\rho}_\ell \right) = \delta_{\ell \ell'}.$$

Тогда по формуле фон Неймана вероятность микросистеме находиться в состоянии $Q_{\ell'}$, если после измерения макроприбор находится в состоянии D_ℓ , равна:

$$w(Q_{\ell'} | D_\ell) = \frac{\text{Tr} \left(\hat{\rho}_{Q_{\ell'}} \hat{P}_{D_\ell} \hat{\rho}^{(out)} \hat{P}_{D_\ell} \right)}{\text{Tr} \left(\hat{P}_{D_\ell} \hat{\rho}^{(out)} \right)} = \frac{W_\ell \text{Tr} \left(\hat{\rho}_{Q_{\ell'}} \hat{\rho}_\ell \right)}{\text{Tr} \left(\hat{P}_{D_\ell} \hat{\rho}^{(out)} \right)} = \delta_{\ell \ell'}.$$

А вероятность макроприбору находиться в состоянии D_ℓ есть:

$$w_{D_\ell} = \text{Tr} \left(\hat{\rho}^{(out)} \hat{P}_{D_\ell} \right) = W_\ell,$$

то есть равна вероятности состояния Q_ℓ в матрице плотности микросистемы $\hat{\rho}_Q^{(in)}$ ДО измерения.

Таким образом, модель измерения по фон Нейману не противоречит аксиомам квантовой механики, является достаточно общей для исследования широкого круга явлений в области измерений и достаточно просто демонстрирует, каким образом внутренние свойства микросистемы связаны с показаниями измеряющих их макроприборов.

Однако эта модель не объясняет, почему состояния микросистемы и макроприбора должны запутываться взаимно однозначно, и не предлагает конкретного механизм такого запутывания.

Локальность нерелятивистской квантовой механики на макроскопическом уровне и теорема Эберхарда

НЕлокальность нерелятивистской квантовой механики (**НКМ**) **НА МИКРОУРОВНЕ** прямо заложена в **математический аппарат** этой **теории**. То есть, в рамках НКМ **любое изменение** подсистемы **A** приводит к **мгновенному изменению** подсистемы **B**, если эти подсистемы находились в запутанном состоянии.

Поясним данное утверждение на простом примере. Пусть подсистемы **A** и **B** – это два спина $s^{(A)} = 1/2$ и $s^{(B)} = 1/2$, которые находятся в синглетном белловском состоянии

$$|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+\rangle^{(A)} |-\rangle^{(B)} - |-\rangle^{(A)} |+\rangle^{(B)} \right).$$

Матрица плотности всей системы $\hat{\rho} = |\Psi^-\rangle \langle \Psi^-|$. Как было показано в параграфе "Квантовое происхождение вероятностей W_ℓ ", в этом случае матрица плотности подсистемы **A** может быть записана в виде $\hat{\rho}^{(A)} = \hat{1}/2$. Пусть теперь в подсистеме **B** измерено значение спина $s_z^{(B)} = +1/2$. Тогда согласно проекционному постулату Дирака – фон Немана матрица плотности подсистемы **A** будет иметь вид:

$$\hat{\rho}^{(A)} = \text{Tr}_B \left(\frac{\hat{P}_+^{(B)} \hat{\rho} \hat{P}_+^{(B)}}{\text{Tr} \left(\hat{P}_+^{(B)} \hat{\rho} \right)} \right) = \hat{\rho}_-^{(A)},$$

где $\hat{P}_{\pm}^{(\alpha)} = |\pm\rangle^{(\alpha)} \langle \pm|^{(\alpha)}$ – соответствующие проекционные операторы и $\alpha = \{A, B\}$ – индекс подсистем.

Согласно формуле фон Неймана условная вероятность измерить значение $s_z^{(A)} = +1/2$ для подсистемы A в то время как в подсистеме B было измерено значение $s_z^{(B)} = +1/2$ равна:

$$w\left(+^{(A)} \middle| +^{(B)}\right) = \text{Tr}\left(\hat{P}_+^{(A)} \hat{\rho}^{(A)}\right) = \text{Tr}\left(\hat{P}_+^{(A)} \hat{P}_-^{(A)}\right) = 0.$$

Аналогичная условная вероятность для $s_z^{(A)} = -1/2$ и $s_z^{(B)} = +1/2$ есть

$$w\left(-^{(A)} \middle| +^{(B)}\right) = \text{Tr}\left(\hat{P}_-^{(A)} \hat{\rho}^{(A)}\right) = \text{Tr}\left(\hat{P}_-^{(A)} \hat{P}_-^{(A)}\right) = 1.$$

При этом изменения в подсистеме A от $\hat{\rho}^{(A)} = \hat{1}/2$ к $\hat{\rho}^{(A)} = \hat{P}_-^{(A)}$ происходят мгновенно "сразу после" изменений в подсистеме B .

Однако мы знаем, что результат любого изменения квантовой системы должен быть зарегистрирован макроскопическим прибором. Только путем изменения наблюдатель может узнать о произошедшем изменении состояния микросистемы. Поэтому возникает естественный **вопрос: распространяется ли микроскопическая нелокальность НКМ на показания макроприборов?**

Отрицательный ответ на поставленный выше вопрос дает **теорема Эберхарда** (Eberhard, P.H., “Bell’s theorem and the different concepts of nonlocality”, Nuovo Cimento 46B, 392-419 (1978)).

Пусть имеется квантовая система, которая описывается матрицей плотности $\hat{\rho}$. И пусть эта система состоит из двух подсистем A и B . **Теорема Эберхарда** гласит, что **никакое измерение наблюдаемых, связанных только с подсистемой A , не влияет на результат измерения любых наблюдаемых, которые связаны только с подсистемой B .**

Предположим, что в подсистеме A имеется наблюдаемая F_A с дискретным спектром $f_i^{(A)}$, которая измеряется макроприбором D_A . Макроприбор обладает набором макроскопически различных состояний $D_\alpha^{(A)}$. Для подсистемы B аналогично введем наблюдаемую G_B с дискретным спектром $g_j^{(B)}$, и измерительный макроприбор D_B , у которого имеется набор макроскопически различных состояний $D_\beta^{(B)}$.

Тогда для теоремы Эберхарда можно дать еще одну эквивалентную формулировку: НКМ запрещает нелокальные корреляции между состояниями макроприборов $D_\alpha^{(A)}$ и $D_\beta^{(B)}$.

На математическом языке последняя формулировка означает, что

$$\sum_j w \left(f_i^{(A)}, D_\alpha^{(A)} \mid g_j^{(B)}, D_\beta^{(B)} \right) = w \left(f_i^{(A)}, D_\alpha^{(A)} \right),$$

и

$$\sum_i w \left(f_i^{(A)}, D_\alpha^{(A)} \mid g_j^{(B)}, D_\beta^{(B)} \right) = w \left(g_j^{(B)}, D_\beta^{(B)} \right),$$

где $w(x|y)$ – условная вероятность произойти событию x , если событие y уже произошло. Особенностью этих формул является то, что впервой после суммирования по j пропадает зависимость от $D_\beta^{(B)}$. А во второй после суммирования по i уходит зависимость от $D_\alpha^{(A)}$. Абсолютно нетривиальный результат!

Если бы локальность на макроуровне была бы нарушена, то изменяя, например, состояние макроприбора $D_\beta^{(B)}$, мы могли бы мгновенно влиять на результат измерения в подсистеме A и, тем самым, передавать информацию быстрее скорости света.

В принципе, нарушение локальности НКМ на макроуровне нас совсем не удивило бы, поскольку мы рассматриваем нерелятивистскую теорию, в которой $c = +\infty$. Более того, такой результат был бы ожидаем. Тем интереснее, что именно на макроуровне имеет место локальности НКМ!

Докажем это утверждение наконец. Сначала выполним измерение наблюдаемой F_A подсистемы A . Вероятность того, что значение F_A будет равно $f_i^{(A)}$ при условии, что мы наблюдаем макроприбор D_A в состоянии $D_\alpha^{(A)}$, задается формулой

$$w(f_i^{(A)}|D_\alpha^{(A)}) = \text{Tr} \left(\hat{P}_{f_i D_\alpha}^{(A)} \hat{\rho} \right),$$

где $\hat{P}_{f_i D_\alpha}^{(A)} = \left| f_i^{(A)}, D_\alpha^{(A)} \right\rangle \left\langle f_i^{(A)}, D_\alpha^{(A)} \right|$ – проектор на состояние $\left| f_i^{(A)}, D_\alpha^{(A)} \right\rangle$. После проведения измерения наблюдаемой F_A , согласно постулату Дирака – фон Неймана матрицу плотности квантовой можно записать в следующем виде:

$$\hat{\rho}^{(out)} = \frac{\hat{P}_{f_i D_\alpha}^{(A)} \hat{\rho} \hat{P}_{f_i D_\alpha}^{(A)}}{w(f_i^{(A)}|D_\alpha^{(A)})}.$$

Затем выполним измерение наблюдаемой G_B в подсистеме B . Вероятность того, будет получено значение $g_j^{(B)}$ при условии, что макроприбор D_B наблюдается нами в состоянии $D_\beta^{(B)}$, задается формулой фон Неймана:

$$w(g_j^{(B)}|f_i^{(A)}, D_\alpha^{(A)}, D_\beta^{(B)}) = \text{Tr} \left(\hat{P}_{g_j D_\beta}^{(B)} \hat{\rho}^{(out)} \right) = \frac{\text{Tr} \left(\hat{P}_{g_j D_\beta}^{(B)} \hat{P}_{f_i D_\alpha}^{(A)} \hat{\rho} \hat{P}_{f_i D_\alpha}^{(A)} \right)}{w(f_i^{(A)}|D_\alpha^{(A)})},$$

где проектор $\hat{P}_{g_j D_\beta}^{(B)} = \left| g_j^{(B)}, D_\beta^{(B)} \right\rangle \left\langle g_j^{(B)}, D_\beta^{(B)} \right|$.

Тогда совместная вероятность измерения $f_i^{(A)}$ и $g_j^{(B)}$ при условии, что макроприборы D_A и D_B будут находиться в состояниях $D_\alpha^{(A)}$ и $D_\beta^{(B)}$ соответственно, равна:

$$w(g_j^{(B)}, f_i^{(A)} | D_\alpha^{(A)}, D_\beta^{(B)}) = w(f_i^{(A)} | D_\alpha^{(A)}) w(g_j^{(B)} | f_i^{(A)}, D_\alpha^{(A)}, D_\beta^{(B)}) = \\ = \text{Tr} \left(\hat{P}_{g_j D_\beta}^{(B)} \hat{P}_{f_i D_\alpha}^{(A)} \hat{\rho} \hat{P}_{f_i D_\alpha}^{(A)} \right).$$

Эту формулу можно упростить. Проекторы $\hat{P}_{f_i D_\alpha}^{(A)}$ и $\hat{P}_{g_j D_\beta}^{(B)}$ действуют в разных гильбертовых пространствах. Поэтому они должны коммутировать между собой. Принимая во внимание цикличность следа и условие $\hat{P}_{f_i D_\alpha}^{(A)2} = \hat{P}_{f_i D_\alpha}^{(A)}$, для искомой вероятности окончательно находим:

$$w(g_j^{(B)}, f_i^{(A)} | D_\alpha^{(A)}, D_\beta^{(B)}) = \text{Tr} \left(\hat{P}_{g_j D_\beta}^{(B)} \hat{P}_{f_i D_\alpha}^{(A)} \hat{\rho} \right).$$

Структура данной формулы прозрачна. Мы получили fidelity матрицы плотности $\hat{\rho}$ и факторизованной матрицы плотности $\hat{P}_{g_j D_\beta}^{(B)} \hat{P}_{f_i D_\alpha}^{(A)}$ двух квантовых подсистем, которые находятся в состояниях $|g_j^{(B)}, D_\beta^{(B)}\rangle$ и $|f_i^{(A)}, D_\alpha^{(A)}\rangle$ соответственно.

Поскольку при измерении наблюдаемой G_B мы не интересуемся, в каком состоянии будет находиться подсистема A , то просуммировав по всем возможным состояниям наблюдаемой F_A находим вероятность измерения значения $g_j^{(B)}$ наблюдаемой G_B при условии, что макроприбор D_B находится в состоянии $D_\beta^{(B)}$. Таким образом:

$$\begin{aligned}
 w(g_j^{(B)} | D_\beta^{(B)}) &= \sum_i w(g_j^{(B)}, f_i^{(A)} | D_\alpha^{(A)}, D_\beta^{(B)}) = \sum_i \text{Tr} \left(\hat{P}_{g_j D_\beta}^{(B)} \hat{P}_{f_i D_\alpha}^{(A)} \hat{\rho} \right) = \\
 &= \text{Tr} \left(\hat{P}_{g_j D_\beta}^{(B)} \left(\sum_i \hat{P}_{f_i D_\alpha}^{(A)} \right) \hat{\rho} \right) = \text{Tr} \left(\hat{P}_{g_j D_\beta}^{(B)} \hat{1} \hat{\rho} \right) = \text{Tr} \left(\hat{P}_{g_j D_\beta}^{(B)} \hat{\rho} \right),
 \end{aligned}$$

где в первом равенстве второй строчки были использованы **предположение** фон Неймана **об однозначности измерения** свойств микросистемы при помощи макроприборов и **условие полноты** для проекционных операторов подсистемы A . Из полученной формулы видно, что $w(g_j^{(B)} | D_\beta^{(B)})$ **НЕ ЗАВИСИТ** от состояния макроприбора D_A , который производит измерения в подсистеме A . Теорема доказана.

Суперпозиция или смесь!

Для упрощения задачи рассмотрим квантовую систему, которую можно описать только при помощи двух векторов состояния $|\psi_1\rangle$ и $|\psi_2\rangle$. Чтобы не отвлекаться на второстепенные усложнения дополнительно потребуем ортогональности этих состояний, то есть, чтобы $\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij}$, где $\{i, j\} = \{1, 2\}$.

Если квантовая система находится в смешанном состоянии, то ее матрица плотности $\hat{\rho}$ по определению выражается через матрицы плотности $\hat{\rho}_1$ и $\hat{\rho}_2$ чистых состояний $|\psi_1\rangle$ и $|\psi_2\rangle$ следующим образом:

$$\hat{\rho} = W_1 \hat{\rho}_1 + W_2 \hat{\rho}_2 = W_1 |\psi_1\rangle \langle \psi_1| + W_2 |\psi_2\rangle \langle \psi_2|.$$

При этом НЕ существует вектора $|\psi\rangle$ такого, что $\hat{\rho} = |\psi\rangle \langle \psi|$. Обычно о такой сумме говорят как о **смеси** чистых состояний $|\psi_1\rangle$ и $|\psi_2\rangle$.

Теперь предположим, что микросистема находится в чистом состоянии, которое является суперпозицией $|\psi_1\rangle$ и $|\psi_2\rangle$, то есть:

$$|\psi\rangle = \sqrt{W_1} |\psi_1\rangle + \sqrt{W_2} e^{i\varphi} |\psi_2\rangle.$$

Вопрос: как связаны между собой в этом случае матрицы плотности $\hat{\rho}$, $\hat{\rho}_1$ и $\hat{\rho}_2$?

Ответ: ясно, что наличие относительной фазы $e^{i\varphi}$ делает эту связь нелинейной. И формула сложения, которая была пригодна для смеси, в случае суперпозиции не работает.

Действуя по определению, получаем:

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| = W_1\hat{\rho}_1 + W_2\hat{\rho}_2 + \sqrt{W_1W_2} (|\psi_2\rangle\langle\psi_1| e^{i\varphi} + |\psi_1\rangle\langle\psi_2| e^{-i\varphi}).$$

Введем новое состояние $|\varphi\rangle$ такое, что:

$$e^{i\varphi} = \mathcal{A} \langle\psi_2|\varphi\rangle\langle\varphi|\psi_1\rangle = \mathcal{A} \langle\psi_2|\hat{P}_\varphi|\psi_1\rangle,$$

где \mathcal{A} – нормировочный множитель, $\hat{P}_\varphi = |\varphi\rangle\langle\varphi|$ – проектор на состояние $|\varphi\rangle$. Условие нормировки

$$\begin{aligned} 1 &= e^{-i\varphi} e^{i\varphi} = |\mathcal{A}|^2 \langle\psi_1|\hat{P}_\varphi|\psi_2\rangle\langle\psi_2|\hat{P}_\varphi|\psi_1\rangle = \\ &= |\mathcal{A}|^2 \langle\psi_1|\hat{P}_\varphi\hat{\rho}_2\hat{P}_\varphi|\psi_1\rangle = |\mathcal{A}|^2 \text{Tr}(\hat{\rho}_1\hat{P}_\varphi\hat{\rho}_2\hat{P}_\varphi) \end{aligned}$$

дает $\mathcal{A} = 1/\sqrt{\text{Tr}(\hat{\rho}_1 \hat{P}_\varphi \hat{\rho}_2 \hat{P}_\varphi)}$. Тогда матрицу плотности $\hat{\rho}$ окончательно можно представить в виде:

$$\hat{\rho} = W_1 \hat{\rho}_1 + W_2 \hat{\rho}_2 + \sqrt{\frac{W_1 W_2}{\text{Tr}(\hat{\rho}_1 \hat{P}_\varphi \hat{\rho}_2 \hat{P}_\varphi)}} (\hat{\rho}_2 \hat{P}_\varphi \hat{\rho}_1 + \hat{\rho}_1 \hat{P}_\varphi \hat{\rho}_2).$$

Легко проверить, что найденная матрица плотности $\hat{\rho}$ удовлетворяет всем свойствам матрицы плотности для чистых состояний, что естественно, поскольку она получена цепочкой тождественных преобразований из матрицы плотности $|\psi\rangle\langle\psi|$ чистого состояния.

Таким образом, матрицы плотности для смеси и суперпозиции отличаются интерференционным слагаемым $\sim \hat{\rho}_2 \hat{P}_\varphi \hat{\rho}_1 + \hat{\rho}_1 \hat{P}_\varphi \hat{\rho}_2$, которое несет информацию об относительной фазе между состояниями $|\psi_1\rangle$ и $|\psi_2\rangle$. В смеси эта информация потеряна.

От матрицы плотности для суперпозиции можно перейти к матрице плотности для смеси, если провести усреднение по всем возможным относительным фазам φ .

Для усреднения по всем фазам заменим проектор \hat{P}_φ на сумму всех возможных проекторов $\sum_k \hat{P}_{\varphi_k}$. Тогда формула для матрицы плотности суперпозиции состояний модифицируется следующим образом:

$$\hat{\rho} = W_1 \hat{\rho}_1 + W_2 \hat{\rho}_2 + \text{const} \left(\hat{\rho}_2 \left(\sum_k \hat{P}_{\varphi_k} \right) \hat{\rho}_1 + \hat{\rho}_1 \left(\sum_k \hat{P}_{\varphi_k} \right) \hat{\rho}_2 \right).$$

Если усреднение происходит по всем возможным фазам, то $\sum_k \hat{P}_{\varphi_k} = \hat{I}_\varphi$. В силу ортогональности состояний $|\psi_1\rangle$ и $|\psi_2\rangle$:

$$\hat{\rho}_2 \left(\sum_k \hat{P}_{\varphi_k} \right) \hat{\rho}_1 = \hat{\rho}_2 \hat{I}_\varphi \hat{\rho}_1 = \hat{\rho}_2 \hat{\rho}_1 = |\psi_2\rangle \langle \psi_2 | \psi_1\rangle \langle \psi_1 | = 0.$$

То есть мы показали, что после усреднения по всем возможным относительным фазам φ между чистыми состояниями $|\psi_1\rangle$ и $|\psi_2\rangle$ суперпозиция состояний переходит в смесь состояний. Такой процесс называется **декогеренцией**. Он играет важную роль в теории измерений.

Альтернатива принципу суперпозиции

В своей книге "Принципы квантовой механики" один из создателей квантовой теории П.Дирак прямо утверждает, что именно принцип суперпозиции отличает квантовую физику от классической. В разделе "Постулаты квантовой механики" была дана формулировка принципа суперпозиции для чистых состояний (Постулат N3). В терминах матрицы плотности формулировка эквивалентного принципа будет не столь проста и элегантна.

Постулат N3': Пусть микросистема описывается матрицей плотности $\hat{\rho}$. И пусть она в результате измерения может переходить в одно из макроскопически различных состояний, каждому из которых можно сопоставить матрицу плотности $\hat{\rho}_i$. Тогда $\hat{\rho}$ можно представить в виде:

$$\hat{\rho} = \sum_i W_i \hat{\rho}_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} \sqrt{\frac{W_i W_j}{\text{Tr}(\hat{\rho}_i \hat{P}_{\varphi_{ij}} \hat{\rho}_j \hat{P}_{\varphi_{ij}})}} \left(\hat{\rho}_j \hat{P}_{\varphi_{ij}} \hat{\rho}_i + \hat{\rho}_i \hat{P}_{\varphi_{ij}} \hat{\rho}_j \right).$$

Коэффициент $1/2$ связан с тем, что в сумме по $\{i, j\}$ мы дважды учитываем одни и те же интерференционные вклады.

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:

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

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

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

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 $|\psi_\ell^{(S)}(t)\rangle$ в уравнение Шредингера и учтем, что $|\psi_{\ell 0}^{(S)}\rangle$ 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:

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

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:

$$\begin{aligned}
 & i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}_\ell^{(S)}(t)}{\partial t} = \\
 & = \left(i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} \right) \hat{\rho}_{\ell 0}^{(S)} \hat{U}^\dagger(t, t_0) + \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}_{\ell 0}^{(S)} \left(i\hbar \frac{\partial \hat{U}^\dagger(t, t_0)}{\partial t} \right) = \\
 & = \hat{H}^{(S)}(t) \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}_{\ell 0}^{(S)} \hat{U}^\dagger(t, t_0) - \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}_{\ell 0}^{(S)} \hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{H}^{(S)}(t) = \\
 & = \hat{H}^{(S)}(t) \hat{\rho}_\ell^{(S)}(t) - \hat{\rho}_\ell^{(S)}(t) \hat{H}^{(S)}(t) = \left[\hat{H}^{(S)}(t), \hat{\rho}_\ell^{(S)}(t) \right].
 \end{aligned}$$

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 $|\psi_\ell^{(S)}(t)\rangle$.

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:

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

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):

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

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:

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

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)

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

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

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

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

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

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

Используем это соотношение пошагово.

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

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

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

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

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

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

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

получается следующее решение:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^{(S,2)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau_2 \left[\hat{H}^{(S)}(\tau_2), \hat{\rho}^{(S1)}(\tau_2) \right] = \\ &= \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t d\tau_2 \int_{t_0}^{\tau_2} d\tau_1 \left[\hat{H}^{(S)}(\tau_2), \left[\hat{H}^{(S)}(\tau_1), \hat{\rho}_0^{(S)} \right] \right]. \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^{(S)}(t) &= \hat{\rho}_0^{(S)} + \sum_{k=1}^{+\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^k \int_{t_0}^t d\tau_k \int_{t_0}^{\tau_k} d\tau_{k-1} \dots \int_{t_0}^{\tau_2} d\tau_1 \cdot \\ &\cdot \left[\hat{H}^{(S)}(\tau_k), \left[\hat{H}^{(S)}(\tau_{k-1}), \dots \left[\hat{H}^{(S)}(\tau_1), \hat{\rho}_0^{(S)} \right] \dots \right] \right]. \end{aligned}$$

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

Тогда среднее значение любой наблюдаемой A можно вычислить по формуле:

$$\begin{aligned}
 \langle A \rangle_\rho &= \text{Tr} \left(\hat{A}^{(S)} \hat{\rho}^{(S)}(t) \right) = \sum_{k=0}^{+\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^k \int_{t_0}^t d\tau_k \int_{t_0}^{\tau_k} d\tau_{k-1} \dots \int_{t_0}^{\tau_2} d\tau_1 \\
 &\quad \text{Tr} \left(\hat{A}^{(S)} \left[\hat{H}^{(S)}(\tau_k), \left[\hat{H}^{(S)}(\tau_{k-1}), \dots \left[\hat{H}^{(S)}(\tau_1), \hat{\rho}_0^{(S)} \right] \dots \right] \right] \right) = \\
 &= \text{Tr} \left(\hat{A}^{(S)} \hat{\rho}_0^{(S)} \right) + \sum_{k=1}^{+\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^k \int_{t_0}^t d\tau_k \int_{t_0}^{\tau_k} d\tau_{k-1} \dots \int_{t_0}^{\tau_1} d\tau_1 \\
 &\quad \text{Tr} \left(\left[\dots \left[\left[\hat{A}^{(S)}, \hat{H}^{(S)}(\tau_k) \right], \hat{H}^{(S)}(\tau_{k-1}) \right], \dots, \hat{H}^{(S)}(\tau_1) \right] \hat{\rho}_0^{(S)} \right).
 \end{aligned}$$

При переходе к последнему равенству мы воспользовались известным операторным тождеством:

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

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

Важный частный случай

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

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

Тогда коммутатор

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

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

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

С учетом этого, можно написать, что:

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

Воспользуемся формулой

$$e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} + \frac{1}{1!} [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots,$$

в которой положим $\hat{B} = \hat{\rho}_0^{(S)}$ и $\hat{A} = -i \frac{t - t_0}{\hbar} \hat{H}^{(S)}$. 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

Продemonстрируем, 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 $\hat{\mathcal{H}}$ имеет вид:

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

$\mu_0 = e\hbar/2m_e c$ – 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:

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

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

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

удовлетворяет следующему уравнению фон Неймана

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

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

Расписываем правую часть уравнения фон Неймана:

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} [\hat{\rho}(t), \hat{V}] &= \frac{i}{\hbar} \frac{\hbar}{2} \Omega_k [\hat{\rho}(t), \sigma_k] = \frac{i}{2} \Omega_k \frac{p_j(t)}{2} [\sigma_j, \sigma_k] = \\ &= \frac{i}{2} \Omega_k \langle S_j \rangle_{\rho} 2i \varepsilon_{jki} \sigma_i = -\sigma_i \varepsilon_{ijk} \langle S_j \rangle_{\rho} \Omega_k = -\sigma_i \left[\langle \vec{S}(t) \rangle_{\rho} \times \vec{\Omega} \right]_i. \end{aligned}$$

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

Тогда уравнение фон Неймана приобретает вид:

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

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

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

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 $t_1 \leq t_2$ 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:

$$\begin{aligned} w(b_{k'}, t_2 | a_{n'}, t_1) &= \text{Tr} \left(\hat{P}_{k'}^{(B)} \hat{\rho}_{n'}^{(A)}(t_2) \right) = \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \text{Tr} \left(\hat{P}_{k'}^{(B)} \hat{U}(t_2, t_1 + \Delta t) \hat{\rho}_{n'}^{(A)}(t_1 + \Delta t) \hat{U}^\dagger(t_2, t_1 + \Delta t) \right) = \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\text{Tr} \left(\hat{P}_{k'}^{(B)} \hat{U}(t_2, t_1 + \Delta t) \hat{P}_{n'}^{(A)} \hat{\rho}(t_1 - \Delta t) \hat{P}_{n'}^{(A)} \hat{U}^\dagger(t_2, t_1 + \Delta t) \right)}{\text{Tr} \left(\hat{P}_{n'}^{(A)} \hat{\rho}(t_1 - \Delta t) \right)}. \end{aligned}$$

Обратите внимание на разные знаки при Δt в матрицах $\hat{\rho}$ и $\hat{\rho}_{n'}^{(A)}$, 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 преодолает 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:

$$\begin{aligned}
 w(\Delta t) &= \text{Tr} \left(\hat{\rho}_1^{(S)} \hat{\rho}^{(S)}(\Delta t) \right) = \text{Tr} \left(\hat{\rho}_1^{(S)} e^{-i \Delta t \hat{H}^{(S)}/\hbar} \hat{\rho}_1^{(S)} e^{i \Delta t \hat{H}^{(S)}/\hbar} \right) = \\
 &= \left| \left\langle \psi_1^{(S)} \left| e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^{(S)} \Delta t} \right| \psi_1^{(S)} \right\rangle \right|^2 = \\
 &= \left| \left\langle \psi_1^{(S)} \left| \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \hat{H}^{(S)} \Delta t + \frac{(-i)^2}{\hbar^2} \hat{H}^{(S)2} \Delta t^2 + \dots \right| \psi_1^{(S)} \right\rangle \right|^2 \approx \\
 &\approx \left| 1 - \frac{i \Delta t}{\hbar} \left\langle \psi_1^{(S)} \left| \hat{H}^{(S)} \right| \psi_1^{(S)} \right\rangle - \frac{\Delta t^2}{2 \hbar^2} \left\langle \psi_1^{(S)} \left| \hat{H}^{(S)2} \right| \psi_1^{(S)} \right\rangle \right|^2.
 \end{aligned}$$

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

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

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

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

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 :

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

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

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left(\hat{\rho}^{(s)} \hat{B}^{(s)} \right) &= \frac{d}{dt} \text{Tr} \left(\hat{\rho}^{(s)} \hat{A}^{(s)} \right) = \text{Tr} \left(\frac{\partial \hat{\rho}^{(s)}}{\partial t} \hat{A}^{(s)} + \hat{\rho}^{(s)} \frac{\partial \hat{A}^{(s)}}{\partial t} \right) = \\ &= \text{Tr} \left(\frac{1}{i\hbar} \left[\hat{H}^{(s)}, \hat{\rho}^{(s)} \right] \hat{A}^{(s)} + \hat{\rho}^{(s)} \frac{\partial \hat{A}^{(s)}}{\partial t} \right). \end{aligned}$$

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

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

Тогда:

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

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

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

в координатном представлении. Начнем с одномерного случая:

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

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:

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

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

$$\begin{aligned}\langle x | \hat{H} \hat{\rho}(t) | x' \rangle &= \langle x | \hat{H} \hat{1}_{\tilde{x}} \hat{\rho}(t) | x' \rangle = \int d\tilde{x} \langle x | \hat{H} | \tilde{x} \rangle \langle \tilde{x} | \hat{\rho}(t) | x' \rangle = \\ &= \int d\tilde{x} \delta(x - \tilde{x}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x, t) \right) \rho(\tilde{x}, x', t) = \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x, t) \right) \rho(x, x', t).\end{aligned}$$

Аналогично для второго матричного элемента находим:

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

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

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

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:

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

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:

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

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:

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

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

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

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

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

Рассмотрим пример. Для монохроматической волны функция

$$A(p) = \frac{\sqrt{2\pi\hbar}}{2s+1} \delta(p - p_0). \text{ Тогда}$$

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

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

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

Часть 5

ОПИСАНИЕ ОТКРЫТЫХ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ

Распад нестабильной микросистемы

Выше мы получили уравнение фон Неймана для замкнутых квантовых систем. Теперь напишем аналогичные уравнения для открытых квантовых систем. Простейшая ситуация – в системе происходит радиоактивный распад. В случае радиоактивного распада экспериментально установлено, что скорость распада пропорциональна числу нераспавшихся частиц, то есть:

$$\frac{dN(t)}{dt} = -\frac{N(t)}{\tau}.$$

Решение этого уравнения с начальным условием $N(t=0) = N_0$ имеет вид

$$N(t) = N_0 e^{-t/\tau} \equiv N_0 e^{-\Gamma t/\hbar}$$

и называется **законом радиоактивного распада**. Величина τ – **время жизни** нестабильной системы, Γ – **ширина распада**. В рассматриваемом приближении ширина распада и время жизни предполагаются независимыми от времени. По определению

$$\Gamma \tau = \hbar.$$

Согласно частотному определению вероятности при $N(t) \gg 1$ вероятность распада есть

$$w(t) = \frac{N(t)}{N_0} = e^{-\Gamma t/\hbar}.$$

С точки зрения квантовой механики $w(t) = |\psi(t)|^2$, где $\psi(t)$ – некоторая волновая функция. Если считать, что распадающиеся частицы являются свободными, то такую (для простоты – монохроматическую) волновую функцию можно написать как:

$$\psi(t) \sim \chi_{s s_z} e^{-\frac{i}{\hbar} (E_p t - p x) - \frac{\Gamma t}{2\hbar}} = \chi_{s s_z} e^{-\frac{i}{\hbar} \left(\left(E_p - \frac{i\Gamma}{2} \right) t - p x \right)}.$$

Такая волновая функция не может быть нормирована на единицу. И она является решением уравнения с неэрмитовым гамильтонианом

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{i}{2} \hat{\Gamma}.$$

Тут нет противоречия с квантовой механикой, поскольку наблюдаемыми по-отдельности являются энергия частицы E_p и ширина распада Γ (время жизни τ). Поэтому $\hat{H}_0 = \hat{H}_0^\dagger$ и $\hat{\Gamma} = \hat{\Gamma}^\dagger$.

Квантовое уравнение Лиувилля для открытых систем

Гамильтониан $\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{i}{2} \hat{\Gamma}$ представляет собой простейший пример гамильтониана открытой квантовой системы. Найдем уравнение фон Неймана для такого гамильтониана.

Начнем с уравнения для матрицы плотности **чистого состояния** в представлении Шредингера $\hat{\rho}_\ell^{(S)}(t) = |\psi_\ell^{(S)}(t)\rangle \langle \psi_\ell^{(S)}(t)|$. Вектор состояния $|\psi_\ell^{(S)}(t)\rangle$ удовлетворяет нестационарному уравнению Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_\ell^{(S)}(t)\rangle = \hat{H}^{(S)} |\psi_\ell^{(S)}(t)\rangle = \left(\hat{H}_0^{(S)} - \frac{i}{2} \hat{\Gamma}^{(S)} \right) |\psi_\ell^{(S)}(t)\rangle,$$

а вектор состояния $\langle \psi_\ell^{(S)}(t)|$ – уравнению Шредингера:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi_\ell^{(S)}(t)| = \langle \psi_\ell^{(S)}(t)| \hat{H}^{(S)\dagger} = \langle \psi_\ell^{(S)}(t)| \left(\hat{H}_0^{(S)} + \frac{i}{2} \hat{\Gamma}^{(S)} \right).$$

Тогда решения этих уравнений можно записать при помощи оператора $\hat{U}(t, t_0)$:

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

Поскольку теперь вектора состояния не нормированы на единицу, то оператор $\hat{U}(t, t_0)$ НЕ унитарен.

Операторы $\hat{U}(t, t_0)$ и $\hat{U}^\dagger(t, t_0)$ удовлетворяют уравнениям:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} = \left(\hat{H}_0^{(S)} - \frac{i}{2} \hat{\Gamma}^{(S)} \right) \hat{U}(t, t_0),$$

и

$$-i\hbar \frac{\partial \hat{U}^\dagger(t, t_0)}{\partial t} = \hat{U}^\dagger(t, t_0) \left(\hat{H}_0^{(S)} + \frac{i}{2} \hat{\Gamma}^{(S)} \right).$$

Теперь найдем, какому уравнению подчиняется матрица $\hat{\rho}_\ell^{(S)}(t)$.

Продельвая выкладки, полностью аналогичные выкладкам раздела "Эволюция матрицы плотности во времени...", получаем:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}_\ell^{(S)}(t)}{\partial t} = \hat{H}^{(S)} \hat{\rho}_\ell^{(S)}(t) - \hat{\rho}_\ell^{(S)}(t) \hat{H}^{\dagger(S)} = [\hat{H}_0^{(S)}, \hat{\rho}_\ell^{(S)}(t)] - \frac{i}{2} \{ \hat{\Gamma}^{(S)}, \hat{\rho}_\ell^{(S)}(t) \}.$$

Учтя, что $\hat{\rho}^{(S)}(t) = \sum_\ell W_\ell \hat{\rho}_\ell^{(S)}(t)$, легко находим уравнение точно такого же вида для матрицы $\hat{\rho}^{(S)}(t)$:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}^{(S)}(t)}{\partial t} = [\hat{H}_0^{(S)}, \hat{\rho}^{(S)}(t)] - \frac{i}{2} \{ \hat{\Gamma}^{(S)}, \hat{\rho}^{(S)}(t) \}.$$

Пример: уравнение Блоха с затуханием. В простейшем случае можно подобрать оператор $\hat{\Gamma}$ так, что $\{ \hat{\Gamma}, \hat{\rho} \} = 2\gamma \left(\langle \vec{S}(t) \rangle_\rho \vec{\sigma} \right)$. Тогда уравнение Блоха модифицируется следующим образом:

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

Эволюция матрицы плотности открытых квантовых систем. Общий подход

Пусть некоторая квантовая система описывается матрицей плотности $\hat{\rho}$ и состоит из двух подсистем "A" и "B". Гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{H}_B + \hat{V}_{AB},$$

где $\hat{H}_A = \hat{H}_A^\dagger$ и $\hat{H}_B = \hat{H}_B^\dagger$ – гамильтонианы подсистем "A" и "B" соответственно, $\hat{V}_{AB} \neq \hat{V}_{AB}^\dagger$ – гамильтониан взаимодействия. Матрица плотности системы $\hat{\rho}$ подчиняется уравнению фон Неймана:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}^{(s)}}{\partial t} = \hat{H}^{(s)} \hat{\rho}^{(s)} - \hat{\rho}^{(s)} \hat{H}^\dagger(s).$$

Вопрос: какому уравнению подчиняется матрица плотности $\hat{\rho}_A$ подсистемы "A"?

Ответ: прежде всего ясно, что "A" – это **открытая** система. Поэтому уравнение, которое будет получено для матрицы плотности $\hat{\rho}_A$, станет обобщением уравнения для матрицы плотности распадающейся частицы, которое было получено выше.

Напомним, что $\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B \hat{\rho}$. Тогда:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}_A^{(S)}}{\partial t} &= i\hbar \frac{\partial \text{Tr}_B \hat{\rho}^{(S)}}{\partial t} = i\hbar \text{Tr}_B \left(\frac{\partial \hat{\rho}^{(S)}}{\partial t} \right) = \\
 &= \text{Tr}_B \left(\hat{H}^{(S)} \hat{\rho}^{(S)} - \hat{\rho}^{(S)} \hat{H}^{\dagger(S)} \right) = \text{Tr}_B \left(\hat{H}_A^{(S)} \hat{\rho}^{(S)} - \hat{\rho}^{(S)} \hat{H}_A^{(S)} \right) + \\
 &+ \text{Tr}_B \left(\hat{H}_B^{(S)} \hat{\rho}^{(S)} - \hat{\rho}^{(S)} \hat{H}_B^{(S)} \right) + \text{Tr}_B \left(\hat{V}_{AB}^{(S)} \hat{\rho}^{(S)} - \hat{\rho}^{(S)} \hat{V}_{AB}^{\dagger(S)} \right).
 \end{aligned}$$

Разберемся с первым слагаемым в правой части. Имеем:

$$\begin{aligned}
 \text{Tr}_B \left(\hat{H}_A^{(S)} \hat{\rho}^{(S)} - \hat{\rho}^{(S)} \hat{H}_A^{(S)} \right) &= \hat{H}_A^{(S)} (\text{Tr}_B \hat{\rho}^{(S)}) - (\text{Tr}_B \hat{\rho}^{(S)}) \hat{H}_A^{(S)} = \\
 &= \hat{H}_A^{(S)} \hat{\rho}_A^{(S)} - \hat{\rho}_A^{(S)} \hat{H}_A^{(S)} = \left[\hat{H}_A^{(S)}, \hat{\rho}_A^{(S)} \right].
 \end{aligned}$$

При выводе мы использовали тот факт, что гамильтониан $\hat{H}_A^{(S)}$ не зависит от переменных системы "B".

Теперь рассмотрим второе слагаемое. Воспользуемся определением частичного следа и условием $\hat{H}_B |b\rangle = E_b |b\rangle$. Тогда:

$$\text{Tr}_B \left(\hat{H}_B^{(S)} \hat{\rho}^{(S)} - \hat{\rho}^{(S)} \hat{H}_B^{(S)} \right) = \int db \langle b | \hat{H}_B^{(S)} \hat{\rho}^{(S)} - \hat{\rho}^{(S)} \hat{H}_B^{(S)} | b \rangle =$$

$$= \int db E_b \langle b | \hat{\rho}^{(S)} - \hat{\rho}^{(S)} | b \rangle E_b = 0.$$

Поэтому окончательно для матрицы плотности подсистемы "A" находим следующее уравнение фон Неймана:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}_A^{(S)}}{\partial t} = [\hat{H}_A^{(S)}, \hat{\rho}_A^{(S)}] + \text{Tr}_B \left(\hat{V}_{AB}^{(S)} \hat{\rho}^{(S)} - \hat{\rho}^{(S)} \hat{V}_{AB}^{\dagger(S)} \right).$$

В частном случае, когда $\hat{V}_{AB}^{(S)} = \int db' |b'\rangle \frac{i}{2} \Gamma^{(S)} \langle b'|$, воспроизводим уравнение для матрицы плотности радиоактивно распадающейся частицы, которое было получено в предыдущем разделе.

Заметим, что взяв след по переменным подсистемы "B" в последнем слагаемом, мы сделали уравнение для матрицы плотности $\hat{\rho}_A$ подсистемы "A" формально необратимым.

Операторы Крауса и представление Крауса для матрицы плотности открытой квантовой системы

Рассмотрим удобную запись для эволюции матрицы плотности открытой системы. Пусть квантовая система состоит из двух подсистем "A" (\equiv частица) и "B" (\equiv термостат или резервуар). Если известен полный гамильтониан системы $\hat{H}^{(S)}$, то можно построить и оператор эволюции $\hat{U}(t, t_0)$.

Пусть в начальный момент времени $t = t_0$ подсистемы "A" и "B" не взаимодействовали друг с другом. Подсистема "A" находилась в смешанном состоянии $\hat{\rho}_{A0}$, а подсистема "B" в чистом (для простоты!) состоянии $\hat{\rho}_{B0} = |in^{(B)}\rangle\langle in^{(B)}|$.

Тогда матрица плотности подсистемы "A" в представлении Шредингера (S) в произвольный момент времени t будет иметь вид:

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_A^{(S)}(t) &= \text{Tr}_B \left(\hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}_{A0} \hat{\rho}_{B0} \hat{U}^\dagger(t, t_0) \right) = \\ &= \text{Tr}_B \left(\hat{U}(t, t_0) |in^{(B)}\rangle \hat{\rho}_{A0} \langle in^{(B)}| \hat{U}^\dagger(t, t_0) \right).\end{aligned}$$

Введем для операторов подсистемы "B" базис $\left| f_{k'}^{(B)} \right\rangle$ собственных векторов некоторой наблюдаемой F_B из этой подсистемы. Выбор базиса определяется лишь удобством дальнейших вычислений. Тогда:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_A^{(S)}(t) &= \sum_{k'} \left\langle f_{k'}^{(B)} \left| \hat{U}(t, t_0) \right| in^{(B)} \right\rangle \hat{\rho}_{A0} \left\langle in^{(B)} \left| \hat{U}^\dagger(t, t_0) \right| f_{k'}^{(B)} \right\rangle = \\ &= \sum_{k'} \hat{M}_{k'}(t) \hat{\rho}_{A0} \hat{M}_{k'}^\dagger(t). \end{aligned}$$

Такая форма записи эволюции матрицы плотности открытой квантовой подсистемы называется **представлением Крауса** или **представлением в виде операторной суммы**, а входящие в нее операторы $\hat{M}_{k'}(t) = \left\langle f_{k'}^{(B)} \left| \hat{U}(t, t_0) \right| in^{(B)} \right\rangle$ – **операторами Крауса**.

Условие нормировки операторов Крауса (для систем, описываемых **эрмитовым** гамильтонианом $\hat{H}^{(S)} \equiv$ **унитарная эволюция**):

$$1 = \text{Tr}_A \hat{\rho}_A^{(S)}(t) = \sum_{k'} \hat{M}_{k'}^\dagger(t) \hat{M}_{k'}(t).$$

Хотя подсистема "B" может быть достаточно сложной, а ее эволюция – нетривиальной, но часто удается найти простые выражения для операторов $\hat{M}_{k'}$, чтобы описать влияние подсистемы "B" на эволюцию подсистемы "A".

Для неэрмитовых гамильтонианов и связанной с ними неунитарной эволюции (например, в случае рассмотренного выше радиоактивного распада) $\text{Tr}_A \hat{\rho}_A^{(S)}(t) \leq 1$. Соответствующим образом изменяется и условие нормировки операторов Крауса.

Представление Крауса является обобщением проекционного постулата Дирака-фон Неймана (Постулата N4'). Действительно, если в момент времени t произвести измерение спектра наблюдаемой F_B , не интересуясь конечным результатом измерения (неселективное измерение), то после этого матрица плотности подсистемы "A" примет вид:

$$\hat{\rho}_A^{(S)}(t) = \sum_{k'} \text{Tr}_B \left(\frac{\hat{P}_{k'}^{(B)} \hat{\rho}(t) \hat{P}_{k'}^{(B)}}{\text{Tr} \left(\hat{P}_{k'}^{(B)} \hat{\rho}(t) \right)} \right),$$

где $\hat{P}_{k'}^{(B)} = \left| f_{k'}^{(B)} \right\rangle \left\langle f_{k'}^{(B)} \right|$. Очевидно, что это частный случай представления Крауса, когда $\hat{\rho}(t=0) = \hat{\rho}_{A0} \hat{\rho}_{B0}$.

Уравнение Линдблада

В параграфе "Эволюция матрицы плотности открытых квантовых систем. Общий подход" уже было найдено уравнение для эволюции матрицы плотности $\hat{\rho}_A^{(S)}(t)$. Однако, чтобы получить эволюцию матрицы плотности подсистемы "A" в таком подходе необходимо знать явную зависимость от времени матрицы плотности $\hat{\rho}^{(S)}(t)$ всей квантовой системы, что делает практически бессмысленным написание подобных уравнений эволюции для каждой из подсистем по-отдельности.

При помощи представления Крауса появляется возможность написать уравнение эволюции для матрицы плотности $\hat{\rho}_A^{(S)}(t)$ БЕЗ использования явного вида матрицы плотности $\hat{\rho}(t)$. Для этого применим разложение Крауса к двум моментам времени t и $t + \Delta t$. Имеем:

$$\sum_{k'} \hat{M}_{k'}(t + \Delta t) \hat{\rho}_A^{(S)}(t) \hat{M}_{k'}^\dagger(t + \Delta t) = \hat{\rho}_A^{(S)}(t + \Delta t) \approx \hat{\rho}_A^{(S)}(t) + \Delta \hat{\rho}_A^{(S)}(t).$$

Выберем базис в подсистеме "B" таким образом, чтобы оператор \hat{M}_0 мало отличался от единичного оператора $\hat{1}$. То есть, пусть оператор $\hat{M}_0 = \hat{1} + \Delta \hat{M}_0$. Произвольный оператор можно записать как сумму эрмитового и антиэрмитового операторов. Используем этот математический факт для нахождения самого общего вида оператора $\Delta \hat{M}_0$.

Кроме того, в левой части равенства оставим только линейные по Δt слагаемые. Из всего вышесказанного следует, что в самом общем виде операторы Крауса можно написать следующим образом:

$$\hat{M}_0 = \hat{1} + \left(\hat{L}_0 - \frac{i\hat{H}_A}{\hbar} \right) \Delta t;$$

$$\hat{M}_{k'} = \hat{L}_{k'} \sqrt{\Delta t} \quad \text{при} \quad k' \neq 0,$$

где $\hat{L}_0^\dagger = \hat{L}_0$ и $\hat{H}_A^\dagger = \hat{H}_A$ – два эрмитовых оператора. Заметим, что операторы $\hat{L}_{k'}$ при $k' \neq 0$ не обязательно должны быть эрмитовыми. Тогда в линейном приближении по Δt имеем:

$$\hat{M}_0 \hat{\rho}_A^{(S)}(t) \hat{M}_0^\dagger \approx \hat{\rho}_A^{(S)}(t) + \left(\left\{ \hat{L}_0, \hat{\rho}_A^{(S)}(t) \right\} - \frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}_A, \hat{\rho}_A^{(S)}(t) \right] \right) \Delta t$$

и

$$\hat{M}_{k'} \hat{\rho}_A^{(S)}(t) \hat{M}_{k'}^\dagger = \hat{L}_{k'} \hat{\rho}_A^{(S)}(t) \hat{L}_{k'}^\dagger \Delta t.$$

Операторы $\hat{L}_{k'}$ называются **операторами Линдблада**.

Подставляем выражения для операторов Линдблада в левую часть разложения Крауса и получаем:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta \hat{\rho}_A^{(S)}(t)}{\Delta t} &= \frac{1}{\Delta t} \left(\sum_{k'} \hat{M}_{k'} \hat{\rho}_A^{(S)}(t) \hat{M}_{k'}^\dagger - \hat{\rho}_A^{(S)}(t) \right) \approx \\ &\approx \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{H}_A, \hat{\rho}_A^{(S)}(t) \right] + \left\{ \hat{L}_0, \hat{\rho}_A^{(S)}(t) \right\} + \sum_{k' \neq 0} \hat{L}_{k'} \hat{\rho}_A^{(S)}(t) \hat{L}_{k'}^\dagger. \end{aligned}$$

Из условий нормировки $\text{Tr} \hat{\rho}_A^{(S)}(t + \Delta t) = 1$ и $\text{Tr} \hat{\rho}_A^{(S)}(t) = 1$ следует, что

$$0 = \text{Tr} \frac{\Delta \hat{\rho}_A^{(S)}(t)}{\Delta t} = \text{Tr} \left(\left\{ \hat{L}_0, \hat{\rho}_A^{(S)}(t) \right\} + \sum_{k' \neq 0} \hat{L}_{k'} \hat{\rho}_A^{(S)}(t) \hat{L}_{k'}^\dagger \right).$$

Мы сразу учли, что след от коммутатора двух операторов равен нулю. Используя цикличность следа, получаем

$$\text{Tr} \left(2 \hat{L}_0, \hat{\rho}_A^{(S)}(t) + \sum_{k' \neq 0} \hat{L}_{k'}^\dagger \hat{L}_{k'} \hat{\rho}_A^{(S)}(t) \right) = 0,$$

откуда находим связь между \hat{L}_0 и $\hat{L}_{k'}$ в виде:

$$\hat{L}_0 = -\frac{1}{2} \sum_{k' \neq 0} \hat{L}_{k'}^\dagger \hat{L}_{k'}$$

Используя это условие и заменяя приращения Δ на дифференциалы, приходим к следующему уравнению эволюции для матрицы плотности подсистемы "A":

$$\frac{d\hat{\rho}_A^{(S)}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_A, \hat{\rho}_A^{(S)}(t)] + \sum_{k' \neq 0} \left(\hat{L}_{k'} \hat{\rho}_A^{(S)}(t) \hat{L}_{k'}^\dagger - \frac{1}{2} \{ \hat{L}_{k'}^\dagger \hat{L}_{k'}, \hat{\rho}_A^{(S)}(t) \} \right).$$

Сравнивая полученное уравнение с аналогичным уравнением из параграфа "Эволюция матрицы плотности открытых квантовых систем. Общий подход", видим, что оператор \hat{H}_A следует отождествить с гамильтонианом подсистемы "A", записанным в представлении Шредингера.

Запишем данное уравнение в более симметричной форме. Для этого воспользуемся операторным тождеством:

$$\hat{A} \hat{B} \hat{A}^\dagger - \frac{1}{2} \{ \hat{A}^\dagger \hat{A}, \hat{B} \} = \frac{1}{2} \left([\hat{A} \hat{B}, \hat{A}^\dagger] + [\hat{A}, \hat{B} \hat{A}^\dagger] \right).$$

Тогда

$$\frac{d\hat{\rho}_A^{(S)}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_A^{(S)}, \hat{\rho}_A^{(S)}(t)] + \frac{1}{2} \sum_k \left([\hat{L}_k \hat{\rho}_A^{(S)}(t), \hat{L}_k^\dagger] + [\hat{L}_k, \hat{\rho}_A^{(S)}(t) \hat{L}_k^\dagger] \right).$$

Найденное уравнение называется **уравнением Линдблада**. Оно является наиболее общим уравнением, описывающим **неунитарную эволюцию матрицы плотности** открытой квантовой подсистемы. Часто данное уравнение называют **квантовым марковским уравнением**. В окончательной записи мы специально заменили k' на k , чтобы подчеркнуть, что индексы, которыми нумеруются операторы Линдблада \hat{L}_k , достаточно условны.

Впервые уравнение Линдблада было, естественно, получено в работе **G.Lindblad, "On the generators of quantum dynamical semigroups"**, *Commun. Math. Phys.* 48, pp. 119 –130 (1976) с использованием аппарата квантовой теории групп. Ясный физический вывод уравнения был предложен в статье **V.Gorini, A.Kossakowski, E. C. G. Sudarshan, "Completely positive dynamical semigroups of N-level systems"**, *J. Math. Phys.* 17, pp.821-825 (1976).

Как работает уравнением Линдблада. Простой пример

Пусть "A" – двухуровневая квантовая система, имеющая основное состояние $|0^{(A)}\rangle$ и возбужденное состояние $|1^{(A)}\rangle$, которое за счет радиоактивного распада переходит в основное состояние. Выше было показано, что подобный процесс описывается неэрмитовым гамильтонианом и неунитарным оператором эволюции, не сохраняющим норму состояния. Для описания перехода $|1^{(A)}\rangle \rightarrow |0^{(A)}\rangle$ необходимо написать единственный оператор Линдблада

$$\hat{L} \sim |0^{(A)}\rangle \langle 1^{(A)}| = \sqrt{\frac{\Gamma}{\hbar}} |0^{(A)}\rangle \langle 1^{(A)}|.$$

Поскольку размерность операторов Линдблада равна $\sqrt{(\text{сек}^{-1})}$, то размерность параметра Γ совпадает с размерностью энергии. Состояния $|0^{(A)}\rangle$ и $|1^{(A)}\rangle$ ортогональны друг другу. Тогда легко проверить, что:

$$\hat{L}^\dagger \hat{L} = \frac{\Gamma}{\hbar} |1^{(A)}\rangle \langle 1^{(A)}| \quad \text{и} \quad \hat{L} \hat{L}^\dagger = \frac{\Gamma}{\hbar} |0^{(A)}\rangle \langle 0^{(A)}|.$$

Невозмущенный гамильтониан двухуровневой системы можно написать в виде:

$$\hat{H}_A^{(S)} = E_0 |0^{(A)}\rangle \langle 0^{(A)}| + E_1 |1^{(A)}\rangle \langle 1^{(A)}|.$$

Матрица плотности $\hat{\rho}_A^{(S)}(t)$ в базисе $|0^{(A)}\rangle$ и $|1^{(A)}\rangle$ в самой общей форме запишется как:

$$\hat{\rho}_A^{(S)} = \rho_{00} |0^{(A)}\rangle \langle 0^{(A)}| + \rho_{11} |1^{(A)}\rangle \langle 1^{(A)}| + \rho_{01} |0^{(A)}\rangle \langle 1^{(A)}| + \rho_{10} |1^{(A)}\rangle \langle 0^{(A)}|.$$

Тогда

$$\frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_A^{(S)}, \hat{\rho}_A^{(S)}(t)] = i\omega_{10} \rho_{01} |0^{(A)}\rangle \langle 1^{(A)}| - i\omega_{10} \rho_{10} |1^{(A)}\rangle \langle 0^{(A)}|,$$

где $\omega_{10} = (E_1 - E_0)/\hbar$.

Для дальнейших вычислений удобно ввести базис

$$|0^{(A)}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1^{(A)}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

и перейти к матричному представлению.

С учетом всего вышесказанного, уравнение Линдблада в матричной форму будет иметь вид:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \rho_{00}(t) & \rho_{01}(t) \\ \rho_{10}(t) & \rho_{11}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\Gamma}{\hbar} \rho_{11}(t) & (i\omega_{01} - \frac{\Gamma}{2\hbar}) \rho_{01}(t) \\ - (i\omega_{01} + \frac{\Gamma}{2\hbar}) \rho_{10}(t) & - \frac{\Gamma}{\hbar} \rho_{11}(t) \end{pmatrix}.$$

Решение уравнения:

$$\begin{pmatrix} \rho_{00}(t) & \rho_{01}(t) \\ \rho_{10}(t) & \rho_{11}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - \rho_{11}(0)e^{-\Gamma t/\hbar} & \rho_{01}(0)e^{i\omega_{01}t}e^{-\Gamma t/2\hbar} \\ \rho_{10}(0)e^{-i\omega_{01}t}e^{-\Gamma t/2\hbar} & \rho_{11}(0)e^{-\Gamma t/\hbar} \end{pmatrix}.$$

Легко видеть, что число частиц в возбужденном состоянии (которое, очевидно, $\sim \rho_{11}(t)$) убывает согласно закону радиоактивного распада. Недиагональные матричные элементы тоже экспоненциально убывают со временем, но медленнее, чем $\rho_{11}(t)$. Это еще одно проявление явления **декогеренции**, которое с другой точки зрения уже обсуждалось в параграфе "**Суперпозиция или смесь!**".

Уравнением Линдблада для наблюдаемых в представлении Гейзенберга

В параграфе "Эволюция матрицы плотности во времени. Квантовое уравнение Лиувилля (уравнение фон Неймана)", было показано, что среднее значение наблюдаемой F_A , которая относится к подсистеме "A", можно записать как в представлении Шредингера, так и в представлении Гейзенберга:

$$\langle F_A \rangle_{\rho_A} = \text{Tr} \left(\hat{\rho}_A^{(S)}(t) \hat{F}_A^{(S)} \right) = \text{Tr} \left(\hat{\rho}_{A0} \hat{F}_A^{(H)}(t) \right).$$

Отсюда с учетом явного вида уравнением Линдблада для матрицы плотности $\hat{\rho}_A^{(S)}(t)$ в представлении Шредингера, получаем **уравнение Линдблада для эволюции оператора $\hat{F}_A(t)$ наблюдаемой F_A** в представлении Гейзенберга:

$$\frac{d \hat{F}_A^{(H)}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{H}_A^{(H)}, \hat{F}_A^{(H)}(t) \right] + \frac{1}{2} \sum_k \left(\left[\hat{L}_k \hat{F}_A^{(H)}(t), \hat{L}_k^\dagger \right] + \left[\hat{L}_k, \hat{F}_A^{(H)}(t) \hat{L}_k^\dagger \right] \right),$$

которое описывает неунитарную эволюцию наблюдаемой в открытой квантовой системе.

Релаксационное уравнение для частицы в термостате

Рассмотрим часто используемый приближенный подход, который позволяет не имея детального знания о матрицах плотности $\hat{\rho}(t)$ и $\hat{\rho}_B(t)$, получить нетривиальную информацию об эволюции матрицы плотности $\hat{\rho}_A(t)$.

Пусть микрочастица (подсистема "A") находится в термостате (подсистема "B"). В представлении взаимодействия ((I)) уравнение для вектора состояния $|\psi_\ell^{(I)}(t)\rangle$ принимает вид:

$$i\hbar \frac{\partial |\psi_\ell^{(I)}(t)\rangle}{\partial t} = \hat{V}_{AB}^{(I)} |\psi_\ell^{(I)}(t)\rangle.$$

Решение этого уравнения по аналогии с решением для нестационарного уравнения Шредингера можно представить при помощи оператора эволюции: $|\psi_\ell^{(I)}(t)\rangle = \hat{S}(t, t_0) |\psi_{\ell_0}^{(I)}\rangle$. Если для простоты дополнительно предположить, что оператор \hat{V}_{AB} – эрмитов, то уравнение для вектора $\langle \psi_\ell^{(I)}(t) |$ запишется следующим образом:

$$i\hbar \frac{\partial \langle \psi_\ell^{(I)}(t) |}{\partial t} = \langle \psi_\ell^{(I)}(t) | \hat{V}_{AB}^{(I)}.$$

с решением $\langle \psi_\ell^{(I)}(t) | = \langle \psi_{\ell_0}^{(I)} | \hat{S}^\dagger(t, t_0)$. Оператор $\hat{S}(t, t_0)$ в рассматриваемом приближении должен быть унитарным.

Операторы $\hat{S}(t, t_0)$ и $\hat{S}^\dagger(t, t_0)$ удовлетворяют уравнениям:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{S}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{V}_{AB}^{(I)} \hat{S}(t, t_0) \quad \text{и} \quad -i\hbar \frac{\partial \hat{S}^\dagger(t, t_0)}{\partial t} = \hat{S}^\dagger(t, t_0) \hat{V}_{AB}^{(I)}.$$

Тогда легко показать, что уравнения для матрицы плотности чистого $\hat{\rho}_\ell^{(I)}$ и смешанного $\hat{\rho}^{(I)}$ состояний очень похожи на уравнения фон Неймана и имеют вид:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}_\ell^{(I)}(t)}{\partial t} = [\hat{V}_{AB}^{(I)}(t), \hat{\rho}_\ell^{(I)}(t)],$$

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}^{(I)}(t)}{\partial t} = [\hat{V}_{AB}^{(I)}(t), \hat{\rho}^{(I)}(t)]$$

соответственно. Принимая во внимание начальное условие для матрицы плотности $\hat{\rho}^{(I)}(t = t_0) = \hat{\rho}^{(S)}(t = t_0) = \hat{\rho}_0$, последнее уравнение можно записать в эквивалентной интегральной форме:

$$\hat{\rho}^{(I)}(t) = \hat{\rho}_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau [\hat{V}_{AB}^{(I)}(\tau), \hat{\rho}^{(I)}(\tau)].$$

Формально подставим интегральное уравнение в дифференциальное и получим:

$$\frac{\partial \hat{\rho}^{(l)}(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \left[\hat{V}_{AB}^{(l)}(t), \hat{\rho}_0 \right] + \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t d\tau \left[\hat{V}_{AB}^{(l)}(t), \left[\hat{V}_{AB}^{(l)}(\tau), \hat{\rho}^{(l)}(\tau) \right] \right].$$

Предположим, что в моменты времени $t < t_0$ микросистема "A" и термостат "B" не взаимодействовали между собой. Тогда матрица плотности $\hat{\rho}_0$ факторизуется, то есть: $\hat{\rho}_0 = \hat{\rho}_{A0} \hat{\rho}_{B0}$. Когда $t \geq t_0$, термостат продолжает оставаться в состоянии термодинамического равновесия при температуре T . Поэтому с хорошей степенью точности можно заменить полную матрицу плотности $\hat{\rho}^{(l)}(t)$ ее факторизационным приближением, то есть: $\hat{\rho}^{(l)}(t) \approx \hat{\rho}_A^{(l)}(t) \hat{\rho}_{B0}$. С учетом сделанной замены, для матрицы плотности подсистемы "A" получаем следующее уравнение

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\rho}_A^{(l)}(t)}{\partial t} &= \text{Tr}_B \left(\frac{\partial \hat{\rho}^{(l)}(t)}{\partial t} \right) = -\frac{i}{\hbar} \text{Tr}_B \left(\left[\hat{V}_{AB}^{(l)}(t), \hat{\rho}_{A0} \hat{\rho}_{B0} \right] \right) + \\ &+ \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t d\tau \text{Tr}_B \left[\hat{V}_{AB}^{(l)}(t), \left[\hat{V}_{AB}^{(l)}(\tau), \hat{\rho}_A^{(l)}(\tau) \hat{\rho}_{B0} \right] \right], \end{aligned}$$

которое НЕ зависит от точной матрицы плотности $\hat{\rho}_B^{(l)}(t)$ и описывает необратимые процессы в подсистеме "A".

Часть 6

ОСНОВЫ КЛАССИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ИНФОРМАЦИИ

Классическая энтропия. Биты и наты

Классические компьютеры работают в **двоичной логике** "1" и "0" (есть напряжение в ячейке или нет). В этом случае считают, что каждая ячейка содержит один **бит** информации. Регистр из N ячеек, очевидно, содержит N бит информации. С их помощью можно записать 2^N сообщений. Если сообщения равновероятны, то вероятность каждого сообщения $w_N = 1/2^N$. Введем информационную энтропию по формуле: $H = -\log_2 w_N$. Для нашего простейшего случая $H = N$. На самом деле, есть сообщения более вероятные и менее вероятные. Поэтому Клод Шеннон обобщил **информационную энтропию** следующим образом:

$$H = - \sum_N w_N \ln(w_N).$$

Последняя формула записана через натуральный логарифм, а не через \log_2 . Поэтому информацию по Шеннону измеряют в **"натах"**:

$$1 \text{ бит} = 1 \text{ нат} / \ln 2 \approx 1,44 \text{ нат}.$$

Энтропия и информация

Вернемся к записи сообщений в регистр из N ячеек. Если все сообщения равновероятны, то до прочтения содержания регистра мы не имеем никакой информации о том, какое из 2^N сообщений в нем записано. Пусть I – мера информации. Тогда до прочтения регистра $I_{in} = 0$, но энтропия $H_{in} = N$. Когда сообщение из регистра прочитано, то мы стали обладать информацией в N бит, то есть $I_{fin} = N$. При этом мы точно знаем, какое сообщение записано в регистре. Поэтому $w_{N\ fin} = 1 \Rightarrow H_{fin} = 0$. Таким образом, в нашем примере выполняется следующее равенство

$$H_{in} + I_{in} = N = H_{fin} + I_{fin}.$$

В общем случае, связь энтропии и информации задается следующим образом:

$$H + I = const$$

или

$$\Delta H = -\Delta I.$$

Следовательно, шенноновскую информационную энтропию можно рассматривать как меру недостатка информации о классической системе. Чем меньше энтропия, тем больше информация. В этом случае говорят о том, что система упорядочена. Чем больше энтропия, тем меньше информации о системе. Часто говорят о том, что система приближается к состоянию хаоса.

Декогеренция и парадокс кота Шредингера

С понятием энтропии тесно связан **вопрос о переходе суперпозиции состояний в смесь состояний.**

Пусть живой котик помещен в непрозрачный ящик с атомом в возбужденном состоянии. У атома (для простоты) имеются всего две возможности: **1)** остаться в возбужденном состоянии; **2)** испустить фотон и перейти в основное состояние. Предположим, что испущенный фотон всегда попадает в гранату, которая, непременно, взрывается после поглощения фотона, и, естественно, убивает котика своими осколками.

Пусть $\hat{\rho}_1$ – матрица плотности системы, когда атом не излучал, граната не взорвалась и котик жив. А $\hat{\rho}_2$ – матрица плотности для случая, когда атом излучил фотон, граната взорвалась и котик погиб ради идеалов абстрактной науки.

Из раздела **"Суперпозиция или смесь!"** ясно, что матрица плотности системы **"атом + граната + котик"** описывается либо смесью, либо суперпозицией матриц плотности $\hat{\rho}_1$ и $\hat{\rho}_2$.



Если в любой момент времени экспериментатор Аленушка откроет непрозрачный ящик, то она увидит либо живого, либо (печалька!) мертвого котика, но никогда живо-мертвого или мертво-живого. То есть, Аленушка всегда увидит смесь макроскопически различных состояний, но никогда не увидит их суперпозицию. **Вопрос:** почему так происходит, ведь ясно, что атом находился в суперпозиции состояний? **Где и как произошла декогеренция и суперпозиция превратилась в смесь?**

Короткий ответ на поставленные вопросы: **во всем виновато наше... Солнце!**

В более развернутой форме. Все предметы на Земле, в том числе и макросприборы, находятся в потоке излучения Солнца, который у поверхности Земли составляет $\frac{\Delta Q}{\Delta t} \approx 1,4 \cdot 10^6$ эрг/см² сек (так называемая солнечная постоянная). Этот поток излучения, в конечном счете, преобразуется в тепловую энергию атомов и молекул со средней температурой $\langle T \rangle \sim 300$ К. Тогда поток изменения энтропии от Солнца (**в битах!**) у поверхности Земли равен:

$$\frac{\Delta H_{\odot}}{\Delta t} \sim - \frac{1}{\Delta t} \frac{\Delta Q}{k_B \langle T \rangle} = - \frac{1}{k_B \langle T \rangle} \frac{\Delta Q}{\Delta t} \approx -3 \cdot 10^{19} \frac{\text{бит}}{\text{см}^2 \text{сек}},$$

где k_B – постоянная Больцмана. Потоку солнечной энтропии должен соответствовать поток информации

$$\frac{\Delta I_{\odot}}{\Delta t} = - \frac{\Delta H_{\odot}}{\Delta t} \approx 3 \cdot 10^{19} \frac{\text{бит}}{\text{см}^2 \text{сек}}.$$

В этом потоке информации "купаются" все макроприборы. Взаимодействие с потоком информации от Солнца приводит к **постоянному измерению** состояния макроприбора внешней средой и, следовательно, к редукции матрицы плотности макроприбора. Но редукция матрицы плотности макроприбора автоматически приводит к редукции запутанной (в смысле модели измерения фон Неймана) матрицы плотности **"микросистема + макроприбор"** (в рассматриваемом случае это матрица плотности $\hat{\rho}$ системы **"атом + граната + котик"**).

Оценим время Δt_R между актами редукции. Чтобы произошла редукция, необходимо передать информацию о состоянии макроприбора. Минимальное количество требуемой информации – **1 бит**. Поэтому:

$$1 \text{ бит} \sim \frac{\Delta I_{\odot}}{\Delta t} \Delta t_R L^2,$$

где L – характерный размер макроприбора. Примем $L = 10 \text{ см}$. Тогда

$$\Delta t_R \sim 3 \cdot 10^{-22} \text{ сек.}$$

Это время необходимо сравнить с характерным временем срабатывания макроприбора. Даже для лучших макроприборов оно не превосходит $\Delta t_D \sim 10^{-10}$ сек.

Поэтому, пока макроприбор производит одно измерение над микросистемой, в объединенной системе происходит порядка $\Delta t_D / \Delta t_R \approx 10^{11}$ актов редукции. Столько же раз меняется относительная фаза между состояниями $\hat{\rho}_1$ и $\hat{\rho}_2$! Следовательно, процесс измерения должен включать в себя усреднение по огромному числу этих различных относительных фаз. Основываясь на данной оценке и результатах раздела "Суперпозиция или смесь!" приходим к выводу, что в земных условиях появление мертво-живых и живо-мертвых котиков маловероятно. Этим и разрешается парадокс кота Шредингера.

Парадокс был предложен Э.Шредингером в 1935 году в процессе полемики вокруг другого парадокса – парадокса Эйнштейна-Подольского-Розена – и, по вполне понятным причинам, получил название парадокса кота Шредингера.

Граница между мирами

Исходя из представленной выше модели декогеренции мы способны оценить масштаб, начиная с которого систему уже можно считать микроскопической и применять к ней квантовые законы.

Согласно соотношению неопределенностей, $\Delta p \Delta x \sim \hbar$. Положим $\Delta x \sim L$, а характерное изменение импульса оценим как:

$$\Delta p \sim mv \sim m \frac{L}{\Delta t_R} \sim \rho L^3 L \frac{\Delta I_{\odot}}{\Delta t} L^2 = \rho \frac{\Delta I_{\odot}}{\Delta t} L^6,$$

где ρ – характерная плотность тела. Таким образом:

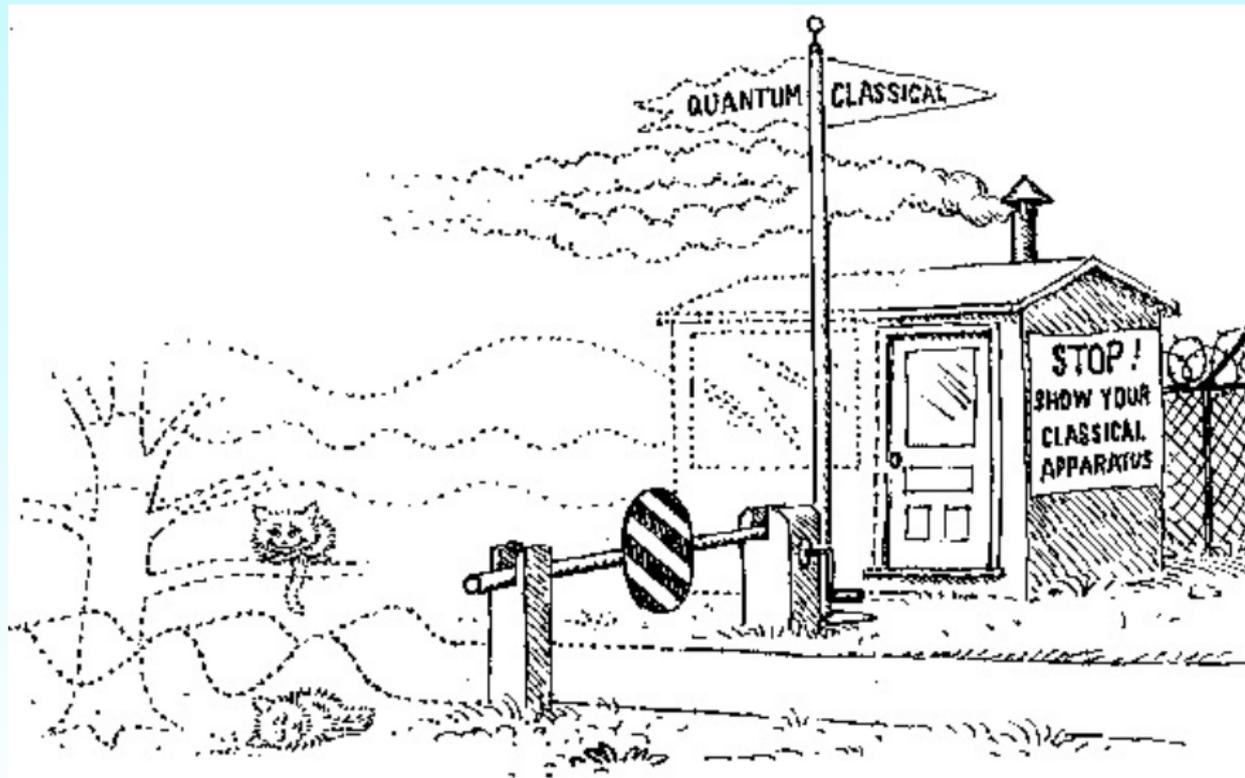
$$\frac{\rho}{\hbar} \frac{\Delta I_{\odot}}{\Delta t} L^7 \sim 1 \quad \Rightarrow \quad L \sim \left(\frac{\hbar}{\rho} \frac{1}{\Delta I_{\odot}/\Delta t} \right)^{1/7}.$$

Если принять $\rho \sim 10 \text{ гр/см}^3$, то $L \sim 10^{-7} \text{ см} \ll 10^{-4} \text{ см}$ – длины волны видимого света. Таким образом, квантовые явления нельзя видеть невооруженным глазом. Заметим, что L порядка размеров типичных молекул.

А так “на самом деле” выглядит граница между квантовым и классическим мирами по мнению знакомого нам W.Zurek-a – одного из авторов “No-cloning theorem”.



Или так, пока наблюдатель на границе спит...



Ограничения на величину шенноновской энтропии

Введенную выше энтропии по Шеннону $H = - \sum_N w_N \ln(w_N)$ можно определить более строго (как это принято в теории информации). Пусть имеется набор из N величин x_ℓ , каждая из которых может появляться с вероятностью $1 \geq w(x_\ell) \geq 0$ (например, буквы в тексте, грани несимметричной игральной кости и т.д.). Тогда говорят, что задан ансамбль $X = \{x_\ell, w(x_\ell)\}$, шенноновская энтропия которого есть

$$H(X) = - \sum_{\ell=1}^N w(x_\ell) \ln(w(x_\ell)), \quad \text{где} \quad \sum_{\ell=1}^N w(x_\ell) = 1.$$

Поскольку все $w(x_\ell)$ неотрицательны и не превосходят единицы, то очевидно, что $H(X) \geq 0$. Равенство достигается, когда $w(x_k) = 1$ и $w(x_1) = \dots = w(x_{k-1}) = w(x_{k+1}) = \dots = w(x_N) = 0$.

Теперь найдем максимальное значение энтропии $H(X)$. Из условия нормировки вероятности имеем:

$$w(x_N) = 1 - \sum_{\ell=1}^{N-1} w(x_\ell).$$

Тогда энтропию можно записать в виде

$$H(X) = - \sum_{\ell=1}^{N-1} w(x_{\ell}) \ln(w(x_{\ell})) - w(x_N) \ln(w(x_N)).$$

При $k \neq N$ с учетом условия нормировки получаем

$$\frac{\partial}{\partial w(x_k)} \left(w(x_N) \ln(w(x_N)) \right) = - \ln(w(x_N)) - 1.$$

Максимум $H(X)$ находим из условия

$$0 = \frac{\partial H(X)}{\partial w(x_k)} = \ln(w(x_N)) - \ln(w(x_k)).$$

Таким образом, $w(x_k) = w(x_N)$. Поскольку k пробегает любые целые значения от 1 до $N - 1$, то максимум функции $H(X)$ достигается, когда вероятности $w(x_1) = w(x_2) = \dots = w(x_{N-1}) = w(x_N) = 1/N$. И этот максимум равен $H_{max}(X) = -N \frac{1}{N} \ln\left(\frac{1}{N}\right) = \ln(N)$.

Из вышесказанного следует, что энтропия Шеннона $H(X)$ лежит в диапазоне

$$0 \leq H(X) \leq \ln(N).$$

где N - количество элементов в ансамбле X .

Двоичная энтропия

В теории информации (как классической, так и квантовой) важную роль играет ансамбль X_2 , который состоит всего из двух элементов x_1 и x_2 , каждый из которых возникает с вероятностью $W(x_1) = p$ и $W(x_2) = 1 - p$ соответственно ($0 \leq p \leq 1$). Энтропия такого ансамбля

$$H(X_2) \equiv H(p) = -p \ln p - (1 - p) \ln(1 - p)$$

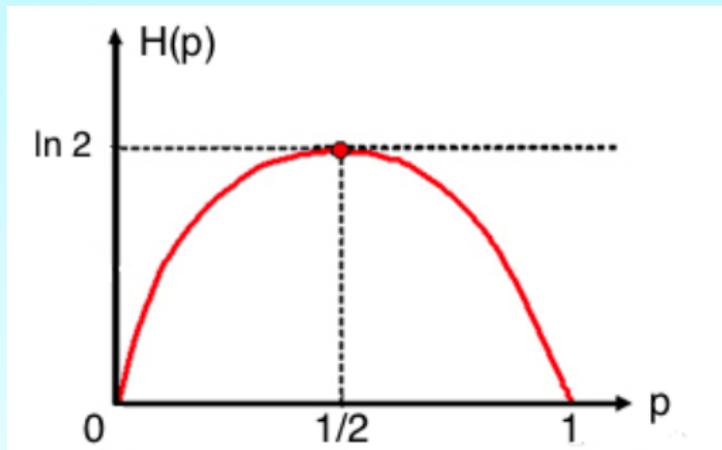
носит название **двоичной энтропии**.

Очевидно, что двоичная энтропия **обладает симметрией** относительно значения $p = 1/2$, то есть

$$H(p) = H(1 - p).$$

Легко проверить, что максимальное значение двоичной энтропии $H_{max} = \ln 2$ достигается при $p = 1/2$, минимальное — $H_{min} = 0$ — при $p = 0$ и $p = 1$ в полном согласии с общими ограничениями, полученными на предыдущей странице.

График функции $H(p)$ ведет себя следующим образом:



Из графика видно, что двоичная энтропия является **вогнутой функцией** (то есть любая прямая, соединяющая две точки на графике лежит ниже графика самой функции $H(p)$). Отсюда сразу получаем, что

$$H(px_1 + (1-p)x_2) \geq pH(x_1) + (1-p)H(x_2).$$

Равенство достигается только если $x_1 = x_2$ или $p = 0$, или $p = 1$. Данное свойство называется **вогнутостью** двоичной энтропии.

Неравенство Йенсена и вогнутость энтропии Шеннона

Свойство вогнутости можно сформулировать математически более строго. Функция $f(x)$ называется **вогнутой** при $x \in [a, b]$, если $f''_{xx} \leq 0$.

Для вогнутой функции выполняется следующее неравенство, которое носит название **неравенства Йенсена**. Пусть функция $f(x)$ вогнутая на интервале $[a, b]$ и пусть точки x_1, \dots, x_n принадлежат этому интервалу. Кроме того, пусть w_1, \dots, w_n – некоторые положительные числа, удовлетворяющие условию $\sum_{\ell=1}^n w_\ell = 1$. Тогда:

$$f\left(\sum_{\ell=1}^n w_\ell x_\ell\right) \geq \sum_{\ell=1}^n w_\ell f(x_\ell).$$

Элементарное доказательство этого факта можно найти, например, на стр.10 книги Ю. П. Соловьёва "Неравенства", Издательство Московского центра непрерывного математического образования, Москва, 2005 г.

Наконец, в качестве функции $f(x)$ рассмотрим функцию $f(x) = -x \ln x$. Легко проверить, что эта функция является вогнутой при $x \geq 0$. Тогда неравенство Йенсена приводит к **свойству вогнутости** для энтропии Шеннона:

$$H\left(\sum_{\ell=1}^n w_\ell x_\ell\right) \geq \sum_{\ell=1}^n w_\ell H(x_\ell).$$

Классическая относительная энтропия и неравенство Гиббса

Пусть теперь для величин x_ℓ существуют два различных набора вероятностей $P = \{x_\ell, p(x_\ell)\}$ и $Q = \{x_\ell, q(x_\ell)\}$, где $0 \leq p(x_\ell) \leq 1$, $0 \leq q(x_\ell) \leq 1$ и $\sum_{\ell=1}^N p(x_\ell) = \sum_{\ell=1}^N q(x_\ell) = 1$. Тогда **классической относительной энтропией** распределения " P " относительно распределения " Q " (**relative entropy**) называется величина

$$H(P \parallel Q) = - \sum_{\ell=1}^N p(x_\ell) \ln q(x_\ell) - H(P) = \sum_{\ell=1}^N p(x_\ell) \ln \left(\frac{p(x_\ell)}{q(x_\ell)} \right).$$

С аналогичной величиной мы уже встречались в разделе "**Количественное сравнение квантовых состояний**". И там эта величина носила название **метрики Кульбака-Лейблера**.

Поэтому $H(P \parallel Q)$ нужно рассматривать как классическую меру различия двух вероятностных распределений одного и того же набора величин $\{x_\ell\}$.

В дальнейших вычислениях всегда будем полагать, что $0 \ln 0 = 0$ и $-p(x_\ell) \ln 0 = +\infty$.

Теперь докажем, что классическая относительная энтропия неотрицательна, т.е. что

$$H(P \parallel Q) \geq 0.$$

Это неравенство называется **неравенством Гиббса**. Доказательство основано на простом факте, что при $x \geq 0$ верно неравенство $-\ln x \geq 1 - x$ (проверьте это самостоятельно при помощи разложения в ряд Тейлора). Тогда:

$$\begin{aligned} H(P \parallel Q) &= - \sum_{\ell=1}^N p(x_\ell) \ln \left(\frac{q(x_\ell)}{p(x_\ell)} \right) \geq \sum_{\ell=1}^N p(x_\ell) \left(1 - \frac{q(x_\ell)}{p(x_\ell)} \right) = \\ &= \sum_{\ell=1}^N p(x_\ell) - \sum_{\ell=1}^N q(x_\ell) = 1 - 1 = 0, \quad \text{ч.т.д.} \end{aligned}$$

Равенство достигается, когда оба распределения совпадают, т.е. когда $p(x_\ell) = q(x_\ell)$. Неравенство Гиббса удобно использовать для исследования свойств других энтропийных величин.

Классическая совместная энтропия и субаддитивность

Пусть имеется два набора случайных величин $X = \{x_\ell\}$ и $Y = \{y_m\}$, для которых определены совместные вероятности $w(x_\ell, y_m)$. Тогда для этих наборов естественно определить понятие **классической совместной энтропии** (**joint entropy**)

$$H(X, Y) = - \sum_{\ell, m} w(x_\ell, y_m) \ln w(x_\ell, y_m).$$

Поскольку $w(x_\ell, y_m) = w(y_m, x_\ell)$ и $\sum_{\ell, m} \dots = \sum_{m, \ell} \dots$, то

$$H(X, Y) = H(Y, X).$$

Совместная энтропия является мерой полной неопределенности для пары наборов случайных величин (X, Y) . Она обладает свойством **субаддитивности** (доказательство будет дано позже)

$$H(X, Y) \leq H(X) + H(Y).$$

Равенство достигается, когда наборы X и Y являются независимыми, т.е. когда $w(x_\ell, y_m) = w(x_\ell) w(y_m)$.

Очевидно, что понятие совместной энтропии может быть расширено на любое число наборов случайных величин.

Условная вероятность и теорема Байеса

Обозначим через $w(y_m|x_\ell)$ – **условную вероятность** найти величину y_m при условии, что величина x_ℓ уже известна. Тогда **по теореме Байеса**

$$w(y_m|x_\ell) = \frac{w(y_m, x_\ell)}{w(x_\ell)} = \frac{w(x_\ell, y_m)}{w(x_\ell)}.$$

При этом

$$w(y_m) = \sum_{\ell} w(y_m, x_\ell) = \sum_{\ell} w(y_m|x_\ell) w(x_\ell)$$

и

$$w(x_\ell) = \sum_m w(x_\ell, y_m) = \sum_m w(x_\ell|y_m) w(y_m).$$

Из теоремы Байеса сразу следует, что

$$w(x_\ell|y_m) w(y_m) = w(x_\ell, y_m) = w(y_m, x_\ell) = w(y_m|x_\ell) w(x_\ell).$$

Классическая условная энтропия

Распишем выражение для совместной энтропии с учетом теоремы Байеса. Имеем:

$$\begin{aligned}H(X, Y) &= - \sum_{\ell, m} w(x_\ell, y_m) \ln w(x_\ell, y_m) = \\&= - \sum_{\ell, m} w(x_\ell, y_m) \ln \left(w(y_m|x_\ell) w(x_\ell) \right) = \\&= - \sum_{\ell, m} w(x_\ell, y_m) \ln w(y_m|x_\ell) - \sum_{\ell, m} w(x_\ell, y_m) \ln w(x_\ell) = \\&= - \sum_{\ell, m} w(y_m, x_\ell) \ln w(y_m|x_\ell) - \sum_{\ell} w(x_\ell) \ln w(x_\ell) = \\&= H(Y|X) + H(X).\end{aligned}$$

Величина

$$\begin{aligned}H(Y|X) &= - \sum_{\ell, m} w(y_m, x_\ell) \ln w(y_m|x_\ell) = \\&= - \sum_{\ell} w(x_\ell) \sum_m w(y_m|x_\ell) \ln w(y_m|x_\ell) = \sum_{\ell} w(x_\ell) H(Y|x_\ell)\end{aligned}$$

называется **классической условной энтропией** (conditional entropy) или **общей** классической условной энтропией.

А величина

$$H(Y|x_\ell) = - \sum_m w(y_m|x_\ell) \ln w(y_m|x_\ell)$$

носит название **частной классической условной энтропии**.

Функция $H(Y|X)$ служит мерой неопределенности ансамбля Y при известном значении ансамбля X . А функция $H(Y|x_\ell)$ служит мерой неопределенности ансамбля Y при известном значении случайной величины x_ℓ .

Поскольку $0 \leq w(y_m|x_\ell) \leq 1$, то $-\ln w(y_m|x_\ell) \geq 0$. Поэтому

$$H(Y|X) \geq 0 \quad \text{и} \quad H(Y|x_\ell) \geq 0.$$

Аналогично величине $H(Y|X)$ можно определить классическую условную энтропию $H(X|Y)$ из соотношения:

$$H(X|Y) = H(X, Y) - H(Y).$$

Очевидно, что $H(X|Y) \geq 0$.

Доказательство субаддитивности

Выше было получено, что $H(Y|X) \geq 0$ и $H(X|Y) \geq 0$. Отсюда немедленно следуют неравенства:

$$H(X, Y) \geq H(X) \text{ и } H(X, Y) \geq H(Y).$$

Теперь исполним обещание и докажем **субаддитивность** энтропии. Для этого воспользуемся неравенством Гиббса. Рассмотрим наборы $P = \{x_\ell, y_m, w(x_\ell, y_m)\}$ и $Q = \{x_\ell, y_m, w(x_\ell)w(y_m)\}$. Тогда:

$$\begin{aligned} 0 &\leq H(P||Q) = - \sum_{\ell, m} w(x_\ell, y_m) \ln \left(\frac{w(x_\ell)w(y_m)}{w(x_\ell, y_m)} \right) = \\ &= - \sum_{\ell} \ln w(x_\ell) \sum_m w(x_\ell, y_m) - \sum_m \ln w(y_m) \sum_{\ell} w(x_\ell, y_m) + \\ &\quad + \sum_{\ell, m} w(x_\ell, y_m) \ln w(x_\ell, y_m) = - \sum_{\ell} w(x_\ell) \ln w(x_\ell) - \\ &\quad - \sum_m w(y_m) \ln w(y_m) - H(X, Y) = H(X) + H(Y) - H(X, Y). \end{aligned}$$

Неравенство доказано. Окончательно получаем, что

$$2 \cdot H(X, Y) \geq H(X) + H(Y) \geq H(X, Y).$$

Классическая взаимная информация

Классической взаимной информацией (mutual information) называется информация, которая является общей для наборов X и Y . Она записывается в виде:

$$I(X : Y) = H(X) + H(Y) - H(X, Y).$$

откуда немедленно следует, что $I(X : Y) \geq 0$ (см. неравенство в конце предыдущего слайда). По своему определению $I(X : Y)$ должна быть симметричной функцией наборов X и Y , то есть:

$$I(X : Y) = I(Y : X) \geq 0.$$

Отметим полезное равенство

$$I(X : Y) = H(X) - H(X|Y) = H(Y) - H(Y|X).$$

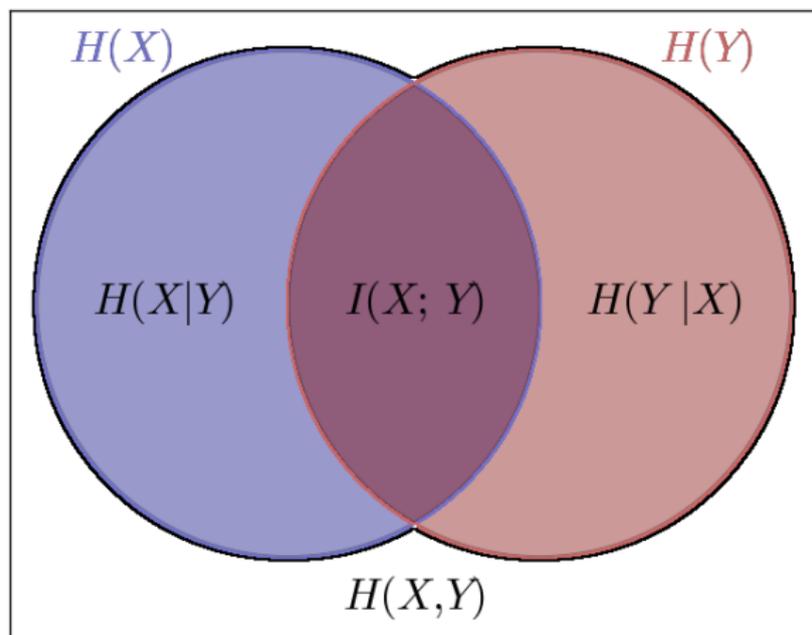
Из этого равенства и неотрицательности взаимной информации сразу получаем, что

$$H(X) \geq H(X|Y) \quad \text{и} \quad H(Y) \geq H(Y|X).$$

Заметим, что взаимная информация **НЕ обладает** свойством субаддитивности, т.е.

$$I(X, Y : Z) \not\leq I(X : Z) + I(Y : Z).$$

Наглядная связь между различными энтропиями и взаимной информацией



Сильная субаддитивность

Довольно очевидно, что можно узнать больше информации о наборе X , если известна информация о наборах Y и Z , которые каким то образом связаны с набором X (например, при помощи совместных распределений вероятностей или найденных на опыте эмпирических корреляций), чем когда известна информация только об одном таком наборе Y . В силу соотношения между энтропией и информацией для условной энтропии должно иметь место обратное неравенство

$$H(X|Y, Z) \leq H(X|Y).$$

Распишем правую и левую части данного неравенств согласно определению условной энтропии. Имеем

$$H(X|Y, Z) = H(X, Y, Z) - H(Y, Z) \quad \text{и} \quad H(X|Y) = H(X, Y) - H(Y).$$

Отсюда немедленно получаем **свойство сильной субаддитивности** для энтропии Шеннона

$$H(X, Y, Z) + H(Y) \leq H(X, Y) + H(Y, Z).$$

Часть 7

ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ИНФОРМАЦИИ

Квантовая энтропия (энтропия фон Неймана)

Рассмотрим микросистему, которая описывается матрицей плотности $\hat{\rho}$. Пусть $|\rho_i\rangle$ – собственные вектора матрицы плотности, отвечающие собственным значениям ρ_i (для простоты будем считать их невырожденными):

$$\hat{\rho} |\rho_i\rangle = \rho_i |\rho_i\rangle.$$

Очевидно, что ρ_i имеет смысл вероятности найти квантовую систему в чистом состоянии $\hat{\rho}_i = |\rho_i\rangle\langle\rho_i|$. Поэтому $0 \leq \rho_i \leq 1$.

В базисе $\{|\rho_i\rangle\}$ матрица плотности имеет диагональный вид. Поэтому в базисе собственных векторов **квантовая энтропия** (или **энтропия фон Неймана**) может быть определена аналогично классической (информационной) энтропии $H(X)$ Шеннона при помощи собственных значений:

$$S = - \sum_i \rho_i \ln \rho_i.$$

Докажем, что полученное на предыдущем слайде выражение для энтропии можно переписать в универсальном виде:

$$S \equiv S(\hat{\rho}) = -\langle \ln \hat{\rho} \rangle_{\rho} = -\text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}).$$

Эта формула верна для любого представления матрицы плотности, и никак не связана со специфическим базисом собственных векторов матрицы $\hat{\rho}$.

Доказательство начнем с факта, что в базисе собственных векторов $F(\hat{\rho})|\rho_i\rangle = F(\rho_i)|\rho_i\rangle$. Тогда:

$$-\text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) = -\sum_i \langle \rho_i | \hat{\rho} \ln \hat{\rho} | \rho_i \rangle = -\sum_i \rho_i \ln \rho_i.$$

При помощи унитарного преобразования \hat{U} перейдем от матрицы $\hat{\rho}$ в базисе собственных векторов к матрице плотности в каком-либо другом базисе. Обозначим эту матрицу через $\hat{\rho}_*$. То есть $\hat{\rho}_* = \hat{U} \hat{\rho} \hat{U}^\dagger$. Поскольку физическое состояние микросистемы при таком преобразовании не меняется, то $\langle A \rangle_{\rho} = \langle A \rangle_{\rho_*}$.

Кроме того:

$$\begin{aligned}\ln \hat{\rho}_* &= \ln (\hat{U} \hat{\rho} \hat{U}^\dagger) = \ln \hat{U} + \ln (\hat{\rho} \hat{U}^\dagger) = \ln (\hat{\rho} \hat{U}^\dagger) + \ln \hat{U} = \\ &= \ln (\hat{\rho} \hat{U}^\dagger \hat{U}) = \ln \hat{\rho}.\end{aligned}$$

Учитывая два последних результата, получаем:

$$-\langle \ln \hat{\rho}_* \rangle_{\rho_*} = -\langle \ln \hat{\rho}_* \rangle_{\rho} = -\langle \ln \hat{\rho} \rangle_{\rho}.$$

Таким образом, наше утверждение доказано. Из него сразу следует, что энтропия S не изменяется при любых **унитарных** преобразованиях базиса, в котором записана матрица $\hat{\rho}$, то есть

$$S(\hat{U} \hat{\rho} \hat{U}^\dagger) = S(\hat{\rho}).$$

Note: для практических вычислений удобнее находить собственные вектора и собственные значения матрицы плотности. При этом считается, что $0 \cdot \ln(0) = 0$. А потом вычислять энтропию по формуле $S = -\sum_i \rho_i \ln \rho_i$.

Note: наоборот, для доказательства общих соотношений удобно операторное выражение для энтропии в виде $S = -\text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho})$.

Ограничения на величину энтропии фон Неймана

С учетом определения энтропии фон Неймана S в терминах собственных значений ρ_i и принимая во внимание, что все $0 \leq \rho_i \leq 1$, немедленно приходим к неравенству $S \geq 0$. Равенство достигается, когда одно из значений $\rho_k = 1$, а остальные значения равны нулю.

Если энтропия S имеет N ненулевых собственных значений, то $S \leq \ln(N)$. Равенство достигается, когда все $\rho_i = 1/N$, то есть когда квантовая система находится в максимально однородном состоянии. Доказательство этого факта полностью аналогично доказательству неравенства $H(X) \leq \ln(N)$, которое было проведено в параграфе "Ограничения на величину шенноновской энтропии".

Таким образом, аналогично классической энтропии Шеннона $H(X)$, квантовая энтропия фон Неймана S удовлетворяет двойному неравенству

$$0 \leq S \leq \ln(N).$$

Энтропия чистого состояния

Возьмем произвольное чистое состояние $|\psi\rangle$. Ему отвечает матрица плотности $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$, для которой уравнение на собственные вектора и собственные значения записывается в виде:

$$\hat{\rho} |\rho_i\rangle = \rho_i |\rho_i\rangle \Rightarrow \langle\psi| \rho_i\rangle |\psi\rangle = \rho_i |\rho_i\rangle.$$

Поэтому матрица плотности чистого состояния имеет один собственный вектор $|\rho_1\rangle = |\psi\rangle$, которому соответствует единственное собственное значение $\rho_1 = \langle\psi| \rho_1\rangle = \langle\psi| \psi\rangle = 1$. Тогда энтропия чистого состояния

$$S_\psi = -1 \cdot \ln(1) = 0.$$

Поскольку $S \geq 0$, то мы показали, что любое **чистое состояние обладает максимально возможной** для макроскопического наблюдателя (!!!) **информацией о свойствах квантовой системы**. Это утверждение полностью согласуется с примечанием к **Постулату N1** из раздела "Постулаты квантовой механики".

Гипотеза о скрытых параметрах

Вообще говоря, понятие **максимально возможного количества информации**, которое доступно макроскопическому наблюдателю, может быть **НЕ эквивалентно** понятию **полной информации**, которой обладает квантовая система в чистом или смешанном состоянии.

Например, можно предположить, что существуют некие "тонкие" характеристики квантовой системы, которые принципиально не улавливаются при помощи наших грубых макроскопических приборов. И, если бы, экспериментаторы могли знать эти характеристики, то предсказания поведения квантовых систем можно было бы проводить абсолютно детерминистически в духе классической физики. Но мы не знаем и никогда не узнаем эти "тонкие" параметры. Поэтому вынуждены строить вероятностную теорию, которая относится к реальному поведению микрообъектов как, например, классическая термодинамика и статфизика к поведению классического идеального газа.

Такие "тонкие" параметры получили название **скрытых параметров** квантовой механики.

В настоящее время:

- ▶ **не удалось** построить ни одной логически непротиворечивой теории со скрытыми параметрами, которая могла бы хоть немного конкурировать с квантовой механикой по количеству описываемых явлений микромира при минимальных предположениях относительно базовых постулатов теории;
- ▶ экспериментально подтвержденное нарушение неравенств Белла **исключает** самые простые и естественные концепции скрытых параметров (локальные скрытые параметры, т.е. совместимые с аксиомами теории относительности);
- ▶ нелокальные скрытые параметры не исключены, но тогда требуется пересмотреть основы всей современной физики. А к этому нет никаких серьезных оснований.

Проще всего, вслед за Н.Бором, постулировать, что **в квантовом мире случайность имеет фундаментальную природу... Но следует ли это делать?...**

Пример вычисления энтропии смешанного состояния

Выше было показано, что матрица плотности $\hat{\rho}^{(1)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ отвечает смешанному состоянию. Найдем энтропию этого состояния. Нам необходимо знать только собственные значения данной матрицы. Для этого решим характеристическое уравнение:

$$0 = \det \left(\hat{\rho}^{(1)} - \rho^{(1)} \hat{1} \right) = \det \begin{pmatrix} \frac{1}{2} - \rho^{(1)} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} - \rho^{(1)} \end{pmatrix} = \left(\frac{1}{2} - \rho^{(1)} \right)^2.$$

Из него находим два корня $\rho_1^{(1)} = \rho_2^{(1)} = 1/2$. Поэтому энтропия фон Неймана рассматриваемого состояния равна:

$$S^{(1)} = -2 \cdot \frac{1}{2} \ln \frac{1}{2} = \ln 2 \approx 0,69 \text{ нат} = 1 \text{ бит}.$$

Энтропия Шеннона для этого состояния составляет:

$$H^{(1)} = -2 \cdot \frac{1}{2} \log_2 \frac{1}{2} = 1 \text{ бит}.$$

Видно, что энтропия смешанного состояния больше нуля. Поэтому в матрице плотности смешанного состояния содержится **меньше информации** о квантовой системе, чем в векторе состояния чистого состояния. Это легко понять, поскольку декогеренция уничтожает информацию об относительной фазе.

Сравнение квантовой и классической энтропий

В предыдущем примере $S = H$. Но это равенство выполняется далеко не всегда. Рассмотрим двухуровневую квантовую систему с базисом $|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ и $|2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. В этом базисе определим два чистых состояния $|\psi_1\rangle = |1\rangle$ и $|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle)$ и построим матрицу плотности смешанного состояния, если вероятности $W_1 = W_2 = 1/2$. Имеем:

$$\hat{\rho} = W_1 \hat{\rho}_1 + W_2 \hat{\rho}_2 = \frac{1}{2} (|\psi_1\rangle \langle \psi_1| + |\psi_2\rangle \langle \psi_2|) = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Собственные значения этой матрицы

$$\rho_1 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\sqrt{2}}{2} \right) \approx 0,854 \text{ и } \rho_2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\sqrt{2}}{2} \right) \approx 0,146.$$

При вычислении энтропии фон Неймана в битах удобно перейти от логарифмов по основанию "e" к логарифмам по основанию "2". Тогда находим:

$$S = -(\rho_1 \ln \rho_1 + \rho_2 \ln \rho_2) = -\ln 2 \cdot (\rho_1 \log_2 \rho_1 + \rho_2 \log_2 \rho_2) = \\ = \ln 2 \cdot \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2\sqrt{2}} \log_2 \left(\frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}-1} \right) \right) \approx 0,6 \cdot \ln 2 = 0,6 \text{ бит} \approx 0,86 \text{ нат.}$$

Для того же самого состояния классическая энтропия Шеннона равна:

$$H = -W_1 \log_2 W_1 - W_2 \log_2 W_2 = -2 \cdot \frac{1}{2} \log_2 \frac{1}{2} = 1 \text{ бит} \approx 1,44 \text{ нат.}$$

Практическое наблюдение: таким образом в рассматриваемом случае $H > S$. То есть, принципиально, при помощи квантовых систем можно передать или обработать **БОЛЬШЕ** информации, чем с помощью их классических аналогов. На этом основаны методы квантового **сверхплотного кодирования** и эффективные алгоритмы **квантовых вычислений**, которые реализуются с помощью запутанных состояний.

Вопрос: всегда ли $H \geq S$, или неравенство можно обратить?

Ответ: ВСЕГДА. Сформулируем это утверждение более строго. Пусть имеется наблюдаемая F , которая (для простоты!) обладает дискретным невырожденным спектром $\{f_\ell\}$. Если квантовая система описывается матрицей плотности $\hat{\rho}$, то каждое значение спектра измеряется с вероятностью $w_\ell = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{P}_\ell) = \langle f_\ell | \hat{\rho} | f_\ell \rangle$, где $\hat{P}_\ell = |f_\ell\rangle \langle f_\ell|$ – проектор на состояние $|f_\ell\rangle$. Следовательно, для величин f_ℓ можно задать ансамбль $X = \{f_\ell, w_\ell\}$. Тогда

$$H(X) \geq S(\hat{\rho}).$$

Равенство достигается, если $[\hat{F}, \hat{\rho}] = 0$, то есть когда $w_i \equiv \rho_i$.

Докажем данное неравенство. Рассмотрим матрицу $\hat{\rho}$ в базисе собственных векторов $\hat{\rho} = \sum_i \rho_i | \rho_i \rangle \langle \rho_i |$. Тогда для вероятностей w_ℓ можем записать

$$w_\ell = \sum_i |C_{\ell i}|^2 \rho_i, \quad \text{где} \quad C_{\ell i} = \langle f_\ell | \rho_i \rangle.$$

Коэффициенты $C_{\ell i}$ удовлетворяют условию нормировки

$$\sum_{\ell} |C_{\ell i}|^2 = \left\langle \rho_i \left| \sum_{\ell} \hat{P}_{\ell} \right| \rho_i \right\rangle = \langle \rho_i | \hat{1} | \rho_i \rangle = \langle \rho_i | \rho_i \rangle = 1.$$

Энтропия Шеннона ансамбля X имеет вид:

$$H(X) = - \sum_{\ell} w_{\ell} \ln w_{\ell}.$$

Применим к ней **неравенство Йенсена**. Поскольку функция $f(x) = -x \ln x$ является вогнутой, то с учетом разложения w_{ℓ} по ρ_i , которое было получено на предыдущем слайде, и используя нормировку коэффициентов $|C_{\ell i}|^2$, находим:

$$\begin{aligned} H(X) &\geq \sum_{\ell} \sum_i |C_{\ell i}|^2 H(\rho_i) = \sum_i H(\rho_i) \sum_{\ell} |C_{\ell i}|^2 = \sum_i H(\rho_i) = \\ &= - \sum_i \rho_i \ln \rho_i = S(\hat{\rho}). \end{aligned}$$

Неравенство доказано.

Квантовая относительная энтропия и неравенство Клейна

Пусть проводятся измерения некоторой наблюдаемой F со спектром $\{f_e\}$ в микросистемах, которые описываются матрицами плотности $\hat{\rho}$ и $\hat{\sigma}$ соответственно. Тогда **квантовой относительной энтропией** матрицы $\hat{\rho}$ по отношению к матрице $\hat{\sigma}$ называется величина

$$S(\hat{\rho} \parallel \hat{\sigma}) = -\text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\sigma}) + \text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) = -\text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\sigma}) - S(\hat{\rho}).$$

Квантовая относительная энтропия удовлетворяет **неравенству Клейна**

$$S(\hat{\rho} \parallel \hat{\sigma}) \geq 0,$$

которое является квантовым аналогом **неравенства Гиббса**. Докажем это неравенство.

Пусть в базисе собственных векторов матрицы $\hat{\rho} = \sum_i \rho_i |\rho_i\rangle \langle \rho_i|$ и $\hat{\sigma} = \sum_k \sigma_k |\sigma_k\rangle \langle \sigma_k|$. Тогда

$$S(\hat{\rho} \parallel \hat{\sigma}) = - \sum_i \langle \rho_i | \hat{\rho} \ln \hat{\sigma} | \rho_i \rangle + \sum_i \rho_i \ln \rho_i =$$

$$\begin{aligned}
&= - \sum_i \rho_i \langle \rho_i | \ln \hat{\sigma} | \rho_i \rangle + \sum_i \rho_i \ln \rho_i = \\
&= - \sum_i \rho_i \sum_k \ln \sigma_k |\langle \rho_i | \sigma_k \rangle|^2 + \sum_i \rho_i \ln \rho_i.
\end{aligned}$$

В силу **вогнутости** функции $f(x) = \ln x$ при $x \in (0, 1]$ (проверьте это самостоятельно!) можем воспользоваться неравенством Йенсена

$$\sum_k |\langle \rho_i | \sigma_k \rangle|^2 \ln \sigma_k \leq \ln \left(\sum_k |\langle \rho_i | \sigma_k \rangle|^2 \sigma_k \right) = \ln \zeta_i.$$

Легко видеть, что $0 \leq \zeta_i \leq 1$ и $\sum_i \zeta_i = 1$. Тогда величины ζ_i можно трактовать как вероятности и, следовательно,

$$S(\hat{\rho} \| \hat{\sigma}) \geq - \sum_i \rho_i \ln \zeta_i + \sum_i \rho_i \ln \rho_i = \sum_i \rho_i \ln \left(\frac{\rho_i}{\zeta_i} \right) = H(P \| Q) \geq 0,$$

где используются ансамбли $P = \{f_i, \rho_i\}$ $Q = \{f_i, \zeta_i\}$. Неравенство доказано.

Квантовая совместная энтропия и субаддитивность

Пусть имеется квантовая система, которая описывается матрицей плотности $\hat{\rho}_{AB}$. И пусть эта система состоит из двух подсистем "A" и "B". Тогда **квантовой совместной энтропией** рассматриваемой квантовой системы называется величина

$$S(\hat{\rho}_{AB}) = -\text{Tr}(\hat{\rho}_{AB} \ln \hat{\rho}_{AB}).$$

Как и классическая совместная энтропия, квантовая совместная энтропия обладает **свойством субаддитивности**

$$S(\hat{\rho}_{AB}) \leq S(\hat{\rho}_A) + S(\hat{\rho}_B),$$

где $\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B \hat{\rho}_{AB}$ и $\hat{\rho}_B = \text{Tr}_A \hat{\rho}_{AB}$ – матрицы плотности подсистем "A" и "B" соответственно. Воспользуемся очевидным свойством частичного следа

$$\text{Tr}(\dots) = \text{Tr}_A(\text{Tr}_B(\dots)) = \text{Tr}_B(\text{Tr}_A(\dots)).$$

и докажем свойство субаддитивности при помощи неравенства Клейна. Имеем:

$$\begin{aligned} 0 &\leq S(\hat{\rho}_{AB} \parallel \hat{\rho}_A \otimes \hat{\rho}_B) = -\text{Tr}(\hat{\rho}_{AB} \ln(\hat{\rho}_A \hat{\rho}_B)) - S(\hat{\rho}_{AB}) = \\ &= -\text{Tr}(\hat{\rho}_{AB} \ln \hat{\rho}_A) - \text{Tr}(\hat{\rho}_{AB} \ln \hat{\rho}_B) - S(\hat{\rho}_{AB}) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\text{Tr}_A\left(\text{Tr}_B(\hat{\rho}_{AB} \ln \hat{\rho}_A)\right) - \text{Tr}_B\left(\text{Tr}_A(\hat{\rho}_{AB} \ln \hat{\rho}_B)\right) - S(\hat{\rho}_{AB}) = \\
&= -\text{Tr}_A\left((\text{Tr}_B \hat{\rho}_{AB}) \ln \hat{\rho}_A\right) - \text{Tr}_B\left((\text{Tr}_A \hat{\rho}_{AB}) \ln \hat{\rho}_B\right) - S(\hat{\rho}_{AB}) = \\
&= -\text{Tr}_A(\hat{\rho}_A \ln \hat{\rho}_A) - \text{Tr}_B(\hat{\rho}_B \ln \hat{\rho}_B) - S(\hat{\rho}_{AB}) = S(\hat{\rho}_A) + S(\hat{\rho}_B) - S(\hat{\rho}_{AB}),
\end{aligned}$$

что и требовалось доказать. **Равенство** достигается **для некоррелированных** подсистем "A" и "B", то есть когда $\hat{\rho}_{AB} = \hat{\rho}_A \otimes \hat{\rho}_B$.

Для квантовой энтропии выполняется **свойство сильной субаддитивности**, которое аналогично соответствующему свойству для классической энтропии. Пусть квантовая система описывается матрицей плотности $\hat{\rho}_{ABC}$ и состоит из трех подсистем "A", "B" и "C". Тогда

$$S(\hat{\rho}_{ABC}) + S(\hat{\rho}_B) \leq S(\hat{\rho}_{AB}) + S(\hat{\rho}_{BC}).$$

В квантовом случае доказательство гораздо сложнее классического. Его можно найти, например, в книге **М. Нильсен, И.Чанг, "Квантовые вычисления и квантовая информация", М. "Мир" (2006), § 11.4.** Мы это доказательство проводить не будем.

Свойство субаддитивности для состояния Вернера

Покажем, что **состояние Вернера** автоматически **удовлетворяет свойству субаддитивности** при любых значениях $x \in [0, 1]$. Для рассматриваемого состояния размерность Гильбертова пространства $N = 4$. Поэтому из разделе **"Ограничения на величину энтропии фон Неймана"** сразу следует, что

$$S(\hat{\rho}^{(W)}) \leq \ln 4 = 2 \ln 2.$$

В разделе **"Редукционное условие сепарабельности"** были найдены матрицы плотности подсистем **"A"** и **"B"** в виде

$$\hat{\rho}_A^{(W)} = \hat{\rho}_B^{(W)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Используя результаты раздела **"Пример вычисления энтропии смешанного состояния"** для энтропий подсистем **"A"** и **"B"** немедленно можем написать, что $S(\hat{\rho}_A^{(W)}) = S(\hat{\rho}_B^{(W)}) = \ln 2$. Тогда

$$S(\hat{\rho}_A^{(W)}) + S(\hat{\rho}_B^{(W)}) = 2 \ln 2 \geq S(\hat{\rho}^{(W)})$$

при любых $x \in [0, 1]$, что и требовалось проверить.

Субаддитивность и второе начало термодинамики

Часто **второе начало** термодинамики формулируют следующим образом: **энтропия любой системы (например, нашей Вселенной) не может убывать со временем.** Покажем, что второе начало термодинамики может быть получено **из свойства субаддитивности** энтропии фон Неймана.

Рассмотрим микрочастицу "A" в термодинамическом окружении (или в термостате) "B". Пусть при $t \leq t_0$ микрочастица и окружение не взаимодействовали друг с другом. Тогда в момент времени t_0 матрицу плотности всей замкнутой системы $\hat{\rho}_0 = \hat{\rho}_{AB}(t_0)$ можно записать в виде $\hat{\rho}_0 = \hat{\rho}_{A0} \otimes \hat{\rho}_{B0}$. По свойству субаддитивности

$$S(\hat{\rho}_0) = S(\hat{\rho}_{A0}) + S(\hat{\rho}_{B0}).$$

В произвольный момент времени эволюция матрицы плотности замкнутой квантовой системы может быть записана при помощи **УНИТАРНОГО** оператора эволюции $\hat{U}(t, t_0)$ в виде:

$$\hat{\rho}_{AB}(t) = \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}_0 \hat{U}^\dagger(t, t_0).$$

В разделе "Квантовая энтропия" было показано, что энтропия фон Неймана не меняется при унитарных преобразованиях. Поэтому

$$S(\hat{\rho}_{AB}(t)) = S(\hat{\rho}_0).$$

С другой стороны при $t > t_0$ между микрочастицей и термостатом началось взаимодействие. Поэтому матрицу плотности всей $\hat{\rho}_{AB}(t)$ всей системы уже нельзя записать в простом факторизованном виде. Согласно условию субаддитивности это приводит к тому, что

$$S(\hat{\rho}_{AB}(t)) \leq S(\hat{\rho}_A(t)) + S(\hat{\rho}_B(t)).$$

Поэтому

$$S(\hat{\rho}_{A0}) + S(\hat{\rho}_{B0}) \leq S(\hat{\rho}_A(t)) + S(\hat{\rho}_B(t)).$$

Если рассматривать Вселенную как набор микрочастиц во внешнем окружении (например, в поле Хиггса, в поле реликтовых фотонов или нейтрино) то при помощи последнего неравенства можно сразу заключить, что энтропия Вселенной не может убывать. То есть со временем энтропия Вселенной достигнет максимума, установится тепловое равновесие и Вселенная придет к тепловой смерти... Ну это только в нулевом приближении...

Квантовая взаимная информация

Квантовая взаимная информация вводится по аналогии с классической $I(X : Y)$ по формуле

$$I_Q(\hat{\rho}_A : \hat{\rho}_B) = S(\hat{\rho}_A) + S(\hat{\rho}_B) - S(\hat{\rho}_{AB}) \geq 0,$$

что следует из свойства субаддитивности энтропии фон Неймана. Величина $I_Q(\hat{\rho}_A : \hat{\rho}_B)$ является **мерой степени корреляции** двух квантовых подсистем "A" и "B". Чтобы пояснить сказанное, приведем несколько примеров.

1) Для состояния Белла

$$|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+\rangle^{(A)} |-\rangle^{(B)} - |-\rangle^{(A)} |+\rangle^{(B)} \right)$$

матрица плотности $\hat{\rho}_{AB} = |\Psi^-\rangle \langle \Psi^-|$. Это матрица плотности чистого состояния. Поэтому $S(\hat{\rho}_{AB}) = 0$ (см. раздел "Матрица плотности чистого состояния"). В то время как матрицы плотности каждой из подсистем $\hat{\rho}_A = \hat{\rho}_B = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$. (см. "Квантовое происхождение вероятностей W_ℓ "). Для них $S(\hat{\rho}_A) = S(\hat{\rho}_B) = \ln 2$.

Тогда квантовая взаимная информация двух подсистем в состоянии Белла

$$I_Q^-(\hat{\rho}_A : \hat{\rho}_B) = 2 \ln 2,$$

что означает **максимально возможную** степень корреляции.

2) Для смеси состояний

$$\hat{\rho}_{AB} = \frac{1}{2} \left(|+\rangle^{(A)} \langle +|^{(A)} \otimes |-\rangle^{(B)} \langle -|^{(B)} + |-\rangle^{(A)} \langle -|^{(A)} \otimes |+\rangle^{(B)} \langle +|^{(B)} \right)$$

энтропия всей квантовой системы $S(\hat{\rho}_{AB}) = -2 \frac{1}{2} \ln \frac{1}{2} = \ln 2$. Мат-

рицы плотности каждой из подсистем $\hat{\rho}_A = \hat{\rho}_B = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$. Для

них $S(\hat{\rho}_A) = S(\hat{\rho}_B) = \ln 2$. Тогда квантовая взаимная информация смеси будет

$$I_Q^{mixt}(\hat{\rho}_A : \hat{\rho}_B) = 2 \ln 2 - \ln 2 = \ln 2$$

меньше, чем для запутанного белловского состояния.

3) Если же $\hat{\rho}_{AB} = \hat{\rho}_A \otimes \hat{\rho}_B$, то

$$I_Q^{prod}(\hat{\rho}_A : \hat{\rho}_B) = 0.$$

Любые корреляции отсутствуют.

Неравенство треугольника

Иначе оно называется **неравенством Араки–Либя**:

$$S(\hat{\rho}_{AB}) \geq |S(\hat{\rho}_A) - S(\hat{\rho}_B)|.$$

Данное неравенство является квантовым аналогом неравенств $H(X, Y) \geq H(X)$ и $H(X, Y) \geq H(Y)$, которые были найдены в разделе "Доказательство субаддитивности".

Докажем **неравенство треугольника**. Введем чистое состояние $|\psi_{ABC}\rangle$ так, что $\hat{\rho}_{AB} = \text{Tr}_C \hat{\rho}_{ABC} = \text{Tr}_C (|\psi_{ABC}\rangle \langle \psi_{ABC}|)$. Тогда из свойства субаддитивности следует неравенство

$$S(\hat{\rho}_{AC}) \leq S(\hat{\rho}_A) + S(\hat{\rho}_C).$$

В разделе "Разложение Шмидта" было показано, что если система, которая состоит из двух подсистем, находится в чистом состоянии, то ненулевые наборы собственных значений матриц плотности ее подсистем совпадают. Это автоматически **приводит к совпадению** численных значений **энтропий** обеих подсистем.

Разобьем квантовую систему "ABC" на подсистемы "AC" и "B". Тогда $S(\hat{\rho}_{AC}) = S(\hat{\rho}_B)$. Теперь разделим "ABC" на подсистемы "AB" и "C". В этом случае $S(\hat{\rho}_C) = S(\hat{\rho}_{AB})$. Подставляем найденные равенства в последнее неравенство и получаем

$$S(\hat{\rho}_B) \leq S(\hat{\rho}_A) + S(\hat{\rho}_{AB}).$$

Аналогично из условия субаддитивности

$$S(\hat{\rho}_{BC}) \leq S(\hat{\rho}_B) + S(\hat{\rho}_C)$$

приходим к неравенству

$$S(\hat{\rho}_A) \leq S(\hat{\rho}_B) + S(\hat{\rho}_{AB}).$$

Поскольку энтропия неотрицательна, то объединяя два доказанных результата при помощи модуля немедленно приходим к **неравенству Араки-Либ**, которое **принципиально отличается от** своего **классического аналога**.

Вогнутость квантовой энтропии

Рассмотрим матрицу плотности $\hat{\rho} = \sum_e W_e \hat{\rho}_e$ такую, что матрицы плотности $\hat{\rho}_e$ сами являются матрицами плотности смешанных состояний. Тогда задача на собственные вектора и собственные значения каждой из таких матриц имеет вид:

$$\hat{\rho}_e |\rho_{ei}\rangle = \rho_{ei} |\rho_{ei}\rangle, \text{ где } \langle \rho_{ei} | \rho_{e'i'} \rangle = \delta_{ii'} \text{ и } \sum_i \rho_{ei} = 1.$$

Наложим на вектора $|\rho_{ei}\rangle$ дополнительное условие

$$\langle \rho_{ei} | \rho_{e'i'} \rangle = \delta_{ee'} \delta_{ii'},$$

которое является обобщением свойства ортогональности проекторов на макроскопически различные состояния. Тогда:

$$\hat{\rho} |\rho_{ei}\rangle = \left(\sum_{e'} W_{e'} \hat{\rho}_{e'} \right) |\rho_{ei}\rangle = W_e \rho_{ei} |\rho_{ei}\rangle,$$

то есть вектор $|\rho_{ei}\rangle$ является собственным вектором оператора $\hat{\rho}$, отвечающим собственному значению $W_e \rho_{ei}$.

С учетом сказанного выше, получаем:

$$\begin{aligned} S(\hat{\rho}) &= - \sum_{\ell i} (W_{\ell} \rho_{\ell i}) \ln (W_{\ell} \rho_{\ell i}) = - \sum_{\ell} W_{\ell} \ln W_{\ell} \left(\sum_i \rho_{\ell i} \right) - \\ &- \sum_{\ell} W_{\ell} \left(\sum_i \rho_{\ell i} \ln \rho_{\ell i} \right) = H(X) + \sum_{\ell} W_{\ell} S(\hat{\rho}_{\ell}), \end{aligned}$$

где ансамбль $X = \{\rho_{\{i\}}_{\ell}, W_{\ell}\}$. Поскольку энтропия Шеннона всегда неотрицательна (т.е. $H(X) \geq 0$), то немедленно получаем **свойство вогнутости энтропии фон Неймана**:

$$S \left(\sum_{\ell} W_{\ell} \hat{\rho}_{\ell} \right) \geq \sum_{\ell} W_{\ell} S(\hat{\rho}_{\ell}).$$

Это свойство полностью аналогично **свойству вогнутости энтропии Шеннона**. Его также можно вывести при помощи неравенства Йенсена или из свойства субаддитивности (см., например, книгу **Дж.Прескилл, "Квантовая информация и квантовые вычисления", т.1, стр.278, М. "РХД" (2008)**). Прodelайте эти выводы самостоятельно.

Теорема о невозможности клонирования произвольного смешанного состояния

В разделе "Постулаты квантовой механики" легко была доказана теорема о невозможности клонирования произвольного чистого состояния. Имеется аналогичная теорема о невозможности клонирования произвольного смешанного состояния (так называемая "No-broadcast theorem").

Теорема: предположим, что имеется некоторое квантовое состояние, которое описывается матрицей плотности $\hat{\rho}$. Тогда невозможно создать микросистему с матрицей плотности $\hat{\rho}_{AB}$ в прямом произведении гильбертовых пространств $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ такую, что $\text{Tr}_A \hat{\rho}_{AB} = \hat{\rho}$ и $\text{Tr}_B \hat{\rho}_{AB} = \hat{\rho}$.

Доказательство этой теоремы достаточно сложно. Его детали можно найти в работе Barnum, H., C. M. Caves, C. A. Fuchs, R. Jozsa, and B. Schumacher, *Physical Review Letters* vol.76, p.2818 (1996).

Хотя точное клонирование квантового состояния невозможно, но приближенное копирование смешанного квантового состояния осуществимо. Это было показано в работе: V. Buzek and M. Hillery, *Physical Review A* 54, p.1844 (1996).

Часть 8

НЕРАВЕНСТВА БЕЛЛА И КОРРЕЛЯЦИИ В КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ

Одновременная измеримость и неизмеримость

Одним из фундаментальных вопросов квантовой физики является вопрос о том, в какой степени физические свойства микрообъектов определяются процедурой измерения и конструкцией макроприборов, использующихся в эксперименте?

Согласно Копенгагенской интерпретации квантовой механики, не имеет смысла говорить о свойствах микрообъекта без конкретизации, при помощи какого макроприбора эти свойства будут измерены. Сторонники данной интерпретации считают, что максимально доступная информация о физических свойствах микросистемы определяется набором физических характеристик, которые измеряются при помощи макроприбора одного типа. На языке квантовой механики это означает, что макроприбор раскладывает вектор состояния $|\psi\rangle$ любой микросистемы в суперпозицию макроскопически различимых состояний $|i\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle.$$

В рассматриваемом случае макроскопическая различимость эквивалентна ортогональности, то есть $\langle i | i' \rangle = \delta_{ii'}$.

Вектора $|i\rangle$ должны быть ОБЩИМИ собственными векторами операторов \hat{F}_A , \hat{G}_B и т.д. одновременно измеримых характеристик F_A , G_B и т.д. рассматриваемой микросистемы, что ведет к условию $[\hat{F}_A, \hat{G}_B] = 0$. Соответственно, если операторы между собой не коммутируют, то они не имеют общей системы собственных векторов и не могут быть одновременно измерены с нулевой дисперсией макроприбором одного типа.

Напомним, что наблюдаемые F_A и F'_A , квантовомеханические операторы которых не коммутируют, могут быть измерены одновременно, но точности их измерения (дисперсии) ΔF_A и $\Delta F'_A$ подчиняются соотношению неопределенностей Гейзенберга

$$\Delta F_A \Delta F'_A \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Например, в пузырьковой камере можно видеть трек заряженной частицы и то, как этот трек изгибается в магнитном поле. По кривизне трека легко измерить импульс частицы. Однако, произведение ширины трека Δx и разрешения по импульсу Δp для всех реальных пузырьковых камер на много порядков превосходят величину $\hbar/2$.

Везде ниже, когда мы будем говорить об одновременно измеримых величинах, всегда будем полагать, что измерения производятся с нулевой дисперсией для каждой из наблюдаемых.

В квантовой теории легко предъявить некоммутирующие между собой операторы, отвечающие физическим характеристикам одной микросистемы. Например, это могут быть операторы проекций спина $s = 1/2$ на непараллельные направления.

Напомним, что в нерелятивистском случае оператор спина $s = 1/2$ можно записать в виде вектора $\hat{\mathbf{S}} = \vec{\sigma}/2$, декартовы компоненты которого не коммутируют между собой:

$$[\hat{S}^i, \hat{S}^j] = i \epsilon^{ijk} \hat{S}^k, \text{ или } [\sigma^i, \sigma^j] = 2i \epsilon^{ijk} \sigma^k, \text{ где } \epsilon^{123} = +1$$

и σ^i – матрицы Паули, ϵ^{ijk} – полностью антисимметричный тензор третьего ранга. Операторы \hat{S}^i не обладают общей системой собственных векторов, что, с точки зрения Копенгагенской интерпретации, эквивалентно невозможности одновременного точного измерения определенного значения проекций спина $s = 1/2$ на ЛЮБЫЕ два и более непараллельных направления при помощи одного макropriбора.

Понятие об элементах физической реальности

По-видимому, в статье [A.Einstein, B.Podolsky, and N.Rosen "Can quantum mechanical description of physical reality be considered complete?", Phys. Rev.47, p.777 \(1935\)](#) был впервые поставлен вопрос о том, могут ли характеристики микросистемы, которые в квантовой теории описываются некоммутирующими операторами, существовать одновременно ("быть одновременно элементами физической реальности" по А.Эйнштейну), даже если эти характеристики невозможно совместно измерить ни одним известным макроприбором?

Предположим, что все используемые нами макроприборы чрезвычайно "грубы" для исследования микромира. Эта "грубость" может проявляться, например, в том, что микрочастицы обладают некоторыми свойствами (квантовыми числами) λ_i , которые ПРИНЦИПИАЛЬНО НЕИЗМЕРИМЫ при помощи любых макроприборов (например, в силу ограничений, накладываемых соотношением неопределенностей). Но если бы мы каким-либо образом узнали свойства λ_i , то смогли бы ТОЧНО ПРЕДСКАЗАТЬ результаты каждого эксперимента с любой микросистемой и значения всех ее физических характеристик.

Поскольку параметры λ_i неизвестны, то по ним приходится усреднять. Такое усреднение вполне может являться причиной вероятностных предсказаний квантовой теории и невозможности одновременного измерения некоторых физических характеристик. То есть не исключено, что квантовая механика – это не фундаментальная теория, а некая "термодинамика" взаимодействия "грубых" макроприборов с микромиром, которая просто фиксирует и удачно описывает сложившееся положение вещей.

Приведенные выше рассуждения носят название концепции скрытых параметров. И это не единственная попытка "улучшить" квантовую теорию, то есть сделать ее более похожей на понятную классическую физику. Причем в каждом подобном "улучшении" поднимается вопрос об одновременном существовании наблюдаемых, отвечающих некоммутирующим операторам.

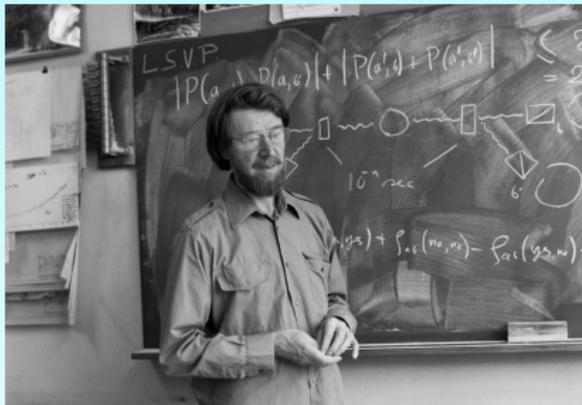
На первый взгляд может показаться, что экспериментального ответа на данный вопрос не существует. Действительно, как можно узнать о существовании того, что нельзя измерить ПО ОПРЕДЕЛЕНИЮ? Поэтому долгое время рассуждения об элементах физической реальности считались уделом философов и городских сумасшедших, а не серьезных ученых.

Неравенств Белла. Историческая справка

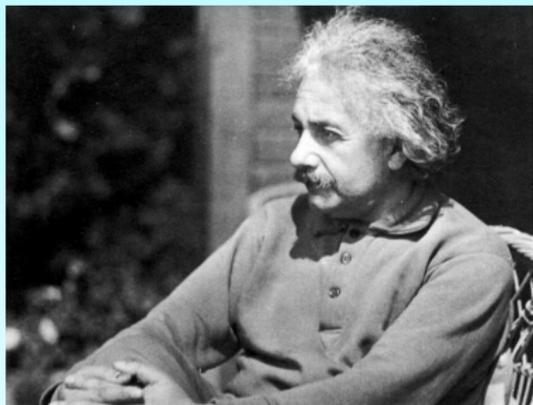
Первая удачная попытка перевести вопрос о совместном существовании элементов физической реальности, соответствующих одновременно неизмеримым величинам, из области умозрительных рассуждений в экспериментальную плоскость была предпринята Дж.Беллом в двух работах 1964-ого и 1966-ого годов (J.S.Bell, "On the Einstein-Podolsky-Rosen paradox", *Physics* 1, p.195 (1964) и J.S.Bell, "On the Problem of Hidden Variables in Quantum Mechanics", *Rev. Mod. Phys.* 38, p.447 (1966)).

В дальнейшем идеи Дж.Белла были развиты Клаузером, Хорном, Шимони и Хольтом в работе J.F.Clauser, M.A.Horne, A.Shimony and R.A.Holt, "Proposed experiment to test local hidden variable theories", *Phys. Rev. Lett.* 23, p.880 (1969). (так называемые **CHSH-неравенства**). Обычно именно эти неравенства называют неравенствами Белла, хотя сам Дж.Белл не имел к их выводу прямого отношения.

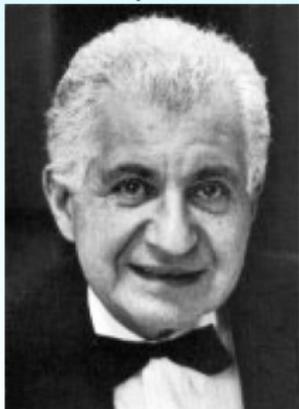
Ниже мы приведем два различных вывода CHSH-неравенства. Затем докажем, что CHSH-неравенства могут нарушаться в квантовой механике. И наконец, используя данное А.Эйнштейном определение элемента физической реальности, покажем, как только при помощи макropriборов можно попытаться экспериментально опровергнуть гипотезу об одновременном существовании элементов физической реальности.



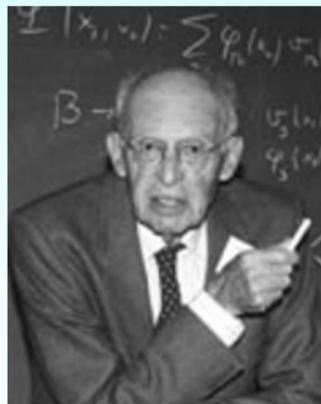
Дж. Белл (1928 – 1990)



А.Эйнштейн (1879 – 1955)



Б.Подольский (1896 – 1966)



Н.Розен (1909 – 1995)



J.F. Clauser



M.A. Horne



A. Shimony



R.A. Holt

Неравенств Белла. Основная идея

Как записать, что некоторая совокупность физических характеристик микросистемы одновременно является элементом физической реальности, даже если эта совокупность совместно не может быть измерена никаким макроприбором? Хорошая возможность заключается в предположении, что совместная вероятность одновременного существования рассматриваемой совокупности наблюдаемых неотрицательна.

Далее необходимо найти соотношение, которое:

- а) может быть получено из предположения о существовании неотрицательных совместных вероятностей и, возможно, некоторых дополнительных условий, накладываемых на процедуру измерения (обычно требуется локальность);
- б) может быть вычислено в рамках квантовой теории;
- в) поддается экспериментальной проверке с помощью макроприборов.

Предсказания пунктов а) и б) не должны полностью совпадать, чтобы можно было поставить критический эксперимент.

Простой вывод CHSH-неравенства

Пусть имеются подсистемы A и B , которые являются частями некоторой общей системы. Для подсистемы A рассмотрим две наблюдаемые F_A и F'_A , относящиеся только к этой системе. Для подсистемы B аналогично определим две наблюдаемые G_B и G'_B , которые относятся только к этой подсистеме.

Дополнительно потребуем, чтобы наблюдаемые F_A , F'_A , G_B и G'_B были **дихотомными**, то есть, чтобы спектр каждой из наблюдаемых принимал всего два значения ± 1 . Очевидно, что дихотомными переменными являются, например, **удвоенные проекции спинов** электронов или фотонов на любое направление.

Если все четыре наблюдаемые одновременно являются элементами физической реальности, то тогда **с неотрицательной вероятностью существуют** всевозможные наборы элементов их спектров $\{f_i^{(A)}, f'_j^{(A)}, g_k^{(B)}, g'_m^{(B)}\}$, даже если эти наборы невозможно измерить ни одним макроприбором. Составим из этих наборов суммы вида

$$S_{ijkm} = \left(f'_j{}^{(A)} + f_i{}^{(A)} \right) g_k{}^{(B)} + \left(f'_j{}^{(A)} - f_i{}^{(A)} \right) g'_m{}^{(B)}.$$

Легко проверить, что для любых комбинаций $\{i, j, k, m\} = \{+, -\}$ верно равенство:

$$S_{ijkm} = \pm 2.$$

Зададим выборку из $N \gg 1$ комбинаций. Пусть каждая комбинация S_{ijkm} встречается в этой выборке $N_{ijkm} \gg 1$ раз. Тогда для среднего значения величины S по данной выборке можем записать

$$|\langle S \rangle| = \left| \frac{1}{N} \sum_{i, j, k, m} S_{ijkm} N_{ijkm} \right| \leq 2.$$

Данное неравенство можно переписать в эквивалентной форме:

$$|\langle F_A G_B \rangle - \langle F_A G'_B \rangle + \langle F'_A G_B \rangle + \langle F'_A G'_B \rangle| \leq 2.$$

Таким образом, если дихотомные наблюдаемые F_A , F'_A , G_B и G'_B одновременно являются элементами физической реальности, то среднее значение величины S для любой выборки **НИКОГДА** не превзойдет по модулю двойки. Это и есть одна из форм **CHSH-неравенства**. Данное предсказание **нужно сравнить** с тем, что можно получить для значения величины $|\langle S \rangle|$ из квантовой механики.

Вывод CHSH-неравенства из условия неотрицательности совместных вероятностей

Преыдуший вывод CHSH-неравенства лишь косвенно использовал предположение о неотрицательности совместных вероятностей совокупности наблюдаемых. Теперь покажем, как это предположение может быть использовано явно.

Пусть для всех наборов $\{f_i^{(A)}, f_j^{(A)}, g_k^{(B)}, g_m^{(B)}\}$ четверные совместные вероятности

$$w\left(f_i^{(A)}, f_j^{(A)}, g_k^{(B)}, g_m^{(B)}\right) \geq 0.$$

Элементарно проверить, что любые тройные и двойные совместные вероятности также неотрицательны. Действительно, например

$$w\left(f_i^{(A)}, f_j^{(A)}, g_k^{(B)}\right) = \sum_{m=\pm} w\left(f_i^{(A)}, f_j^{(A)}, g_k^{(B)}, g_m^{(B)}\right) \geq 0$$

и

$$w\left(f_i^{(A)}, g_k^{(B)}\right) = \sum_{j=\pm} w\left(f_i^{(A)}, f_j^{(A)}, g_k^{(B)}\right) \geq 0.$$

Помимо этого совместные вероятности подчиняются естественным условиям нормировки:

$$\sum_{i,j,k,m} w \left(f_i^{(A)}, f'_j{}^{(A)}, g_k^{(B)}, g'_m{}^{(B)} \right) = 1;$$

$$\sum_{i,j,k} w \left(f_i^{(A)}, f'_j{}^{(A)}, g_k^{(B)} \right) = 1; \quad \dots \quad \text{все остальные тройные};$$

и

$$\sum_{i,k} w \left(f_i^{(A)}, g_k^{(B)} \right) = 1; \quad \dots \quad \text{плюс все остальные двойные}$$

и условиям соответствия типа: $w \left(f_i^{(A)}, g_k^{(B)} \right) \geq w \left(f_i^{(A)}, f'_j{}^{(A)}, g_k^{(B)} \right)$,

$w \left(f_i^{(A)}, g_k^{(B)}, g'_m{}^{(B)} \right) \geq w \left(f_i^{(A)}, f'_j{}^{(A)}, g_k^{(B)}, g'_m{}^{(B)} \right)$ плюс все аналогичные им.

Поскольку величины $f_i^{(A)}$, $f'_j{}^{(A)}$, $g_k^{(B)}$ и $g'_m{}^{(B)}$ принимают значения только ± 1 , то любое суммирование по индексам может быть записано в явной форме следующим образом:

$$\begin{aligned} w(\dots, x_\alpha, y_\beta, \dots) &= \sum_{\dots \ell \dots} w(\dots, x_\alpha, h_\ell, y_\beta, \dots) = \\ &= w(\dots, x_\alpha, +h_\ell, y_\beta, \dots) + w(\dots, x_\alpha, -h_\ell, y_\beta, \dots). \end{aligned}$$

Теперь можно начать доказательство. Рассмотрим величину

$$\Lambda \left(f_i^{(A)}, f_j^{(A)}, g_k^{(B)}, g_m^{(B)} \right) = w \left(f_i^{(A)}, g_k^{(B)} \right) - w \left(f_i^{(A)}, g_m^{(B)} \right) + w \left(f_j^{(A)}, g_k^{(B)} \right) + w \left(f_j^{(A)}, g_m^{(B)} \right) - w \left(f_j^{(A)} \right) - w \left(g_k^{(B)} \right).$$

Проверим, что эта величина удовлетворяет неравенству

$$-1 \leq \Lambda \left(f_i^{(A)}, f_j^{(A)}, g_k^{(B)}, g_m^{(B)} \right) \leq 0.$$

I) Начнем с неположительности $\Lambda(\dots)$. Имеем

$$\begin{aligned} 0 &\leq w \left(f_j^{(A)}, -g_k^{(B)}, -g_m^{(B)} \right) = w \left(f_j^{(A)}, -g_k^{(B)} \right) - w \left(f_j^{(A)}, -g_k^{(B)}, g_m^{(B)} \right) = \\ &= w \left(f_j^{(A)} \right) - w \left(f_j^{(A)}, g_k^{(B)} \right) - w \left(f_j^{(A)}, g_m^{(B)} \right) + w \left(f_j^{(A)}, g_k^{(B)}, g_m^{(B)} \right). \end{aligned}$$

Далее

$$\begin{aligned} w \left(f_j^{(A)}, g_k^{(B)}, g_m^{(B)} \right) &= w \left(f_i^{(A)}, f_j^{(A)}, g_k^{(B)}, g_m^{(B)} \right) + w \left(-f_i^{(A)}, f_j^{(A)}, g_k^{(B)}, g_m^{(B)} \right) \leq \\ &\leq w \left(f_i^{(A)}, g_m^{(B)} \right) + w \left(-f_i^{(A)}, g_k^{(B)} \right) = w \left(f_i^{(A)}, g_m^{(B)} \right) + w \left(g_k^{(B)} \right) - w \left(f_i^{(A)}, g_k^{(B)} \right). \end{aligned}$$

Подставив последнее неравенство в предпоследнее немедленно получаем утверждение о неположительности $\Lambda(\dots)$.

II) Теперь докажем, что $\Lambda(\dots)$ превосходит величину "−1".

$$\begin{aligned}
 0 &\leq w\left(-f'_j{}^{(A)}, -g_k^{(B)}, -g'_m{}^{(B)}\right) = w\left(-g_k^{(B)}, -g_k^{(B)}\right) - w\left(f'_j{}^{(A)}, -g_k^{(B)}, -g'_m{}^{(B)}\right) = \\
 &= w\left(-g_k^{(B)}\right) - w\left(-g_k^{(B)}, g'_m{}^{(B)}\right) - w\left(f'_j{}^{(A)}, -g_k^{(B)}, -g'_m{}^{(B)}\right) = \\
 &= 1 - w\left(g_k^{(B)}\right) - w\left(g'_m{}^{(B)}\right) + w\left(g_k^{(B)}, g'_m{}^{(B)}\right) - w\left(f'_j{}^{(A)}, -g_k^{(B)}, -g'_m{}^{(B)}\right) = \\
 &= 1 - w\left(f'_j{}^{(A)}\right) - w\left(g_k^{(B)}\right) - w\left(g'_m{}^{(B)}\right) + w\left(f'_j{}^{(A)}, g_k^{(B)}\right) + w\left(f'_j{}^{(A)}, g'_m{}^{(B)}\right) + \\
 &+ w\left(g_k^{(B)}, g'_m{}^{(B)}\right) - w\left(f'_j{}^{(A)}, g_k^{(B)}, g'_m{}^{(B)}\right) = 1 - w\left(f'_j{}^{(A)}\right) - w\left(g_k^{(B)}\right) + \\
 &+ w\left(f'_j{}^{(A)}, g_k^{(B)}\right) + w\left(f'_j{}^{(A)}, g'_m{}^{(B)}\right) + \left[w\left(-f'_j{}^{(A)}, g_k^{(B)}, g'_m{}^{(B)}\right) - w\left(g'_m{}^{(B)}\right)\right].
 \end{aligned}$$

Воспользуемся неравенством (докажите его самостоятельно)

$$w\left(-f'_j{}^{(A)}, g_k^{(B)}, g'_m{}^{(B)}\right) - w\left(g'_m{}^{(B)}\right) \leq w\left(f_i{}^{(A)}, g_k^{(B)}\right) - w\left(f_i{}^{(A)}, g'_m{}^{(B)}\right),$$

тогда

$$0 \leq 1 - w\left(f_j^{(A)}\right) - w\left(g_k^{(B)}\right) + w\left(f_j^{(A)}, g_k^{(B)}\right) + w\left(f_j^{(A)}, g_m^{(B)}\right) + \\ + w\left(f_i^{(A)}, g_k^{(B)}\right) - w\left(f_i^{(A)}, g_m^{(B)}\right) = 1 + \Lambda\left(f_i^{(A)}, f_j^{(A)}, g_k^{(B)}, g_m^{(B)}\right).$$

Таким образом доказана и вторая часть неравенства.

III) На заключительном этапе доказательства распишем подробно, например, выражение для $\langle F_A G_B \rangle$. Имеем:

$$\langle F_A G_B \rangle = \sum_{i,k} f_i^{(A)} g_k^{(B)} w\left(f_i^{(A)}, g_k^{(B)}\right) = \\ = w(+1, +1) + w(-1, -1) - w(+1, -1) - w(-1, +1).$$

Аналогично можно расписать $\langle F_A G'_B \rangle$, $\langle F'_A G_B \rangle$ и $\langle F'_A G'_B \rangle$. Тогда простыми (но несколько длинными и нудными) алгебраическими преобразованиями находим, что

$$\langle F_A G_B \rangle - \langle F_A G'_B \rangle + \langle F'_A G_B \rangle + \langle F'_A G'_B \rangle = \Lambda(+1, +1, +1 + 1) + \\ + \Lambda(-1, -1, -1 - 1) - \Lambda(+1, -1, +1 - 1) - \Lambda(-1, +1, -1 + 1).$$

Поскольку

$$\begin{aligned} -2 &\leq \Lambda(+1, +1, +1 + 1) + \Lambda(-1, -1, -1 - 1) \leq 0; \\ 0 &\leq -\Lambda(+1, -1, +1 - 1) - \Lambda(-1, +1, -1 + 1) \leq 2, \end{aligned}$$

то

$$|\langle F_A G_B \rangle - \langle F_A G'_B \rangle + \langle F'_A G_B \rangle + \langle F'_A G'_B \rangle| \leq 2.$$

Таким образом мы получили **CHSH-неравенство** другим способом. Именно, **из условия неотрицательности** четверных **совместных вероятностей**. Заметим, что при доказательстве неявно было также **использовано условие отсутствия** каких-либо **корреляций** между наблюдаемыми F_A , F'_A , G_B и G'_B .

Впервые такой вывод CHSH-неравенства был дан в работе **W.M. de Muynck**, "The Bell inequalities and their irrelevance to the problem of locality in quantum mechanics", Phys. Lett. 114A, p.65 (1986). Более ясный и простой вариант можно найти в статье **А.В.Белинского** "Неравенства Белла без предположения о локальности", "Успехи физических наук" т.164, N2, стр.231 (1994).



Willem M. de Muynck
Eindhoven University of Technology
Netherlands



А.В.Белинский
МГУ им. М.В.Ломоносова
Россия

Граница Цирельсона

CHSH-неравенство получено в предположении, что наблюдаемые F_A , F'_A , G_B и G'_B одновременно являются элементами физической реальности. Естественно задаться вопросом, может ли (и если может, то при каких условиях) CHSH-неравенство нарушаться в нерелятивистской квантовой механике?

Чтобы ответить на этот вопрос, сопоставим наблюдаемым F_A , F'_A , G_B и G'_B эрмитовы операторы \hat{F}_A , \hat{F}'_A , \hat{G}_B и \hat{G}'_B . Пусть для наблюдаемых, относящихся к одной подсистеме (A или B), эти операторы не коммутируют, то есть

$$[\hat{F}_A, \hat{F}'_A] \neq 0 \quad \text{и} \quad [\hat{G}_B, \hat{G}'_B] \neq 0.$$

Согласно **теореме Эберхарда** о локальности измерений (локальности квантовой теории на уровне макроприборов), можно написать следующие дополнительные коммутационные условия на операторы \hat{F}_A , \hat{F}'_A , \hat{G}_B и \hat{G}'_B :

$$[\hat{F}_A, \hat{G}_B] = [\hat{F}_A, \hat{G}'_B] = [\hat{F}'_A, \hat{G}_B] = [\hat{F}'_A, \hat{G}'_B] = 0.$$

Тогда, согласно **Копенгагенской интерпретации**, имеет смысл говорить, например, об одновременном существовании наблюдаемых F_A и G_B , но нельзя говорить об одновременном существовании наблюдаемых F_A и F'_A .

Поскольку наблюдаемые F_A , F'_A , G_B и G'_B отвечают дихотомическим величинам, то их операторы подчиняются дополнительно условию

$$\hat{F}_A^2 = \hat{F}'_A{}^2 = \hat{G}_B^2 = \hat{G}'_B{}^2 = \hat{1}.$$

Определим следующий оператор:

$$\hat{S} = \hat{F}_A \hat{G}_B - \hat{F}_A \hat{G}'_B + \hat{F}'_A \hat{G}_B + \hat{F}'_A \hat{G}'_B.$$

Тогда:

$$\begin{aligned} (2\sqrt{2}) \hat{1} - \hat{S} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{F}_A^2 + \hat{F}'_A{}^2 + \hat{G}_B^2 + \hat{G}'_B{}^2) - \hat{S} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{F}'_A - \frac{\hat{G}_B + \hat{G}'_B}{\sqrt{2}} \right)^2 + \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{F}_A - \frac{\hat{G}_B - \hat{G}'_B}{\sqrt{2}} \right)^2. \end{aligned}$$

Усредняем это равенство по состоянию $\hat{\rho}$ произвольной микро-системы получаем:

$$0 \leq 2\sqrt{2} \langle \hat{1} \rangle_{\rho} - \langle S \rangle_{\rho} = 2\sqrt{2} - \langle S \rangle_{\rho}.$$

Таким образом

$$\langle S \rangle_{\rho} \leq 2\sqrt{2}.$$

Полностью аналогично можно показать, что

$$\langle S \rangle_{\rho} \geq -2\sqrt{2}.$$

Объединяя оба неравенства в одно при помощи модуля

$$|\langle S \rangle_{\rho}| \leq 2\sqrt{2}.$$

приходим к выражению для так называемой **границы Цирельсона** квантовых корреляций (B.S. Cirel'son, "Quantum generalizations of Bell's inequality", "Letters in Mathematical Physics", Vol.4, p.93 (1980)). Перепишем последнее неравенство в терминах средних для наблюдаемых F_A , F'_A , G_B и G'_B .

Имеем:

$$\left| \langle F_A G_B \rangle_\rho - \langle F_A G'_B \rangle_\rho + \langle F'_A G_B \rangle_\rho + \langle F'_A G'_B \rangle_\rho \right| \leq 2\sqrt{2}.$$

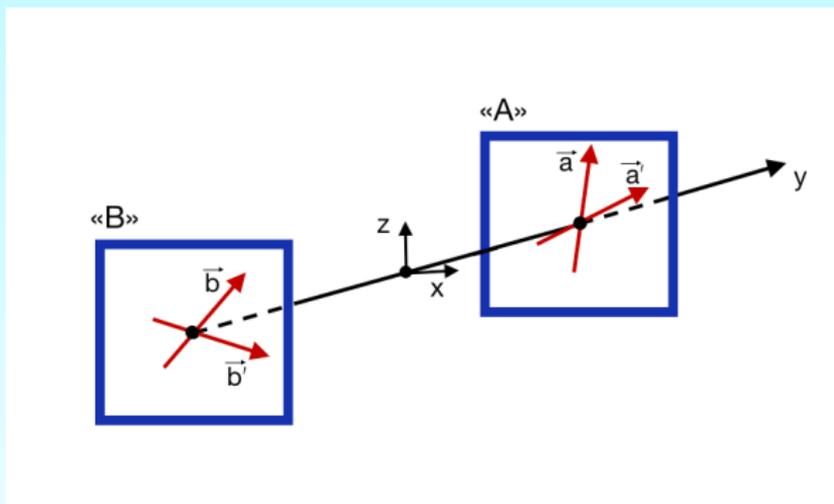
Этот результат надо сравнить с CHSH-неравенством:

$$|\langle F_A G_B \rangle - \langle F_A G'_B \rangle + \langle F'_A G_B \rangle + \langle F'_A G'_B \rangle| \leq 2.$$

Из сравнения обоих неравенств видно, что принципиально в квантовой теории CHSH-неравенство может нарушаться. Если имеется путь экспериментального подтверждения этого нарушения, то появляется возможность объективной проверки, являются ли наблюдаемые F_A , F'_A , G_B и G'_B одновременно элементами физической реальности, или это не имеет места, как утверждает квантовая механика. Более аккуратно: нарушение CHSH-неравенства может подтвердить правоту квантовой теории. Его выполнение квантовой теории НЕ противоречит.

Остается важный **вопрос**: существуют ли такие квантовые состояния $|\Psi\rangle$ или $\hat{\rho}$ и наблюдаемые F_A , F'_A , G_B , G'_B , на которых в реальных экспериментах можно достичь границы Цирельсона?

Запутанные состояния вступают в игру



Рассмотри мысленный эксперимент, в котором подсистема A отвечает фермиону, распространяющемуся вдоль оси " y ", подсистема B – фермиону, который движется против направления оси " y ". Наблюдаемые F_A и F'_A соответствуют удвоенным проекциям спина фермиона A на направления \vec{a} и \vec{a}' . Наблюдаемые G_B и G'_B – удвоенным проекциям спина фермиона B на направления \vec{b} и \vec{b}' соответственно. Пусть все четыре направления непараллельны друг другу. Их удобно выбрать лежащими в плоскостях, которые параллельны плоскости (x, z) , как это показано на рисунке.

Ответ на вопрос из предыдущего параграфа: для достижения границы Цирельсона в квантовой механике можно использовать белловское состояние

$$\begin{aligned} |\Psi^-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+\rangle^{(A)} |-\rangle^{(B)} - |-\rangle^{(A)} |+\rangle^{(B)} \right) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}^{(A)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}^{(B)} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}^{(A)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}^{(B)} \right). \end{aligned}$$

Рассмотрим направление \vec{a} , которое задается единичным вектором $\vec{a} = (\sin \theta_a, 0, \cos \theta_a)$. Тогда оператор \hat{F}_A можно записать как

$$\hat{F}_A = \left(\vec{a} \vec{\sigma}^{(A)} \right) = \sigma_x^{(A)} \sin \theta_a + \sigma_z^{(A)} \cos \theta_a.$$

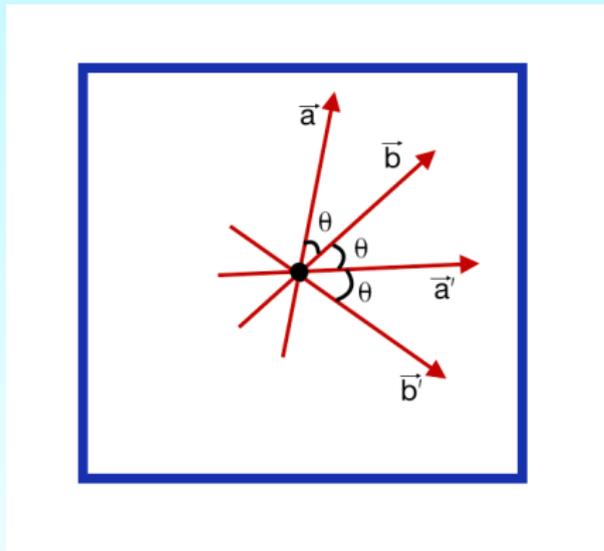
Абсолютно аналогичные формулы имеют место для операторов \hat{F}'_A , \hat{G}_B и \hat{G}'_B . Тогда

$$\langle F_A G_B \rangle_{\Psi^-} \equiv \left\langle \Psi^- \left| \hat{F}_A \hat{G}_B \right| \Psi^- \right\rangle = -\cos(\theta_a - \theta_b) = -\cos \theta_{ab}.$$

Не представляет труда вычислить оставшиеся средние, которые входят в CHSH-неравенство.

В итоге

$$|\langle S \rangle_{\psi^-}| = |\cos \theta_{ab} - \cos \theta_{ab'} + \cos \theta_{a'b} + \cos \theta_{a'b'}|.$$



Максимум $|\langle S \rangle_{\psi^-}|$ достигается для углов $\theta_{ab} = \theta_{ba'} = \theta_{a'b} = \pi/4$ и $\theta_{ab'} = 3\pi/4$. В этом случае

$$|\langle S \rangle_{\psi^-}| = \left| 3 \cos \frac{\pi}{4} - \cos \frac{3\pi}{4} \right| = \left| 4 \cos \frac{\pi}{4} \right| = 2\sqrt{2}$$

попадает на границу Цирельсона и нарушает CHSH-неравенство!

А теперь - пресловутая нелокальность!

Практически общим местом стало утверждение, что нарушение CHSH-неравенств является следствием/доказательством нелокальности квантовой теории. Это не совсем так.

Вспомним, что согласно теореме Эберхарда даже нерелятивистская квантовая механика локальна на уровне макроприборов. Этот факт активно использовался нами при вычислении границы Цирельсона, которая превосходит верхнюю границу для CHSH-неравенства. Поэтому на уровне измерений нарушение CHSH-неравенства никак не связано с нелокальностью.

Однако при выводе CHSH-неравенства использовалось другое предположение: отсутствие корреляций какого угодно рода на микроскопическом уровне между любыми элементами и наборами элементов спектров всех четырех рассматриваемых наблюдаемых. Это допущение как раз и позволяет нам вводить независимые вероятности, суммировать их, пользоваться условиями нормировки и соответствия. Но условие независимости на микроуровне прямо нарушается в НКМ!

Действительно, во-первых, белловское состояние $|\Psi^-\rangle$ дает абсолютную (анти)корреляцию по проекциям спинов фермионов A и B на любое направление. Поэтому данные проекции и соответствующие им элементы спектров рассматриваемых наблюдаемых независимыми считать нельзя.

Во-вторых, вероятности некоторых совместных распределений, вычисленные в НКМ по состоянию $|\Psi^-\rangle$ оказываются отрицательными при углах, которые обеспечивают максимальное нарушение CHSH-неравенства. Например

$$w(f_+^{(A)}, f_-'^{(A)}, g_-'^{(B)}) = \langle \Psi^- | \hat{P}_{\vec{a}}^{(+)} \hat{P}_{\vec{a}'}^{(-)} \hat{P}_{\vec{b}'}^{(-)} | \Psi^- \rangle = \frac{1}{8} (1 - \sqrt{2}) \leq 0,$$

где $\hat{P}_{\vec{n}}^{(\pm)}$ – проекторы на состояния с проекцией спина $\pm 1/2$ на направление \vec{n} . Этот результат и аналогичные ему косвенно задают корреляции и ограничения для наборов значений спектров наблюдаемых F_A, F'_A, G_B и G'_B .

Тем не менее, при наличии запутанности нелокальность НКМ на микроуровне не только можно, но и нужно рассматривать как основной (но не единственный!) источник корреляций и, следовательно, причину нарушения CHSH-неравенства.

Так о чем же тогда говорит нам нарушение CHSH-неравенств в НКМ? О том, что

- а) хотя наблюдаемые F_A , F'_A , G_B и G'_B одновременно **являются** элементами физической реальности, но на микроуровне имеются корреляции между этими наблюдаемыми, которые и нарушают CHSH-неравенства;
- б) наблюдаемые F_A , F'_A , G_B и G'_B одновременно **НЕ являются** элементами физической реальности и дополнительно имеются корреляции между наблюдаемыми на микроуровне; оба условия нарушают CHSH-неравенства;
- в) наблюдаемые F_A , F'_A , G_B и G'_B одновременно **НЕ являются** элементами физической реальности, но при этом корреляции между наблюдаемыми отсутствуют. Тогда первое условие должно нарушать CHSH-неравенство.

Чтобы делать уверенные суждения только о возможности одновременного существования/несуществования элементов физической реальности, следует избавиться от источников потенциальных корреляций. Скажем, от нелокальности можно избавиться перейдя к квантовой теории поля (КТП), которая локальна по построению (например, из-за принципа микропричинности Н.Н.Боголюбова).

CHSH-неравенство и сепарабельные состояния

Заметим, что запутанность квантовых состояний (которая является одним из источников корреляций) при нарушении CHSH-неравенства играет ключевую роль. Ниже мы докажем, что **сепарабельные состояния** вида

$$\hat{\rho} = \sum_{\ell} W_{\ell} \hat{\rho}_{\ell}^{(A)} \otimes \hat{\rho}_{\ell}^{(B)}$$

НЕ нарушают CHSH-неравенства даже если

$$[\hat{F}_A, \hat{F}'_A] \neq 0 \quad \text{и} \quad [\hat{G}_B, \hat{G}'_B] \neq 0.$$

Таким образом пункт "в)" из предыдущего слайда можно будет исключить.

Начнем доказательство. Для двойных корреляторов имеем

$$\langle F_A G_B \rangle_{\rho} = \text{Tr} \left(\hat{\rho} \hat{F}_A \hat{G}_B \right) = \sum_{\ell} W_{\ell} f_{\ell}^{(A)} g_{\ell}^{(B)},$$

где $f_{\ell}^{(A)} = \text{Tr}_A \left(\hat{\rho}_{\ell}^{(A)} \hat{F}_A \right)$ и $g_{\ell}^{(B)} = \text{Tr}_B \left(\hat{\rho}_{\ell}^{(B)} \hat{G}_B \right)$.

Очевидно, что если операторы \hat{F}_A и \hat{G}_B являются операторами дихотомных наблюдаемых, то $|f_\ell| \leq 1$ и $|g_\ell| \leq 1$. Воспользуемся этим фактом и известным неравенством $|f + g| \leq |f| + |g|$. Тогда

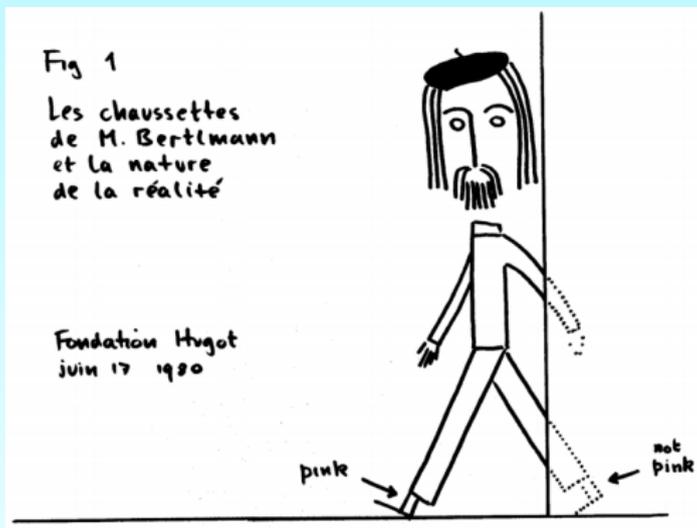
$$\begin{aligned}
 \left| \langle S \rangle_\rho \right| &= \left| \langle F_A G_B \rangle_\rho - \langle F_A G'_B \rangle_\rho + \langle F'_A G_B \rangle_\rho + \langle F'_A G'_B \rangle_\rho \right| = \\
 &= \left| \sum_\ell W_\ell \left\{ f_\ell^{(A)} g_\ell^{(B)} - f_\ell^{(A)} g'_\ell^{(B)} + f'_\ell^{(A)} g_\ell^{(B)} + f'_\ell^{(A)} g'_\ell^{(B)} \right\} \right| \leq \\
 &\leq \sum_\ell W_\ell \left\{ \left| f_\ell^{(A)} g_\ell^{(B)} - f_\ell^{(A)} g'_\ell^{(B)} \right| + \left| f'_\ell^{(A)} g_\ell^{(B)} + f'_\ell^{(A)} g'_\ell^{(B)} \right| \right\} \leq \\
 &\leq \sum_\ell W_\ell \left\{ \left| f_\ell^{(A)} \right| \left| g_\ell^{(B)} - g'_\ell^{(B)} \right| + \left| f'_\ell^{(A)} \right| \left| g_\ell^{(B)} + g'_\ell^{(B)} \right| \right\} \leq \\
 &\leq \sum_\ell W_\ell \left\{ \left| g_\ell^{(B)} - g'_\ell^{(B)} \right| + \left| g_\ell^{(B)} + g'_\ell^{(B)} \right| \right\} \leq 2 \sum_\ell W_\ell = 2.
 \end{aligned}$$

Все доказано. Кстати, попутно мы получили еще один критерий сепарабельности, ведь любое запутанное состояние должно нарушать CHSH-неравенство. Это так называемый **критерий сепарабельности по Беллу**.

Носки профессора Бертлмана, запутанность и CHSH-неравенство

В своем докладе "Bertlmann's socks and the nature of reality" ("Носки Бертлмана и природа реальности"), прочитанном в Колледж де Франс 17 июня 1980 года и опубликованном в книге J.S. Bell, "Speakable and Unspeakable in Quantum Mechanics", "Cambridge University Press", Cambridge (1987), Джон Белл приводит красивый пример, который еще раз подчеркивает **важность одновременной неизмеримости** наблюдаемых характеристик микросистемы для нарушения CHSH-неравенства.

Приведем тут вольный перевод основной идеи статьи: *"Дилетант, который не утруждал себя изучением квантовой механики, будет совершенно не впечатлен корреляционными свойствами запутанных состояний. Он сразу же укажет на множество примеров аналогичных корреляций, которые можно найти в повседневной жизни. Широко известен случай с носками профессора Бертлмана. Профессор Бертлман всегда носит носки разных цветов. Совершенно невозможно угадать какого цвета будет носок в данный день на данной ноге профессора."*



Но если Вы увидели (см. рисунок), что один носок Бертлмана розового цвета, то можете быть абсолютно уверены, что на другой ноге будет носок нерозового цвета, даже если Вы не видите эту ногу. Таким образом, наблюдение цвета первого носка и знание привычек профессора Бертлмана немедленно дает нам информацию о втором носке. Если не удивляться странному поведению профессора Бертлманна, то в носочной антикорреляции нет никакой тайны. И из этой привычки никак нельзя получить нарушение "носочного CHSH-неравенства".



**Носки профессора
Рейнхолда Бертлмана**



**и сам профессор
в 2010 году**

Очевиден и ответ, почему "носочное CHSH-неравенство" не может быть нарушено. Сколько бы не было разноцветных носков у профессора Бертлмана, их всегда можно сложить в одну общую кучу. А потом эту кучу разделить на любое количество меньших куч. Таким образом все совместные вероятности существования носков разного цвета неотрицательны. А это, как мы видели выше, не может привести к нарушению CHSH-неравенства.

Обратная связь с автором

Мне очень хотелось сделать интересный и современный курс, который бы показал студентам красоту и глубину квантовой теории. Удалось это или нет, судить слушателям и читателям (почти уверен, что курс будет гулять “по интернетам”). Очевидно, что написать столько текста и не сделать ни одной ошибки в формулах или опечатки в словах абсолютно невозможно. Поэтому у меня просьба, если кто найдет ошибку, опечатку или, упаси боже, “дырку” в доказательстве какого-либо утверждения, свяжитесь пожалуйста с автором по e-mail и сообщите ему о своей находке. Вознаграждение не предлагаю. :)

Если у кого-то возникнут пожелания, какие еще интересные вопросы можно было бы включить в курс, я с удовольствием рассмотрю эти предложения (но не обещаю, что приму).

e-mail для связи 679nik@mail.ru, в теме письма просьба указать **“Обсуждение лекций по матрице плотности”**, чтобы мне было легче находить соответствующие сообщения.

P.S. Работы, опровергающие квантовую физику и теорию относительности, не рассматриваю. Дискуссии на эти темы не веду.