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 макроприборов. 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 $|\,\psi_\ell\,\rangle$ может быть конечное или бесконечное число. Вектора $|\,\psi_1\,\rangle$, $|\,\psi_2\,\rangle$, ... 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 $|\psi_\ell\rangle$, 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_ℓ, характеризующих данный макроприбор.

Вероятности W_ℓ 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_ℓ 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 $\hat{P}_\psi$ 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 $\mathbf{Tr}\,\hat{\rho} = 1$;

г) след квадрата матрицы плотности $\mathbf{Tr}\,\hat{\rho}^2 = 1$;

д) среднее значение любой наблюдаемой A вычисляется по формуле: $\langle A \rangle_{\rho} = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{A}\right)$.

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:

$$\mathbf{Tr}\hat{\rho} = \sum_i \langle\, n_i \,|\, \hat{\rho} \,|\, n_i \,\rangle = \sum_i \langle\, n_i \,|\, \psi \,\rangle \langle\, \psi \,|\, n_i \,\rangle = \sum_i \langle\, \psi \,|\, n_i \,\rangle \langle\, n_i \,|\, \psi \,\rangle =$$
$$= \langle\, \psi \,| \left(\sum_i |\, n_i \,\rangle \langle\, n_i \,| \right) |\, \psi \,\rangle = \left\langle\, \psi \,\middle|\, \hat{1}_n \,\middle|\, \psi \,\right\rangle = \langle\, \psi \,|\, \psi \,\rangle = 1;$$

г) легко следует из свойств проектора;

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

Как строить матрицу плотности чистого состояния $|\,\psi\,\rangle$?

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

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

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 $\hat{P}_{\psi_\ell} = |\,\psi_\ell\,\rangle\,\langle\,\psi_\ell\,|$ на состояния $|\,\psi_\ell\,\rangle$. Из физики задачи ясно, что каждый проектор должен "срабатывать" с вероятностью W_ℓ. 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 $\mathbf{Tr}\,\hat{\rho} = 1$;

г) след квадрата матрицы плотности $\mathbf{Tr}\,\hat{\rho}^2 \leq 1$; равенство достигается только для чистых состояний;

д) среднее значение любой наблюдаемой A вычисляется по формуле: $\langle A \rangle_\rho = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{A}\right)$.

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:

$$\mathbf{Tr}\hat{\rho} = \sum_i \langle n_i \,|\, \hat{\rho} \,|\, n_i \rangle = \sum_i \sum_\ell W_\ell \langle n_i \,|\, \hat{\rho}_\ell \,|\, n_i \rangle = \sum_\ell W_\ell \sum_i \langle n_i \,|\, \hat{\rho}_\ell \,|\, n_i \rangle =$$
$$= \sum_\ell W_\ell\, \mathbf{Tr}\hat{\rho}_\ell = \sum_\ell W_\ell = 1.$$

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 $\mu = \mathbf{Tr}\,\hat{\rho}^2$ 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):

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

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

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

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 $\mathbf{Tr}\,\hat{\rho}^2 = \frac{3}{2} > 1$. Это лишний раз демонстрирует важность свойства г) 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 к смешанное состояние. Из свойства а) следует, что коэффициенты a и $\vec{b}$ – действительные. Далее, по свойству в) находим, что

$$1 = \mathbf{Tr}\hat{\rho} = a\,\mathbf{Tr}\hat{1} = 2a \quad \Rightarrow \quad a = \frac{1}{2}.$$

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

При помощи свойства д) получаем:

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

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

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

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

где **вектор поляризации** $\vec{p} = 2\left\langle \vec{S} \right\rangle_{\rho}$. 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 Глизона (1957 г.)

Вопрос: насколько общим является формализм матрицы плотности?

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

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) $W(\hat{1}) \equiv W\left(\sum\limits_\ell \hat{P}_\ell\right) = 1$ **– 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** $\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_1\,\hat{P}_2\right) = 0$.

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 Глизона 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.

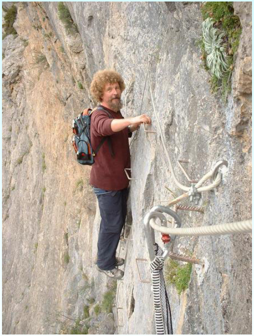
Однако использование Глизоном "интуитивно ясных" свойств вероятности в условии теоремы часто подвергается критике: "В самом деле, теорема Глизона в настоящее время по праву является известным и общепринятым результатом, который лежит в основании квантовой теории. Это строгая математическая теорема, как 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 Глизона.*"

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

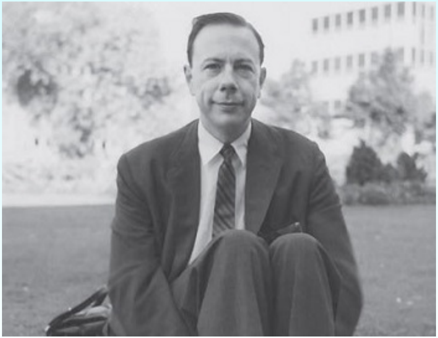
В двумерном пространстве свойство "3)" не работает. Для иллюстрации можно рассмотреть два фермиона с различными поляризациями $\vec{a}$ и $\vec{b}$ в чистом состоянии , которые описываются проекционными операторами $\hat{P}_a = \frac{1}{2}\,(\hat{1} + (\vec{a}\,\vec{\sigma}))$ и $\hat{P}_b = \frac{1}{2}\,\left(\hat{1}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

С одной стороны, $\mathrm{Tr}\left(\hat{P}_a\,\hat{P}_b\right) = 1 + \left(\vec{a}\,\vec{b}\right) = 0$ 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:

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

2) Имеется альтернативное определение степени совпадения по Ульману:

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

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):

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

4) Следовая метрика (trace distance):

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

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):

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

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. $F_i\left(\hat{\rho}_A, \sum\limits_\ell W_\ell \hat{\rho}_\ell\right) \geq \sum\limits_\ell W_\ell F_i\left(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_\ell\right)$ – **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**:

$$D_i(\hat\rho_A, \hat\rho_B) \le D_i(\hat\rho_A, \hat\rho_C) + D_i(\hat\rho_C, \hat\rho_B).$$

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. $D_{Tr}\left(\hat\rho_A, \sum_\ell W_\ell \hat\rho_\ell\right) \le \sum_\ell W_\ell D_{Tr}(\hat\rho_A, \hat\rho_\ell)$ – **выпуклость** следовой метрики;

4. $D_B^2(\hat\rho_A, \hat\rho_B)/2 = 1 - F_1(\hat\rho_A, \hat\rho_B) \le D_{Tr}(\hat\rho_A, \hat\rho_B) \le \sqrt{1 - F_1^2(\hat\rho_A, \hat\rho_B)}$;

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 $\hat U_\sigma$, которое приводит эту матрицу к диагональному виду $\hat\sigma_{diag} = \hat U_\sigma\,\hat\sigma\,\hat U_\sigma^\dagger$. Отсюда получаем, что:

$$F_1(\hat\rho_A,\hat\rho_B) = \mathbf{Tr}\,\hat\sigma = \mathbf{Tr}\left(\hat U_\sigma^\dagger\,\hat U_\sigma\hat\sigma\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat U_\sigma\hat\sigma\,\hat U_\sigma^\dagger\right) = \mathbf{Tr}\,\hat\sigma_{diag} = \sum_i \sigma_i.$$

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 $\hat{U}_\rho$ 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:

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

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

$$\hat\rho_A = \begin{pmatrix} 3/4 & 0 \\ 0 & 1/4 \end{pmatrix} \qquad \text{и} \qquad \hat\rho_B = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/6 \\ 1/6 & 1/2 \end{pmatrix}.$$

Матрица $\hat\rho = \hat\rho_A^{1/2}\,\hat\rho_B\,\hat\rho_A^{1/2} = \hat\rho_A = \dfrac{1}{24}\begin{pmatrix} 9 & \sqrt3 \\ \sqrt3 & 3 \end{pmatrix}$ **имеет собственные значения** $\rho_{1,\,2} = \dfrac{1}{4\sqrt3}\left(\sqrt3 \pm 1\right) \geq 0$ **(т.е. эта матрица, действительно, положительно определена). Поэтому**

$$F_1(\hat\rho_A,\,\hat\rho_B) = \sum_{i=1}^{2}\sqrt{\rho_i} = \frac{1}{2\sqrt[4]{3}}\left(\sqrt{\sqrt3+1}+\sqrt{\sqrt3-1}\right) \approx 0,95.$$

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:**

$$D_{Tr}(\hat\rho_A,\,\hat\rho_B) = \frac12\sum_i|\sigma_i| = \sqrt{13}/12 \approx 0,30.$$

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

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

находим, что

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

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

$$D_{HS}(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B) = \sqrt{\mathbf{Tr}\,(\hat{\sigma})^2} = \frac{1}{2}\sqrt{\mathbf{Tr}\begin{pmatrix} 1/2 & -1/3 \\ -1/3 & -1/2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1/2 & -1/3 \\ -1/3 & -1/2 \end{pmatrix}} =$$

$$= \frac{\sqrt{26}}{12} \approx 0,42.$$

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

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

где $\mathbf{Tr}_B$ 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:

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

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:

$$\mathbf{Tr}\left(\hat{F}\hat{\rho}\right) = \sum_{i,j}\left\langle\, n_{ij}\,\middle|\,\hat{F}\hat{\rho}\,\middle|\,n_{ij}\,\right\rangle = \sum_i\sum_j \langle\, b_j\,|\,\langle\, a_i\,|\,\hat{F}\hat{\rho}\,|\,a_i\,\rangle\,|\,b_j\,\rangle =$$
$$= \sum_j\sum_i\sum_k \left\langle\, a_i\,\middle|\,\hat{F}\,\middle|\,a_k\,\right\rangle \langle\, b_j\,|\,\langle\, a_k\,|\,\hat{\rho}\,|\,a_i\,\rangle\,|\,b_j\,\rangle.$$

С другой стороны,

$$\mathbf{Tr}\left(\hat{F}\hat{\rho}\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{F}\hat{\rho}_A\right) = \sum_i\sum_k \left\langle\, a_i\,\middle|\,\hat{F}\,\middle|\,a_k\,\right\rangle \langle\, a_k\,|\,\hat{\rho}_A\,|\,a_i\,\rangle.$$

Сравнивая обе формулы для $\mathbf{Tr}\left(\hat{F}\hat{\rho}\right)$, 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 $\hat{\rho}_A = \mathbf{Tr}_B\hat{\rho}$, что и требовалось доказать. Для практических вычислении 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:

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

а их общая волновая функция:

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

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:

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

Тогда в этом базисе получаем:

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

Матрица плотности частицы "1" равна

$$\hat{\rho}^{(1)} = \mathbf{Tr}_{(2)}\,\hat{\rho} = \left\langle +^{(2)}\,\middle|\,\hat{\rho}\,\middle|\,+^{(2)}\right\rangle + \left\langle -^{(2)}\,\middle|\,\hat{\rho}\,\middle|\,-^{(2)}\right\rangle =$$

$$= \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} + \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix} = \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} = \tfrac{1}{2}\,\hat{1},$$

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

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

Легко видеть, что $\mathbf{Tr}\,\left(\hat{\rho}^{(1)}\right)^2 = 1/2 < 1$. 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 $\left|+^{(1)}\right\rangle$, а с вероятностью $W_-^{(1)} = 1/2$ – в состоянии $\left|-^{(1)}\right\rangle$. 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 макроприборами.

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

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

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

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

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 $\mathbf{Tr}\,\hat{\rho} = 1$. След квадрата матрицы плотности $\mathbf{Tr}\,\hat{\rho}^2 \leq 1$. Равенство достигается только для чистых состояний.

Факторизация матрицы плотности

Вопрос: разве, классическая физика не является частным случаем квантовой физики в пределе $\hbar \to 0$? 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

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

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

Действительно,

$$\hat{\rho} = |\,\psi\,\rangle\langle\,\psi\,| = \left(|\,\psi^{(1)}\,\rangle\,|\,\psi^{(2)}\,\rangle\right)\left(\langle\,\psi^{(1)}\,|\,\langle\,\psi^{(2)}\,|\right) = \\ = \left(|\,\psi^{(1)}\,\rangle\langle\,\psi^{(1)}\,|\right) \otimes \left(|\,\psi^{(2)}\,\rangle\langle\,\psi^{(2)}\,|\right) = \hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)},$$

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 $\left\{\left|\,\tilde{b}_j\,\right\rangle\right\}$, то самое общее разложение состояния $|\,\psi\,\rangle$ по базису обеих подсистем будет иметь вид:

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

где

$$|\,\beta_\ell\,\rangle = \sum_j \psi_{\ell\,j}\,\Big|\,\tilde{b}_j\,\Big\rangle.$$

A priori совсем неясно, почему можно выбрать $\langle\,\beta_\ell\,|\,\beta_{\ell'}\,\rangle \sim \delta_{\ell\,\ell'}$.

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

$$\hat{\rho}_A = \sum_\ell W_\ell\,|\,a_\ell\,\rangle\,\langle\,a_\ell\,|.$$

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:

$$\hat{\rho}_A = \mathbf{Tr}_B\hat{\rho} = \mathbf{Tr}_B\left(\sum_{\ell\,\ell'}|\,a_\ell\,\rangle\,|\,\beta_\ell\,\rangle\,\langle\,a_{\ell'}\,|\,\langle\,\beta_{\ell'}\,|\right) = \sum_{\ell\,\ell'}\langle\,\beta_{\ell'}\,|\,\beta_\ell\,\rangle\,|\,a_\ell\,\rangle\,\langle\,a_{\ell'}\,|.$$

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

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

$$\hat{\rho}_B = \mathbf{Tr}_A \hat{\rho} = \sum_{\ell} W_\ell \,|\, b_\ell \,\rangle \langle\, b_\ell \,|.$$

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_ℓ можно сопоставить строго один вектор $|\, a_\ell \,\rangle$ и один вектор $|\, b_\ell \,\rangle$), 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:

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

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:**

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

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:**

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

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

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

Тогда

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

Аналогично

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

и

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

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 $\sum_\ell \sqrt{W_\ell}\left|\ell^{(A)}\right\rangle\left|\ell^{(B)}\right\rangle\left|\ell^{(C)}\right\rangle$, где $\ell = \{+,\,-\}$.

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:

$$|\,\Psi^+\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\Big|+^{(1)}\Big\rangle\Big|-^{(2)}\Big\rangle + \Big|-^{(1)}\Big\rangle\Big|+^{(2)}\Big\rangle\Big);$$

$$|\,\Psi^-\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\Big|+^{(1)}\Big\rangle\Big|-^{(2)}\Big\rangle - \Big|-^{(1)}\Big\rangle\Big|+^{(2)}\Big\rangle\Big);$$

$$|\,\Phi^+\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\Big|+^{(1)}\Big\rangle\Big|+^{(2)}\Big\rangle + \Big|-^{(1)}\Big\rangle\Big|-^{(2)}\Big\rangle\Big);$$

$$|\,\Phi^-\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\Big|+^{(1)}\Big\rangle\Big|+^{(2)}\Big\rangle - \Big|-^{(1)}\Big\rangle\Big|-^{(2)}\Big\rangle\Big).$$

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 $\hat{R} = \hat{\rho}^{\mathbf{T}}$ 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

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

Такая операция называется частичным транспонированием матрицы $\hat{\rho}$. Очевидно, что матрица $\left(\hat{\rho}\right)^{T_{\mathbf{B}}}$ 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 $\left(\hat{\rho}\right)^{T_B}$, 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 M.Horodecki, P.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 $0 \le x \le 1$, 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 $s = 1/2$:

$$|\, 1 \rangle = \left|\, +^{(1)} \right\rangle \left|\, +^{(2)} \right\rangle, \,|\, 2 \rangle = \left|\, -^{(1)} \right\rangle \left|\, +^{(2)} \right\rangle,$$

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

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:

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

и

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

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

$$1/3 \le x \le 1$$

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

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

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 $\hat{U}_{\rho}$, которое приводит эту матрицу к диагональному виду. Тогда:

$$\hat{U}_\rho \Lambda(\hat{\rho}) \hat{U}_\rho^\dagger = \hat{U}_\rho \left(\hat{1}\, \mathbf{Tr} \left(\hat{U}_\rho^\dagger \hat{U}_\rho\, \hat{\rho} \right) - \hat{\rho} \right) \hat{U}_\rho^\dagger = \hat{1} \mathbf{Tr} \left(\hat{U}_\rho \hat{\rho} \hat{U}_\rho^\dagger \right) - \hat{U}_\rho \hat{\rho} \hat{U}_\rho^\dagger =$$

$$= \hat{1}\, \mathbf{Tr} \hat{\rho}_{\mathbf{diag}} - \hat{\rho}_{\mathbf{diag}} = \begin{pmatrix} \sum\limits_i \rho_i - \rho_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sum\limits_i \rho_i - \rho_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \sum\limits_i \rho_i - \rho_n \end{pmatrix},$$

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 $\left(\hat{1}^{(A)} \otimes \Lambda^{(B)}\right)$. Тогда получаем:

$$\begin{aligned}
\left(\hat{1}^{(A)} \otimes \Lambda^{(B)}\right)\hat{\rho} &= \sum_{\ell} W_{\ell}\hat{\rho}_{\ell}^{(A)}\Lambda\left(\hat{\rho}_{\ell}^{(B)}\right) = \sum_{\ell} W_{\ell}\,\hat{\rho}_{\ell}^{(A)}\left(\hat{1}^{(B)}\mathbf{Tr}\hat{\rho}^{(B)} - \hat{\rho}^{(B)}\right) = \\
&= \sum_{\ell} W_{\ell}\,\hat{\rho}_{\ell}^{(A)} \otimes \hat{1}^{(B)} - \sum_{\ell} W_{\ell}\,\hat{\rho}_{\ell}^{(A)}\hat{\rho}^{(B)} = \\
&= (\mathbf{Tr}_B\hat{\rho}) \otimes \hat{1}^{(B)} - \hat{\rho} = \hat{\rho}_A \otimes \hat{1}^{(B)} - \hat{\rho}.
\end{aligned}$$

Поскольку отображение $\left(\hat{1}^{(A)} \otimes \Lambda^{(B)}\right)\hat{\rho}$ положительно определено, то для сепарабельных состояний матрица

$$\hat{\rho}_A \otimes \hat{1}^{(B)} - \hat{\rho}$$

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

$$\hat{1}^{(A)} \otimes \hat{\rho}_B - \hat{\rho}$$

тоже положительно определена.

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

$$\hat{\rho}_A \otimes \hat{1}^{(B)} - \hat{\rho}$$

и

$$\hat{1}^{(A)} \otimes \hat{\rho}_B - \hat{\rho}.$$

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 редукционный критерий

Применим редукционный критерий к состоянию Вернера. Имеем:

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

Тогда

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

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

Чтобы исследовать получившуюся матрицу на положительность, ее необходимо диагонализовать.

Простые стандартные вычисления дают:

$$\left(\hat{\rho}_A^{(W)} \otimes \hat{1}^{(B)} - \hat{\rho}^{(W)}\right)_{diag} = \left(\hat{1}^{(A)} \otimes \hat{\rho}_B^{(W)} - \hat{\rho}^{(W)}\right)_{diag} =$$

$$= \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1+x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1+x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1+x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-3x \end{pmatrix}.$$

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

Следовательно, согласно редукционному 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.