Матрица плотности

Курс лекций по "Quantum Foundations"

Н.В. Никитин

Кафедра физики атомного ядра и квантовой теории столкновений

Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова

Осенний семестр 2019–2020 учебного года

При поддержке фонда БАЗИС и фонда ФОНД ВОЛЬНОЕ ДЕЛО

Предисловие (не принимать за абсолютную истину!)

Квантовая физика – красивая наука. При первом знакомстве она кажется странной и непонятной, но фантастически привлекательной своей волшебной (сумасшедшей? чеширской?) логикой, которая абсолютно непохожа на привычную с детства классическую логику. Эта новая логика дурачит нас своими парадоксами, которые, на первый взгляд, не имеют решения. Но, тем не менее, решаются! И справедливость каждого решения подтверждена экспериментально. Квантовая механика – настоящий параллельный мир, который глубже и логичней, чем любой мир, придуманный писателями – фантастами или писателями – философами (впрочем, это одно и тоже). Квантовому миру можно отдать всю жизнь, но не постичь и тысячной его части. К сожалению, современные курсы квантовой физики делают основной упор на тех ее разделах, которые были важны при создании квантовой механики в 20–е и 30–е годы прошлого века, то есть на уравнения Шредингера с точно решаемыми потенциалами, атомную спектроскопию и начала ядерной физики.

Однако еще основоположники квантовой механики (Н. Бор, В. Гейзенберг, М. Борн, Э. Шредингер, П. Дирак, А. Эйнштейн и др.) полагали, что фундаментом созданной ими теории является проблема измерения или, иначе, проблема описания квантового объекта в классических терминах, поскольку наш мозг способен воспринимать и анализировать только классические явления и перерабатывать их в классическую информацию.

Можно даже грубо сказать, что квантовая механика описывает алгоритм преломления объективных законов квантового мира в зеркале классической терминологии.

В конце 1920-х годов в рамках формализма операторов в гильбертовых пространствах Д. фон Нейманом был найден объект для адекватного описания процессов взаимодействия квантовых систем с макроскопическими приборами. Таким объектом оказалась матрица плотности. Именно изучению ее свойств и многочисленных приложений будет в основном посвящен данный курс. Заметим, что в терминах матрицы плотности многие "парадоксы" квантовой механики полностью теряют свою "парадоксальность" (в качестве примера укажем парадокс кота Шредингера).

В 1930–е и 1940–е годы дискуссии относительно оснований квантовой механики, похоже, продолжали волновать только Бора, Эйнштейна, Гейзенберга, де Бройля и, отчасти, Шредингера. А с развитием методов квантовой теории поля на рубеже 1950–х годов в физике микромира на долгие 30 лет возобладал экстенсивный путь развития, когда готовый и очень эффективный квантовый аппарат применялся к описанию новых явлений. Это приводило физиков к успеху, званиям и премиям.

Однако именно в это время были предложены теория волн материи де Бройля-Бома (1952), Многомировая интерпретация Хьюго Эверетта–III (1957), теорема Глизона (1957), неравенства Белла (1964), неравенства Клаузера-Хорна-Шимони-Хольта (1969), теорема Крауса (1970), уравнение Линдблада (1976), теорема Эберхарда (1978), отложенный выбор Джона Уилера (1978), граница Цирельсона (1980), теорема о невозможности клонирования произвольного чистого состояния (1982) и целый ряд других фактов, которые легли в копилку оснований квантовой физики.

Новый виток обсуждения оснований квантовой механики связан с исследованиями возможности создания квантовых компьютеров и бурным развитием квантовой теории информации в последнем десятилетии XX века.

Только в последней четверти XX века физиками было осознано, что наряду с процессом измерения фундаментальную роль в квантовой физике играют запутанные состояния и создаваемые ими корреляции. Хотя исключительность свойств запутанных состояний продемонстрирована еще в 1935 году Эйнштейном, Подольским и Розеном, лишь в 1994 г. был разработан общий формализм для описания корреляций – ящики Попеску–Рорлиха – который позволил по-новому взглянуть на аксиоматику квантовой физики с точки зрения теории информации и даже задаться вопросом, существуют ли физические теории за пределами классической и квантовой парадигм.

Часть 1

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА ЧИСТЫХ СОСТОЯНИЙ

"Испытывает ли электрон раздвоение личности, когда проходит через две щели?"

Постулаты квантовой механики (для чистых состояний)

Квантовая механика строится на основе постулатов или аксиом. Справедливость того или иного набора постулатов может быть проверена только путем сравнения предсказаний теории, которая базируется на конкретной системе аксиом, с результатами экспериментов. Имеется множество различных наборов постулатов квантовой механики (П. Дирак, Дж. фон Нейман, Г. Биркгоф, Р. Фейнман, Г. Людвиг, Л. Харди, К. Фукс и др.) и их модификаций. Предлагаемая в Части 1 система аксиом ближе всего к "классическому" дираковскому взгляду на квантовую теорию.

Постулат N1. Квантовая система описывается при помощи вектора состояния $|\psi\rangle$ в конечномерном или бесконечномерном гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$ над полем комплексных чисел $\mathbb{C}$ (последнее просто означает, что скалярное произведение $\langle\varphi|\ \psi\rangle$ может быть комплексным числом).

Как правило, дополнительно предполагается, что вектор состояния $|\psi\rangle$ несет максимально возможную информацию о свойствах квантовой системы. Это предположение до сих пор является дискуссионным. Мы приведем аргументы в его пользу в параграфе "Энтропия чистого состояния".

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:

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

откуда сразу следует, что $\hat{U}^\dagger(t,\,t_0)\,\hat{U}(t,\,t_0) = \hat{1}$. 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 переходит в одно из нескольких состояний, которые каким-либо образом **можно различить при помощи макроприборов**. Для простоты пусть этих состояний будет *конечное число*. Согласно **Постулату N1**, каждому такому состоянию соответствует вектор $|\varphi_{i'}\rangle$. Тогда вектор состояния $|\psi\rangle$ можно записать в виде линейной комбинации (**суперпозиции**) по набору состояний $\{|\varphi_i\rangle\}$:

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

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

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

Выражение для коэффициентов c_i справедливо, поскольку макроскопически различимым состояниям микросистемы должен соответствовать набор ортогональных векторов $|\varphi_i\rangle$. Такой набор обеспечивает однозначность показаний макроприбора в каждом отдельном измерении. При этом **выбор конкретного состояния** из набора возможных состояний **абсолютно случаен**.

Поскольку состояния $\{|\varphi_i\rangle\}$ по своему смыслу образуют базис (т. е. $\langle\varphi_{i'}|\varphi_{i''}\rangle = \delta_{i'\,i''}$), то проекторы (проекционные операторы) $\hat{P}_{\varphi_i} = |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$ на чистые состояния $|\varphi_i\rangle$ реализуют ортогональное разложение единицы в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$ размерности $d = \dim(\mathcal{H})$, т. е.

$$\sum_{i=1}^{d} \hat{P}_{\varphi_i} = \sum_{i=1}^{d} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| = \hat{1}.$$

Действительно,

$$\begin{aligned}\hat{1}|\psi\rangle &= |\psi\rangle = \sum_i c_i\,|\varphi_i\rangle = \sum_i \langle\varphi_i|\psi\rangle|\varphi_i\rangle = \\ &= \sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\psi\rangle = \Big(\sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\Big)\,|\psi\rangle = \Big(\sum_i \hat{P}_{\varphi_i}\Big)\,|\psi\rangle.\end{aligned}$$

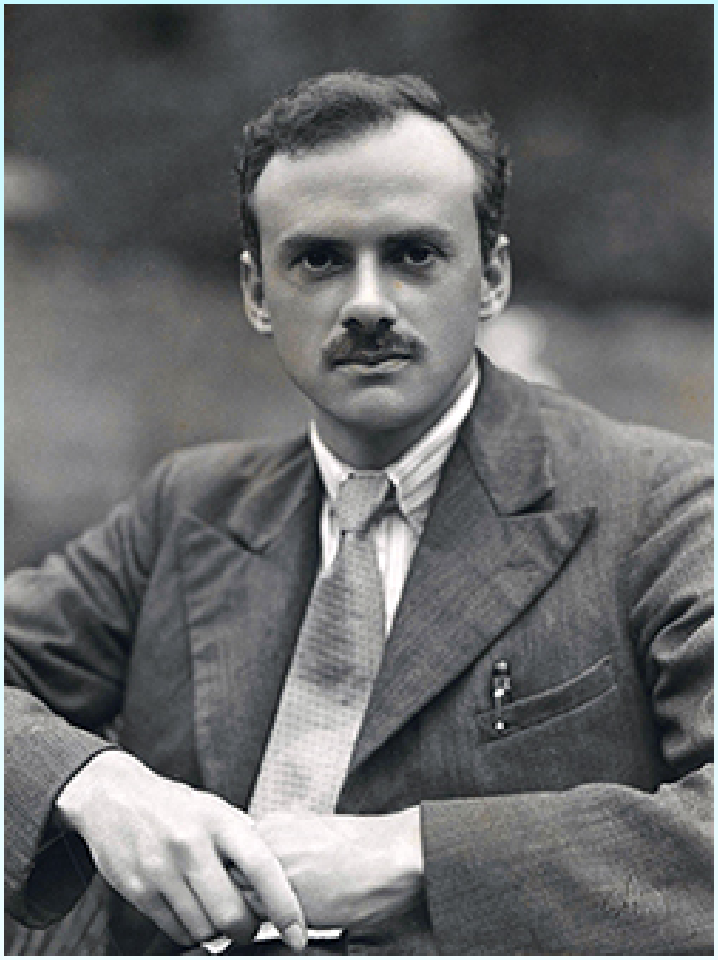
В классических учебниках по квантовой механике, например, в блестящей книге П.А.М. Дирака "*Принципы квантовой механики*" или в курсе лекций Д.И. Блохинцева "*Основы квантовой механики*" утверждается, что именно принцип суперпозиции является базой для квантовомеханического описания Природы.

Если бы квантовую физику можно было сформулировать исключительно в терминах векторов состояния в гильбертовых пространствах, а процесс измерения описывался бы только при помощи проекционных операторов, то это утверждение могло бы считаться справедливым. Однако это не так.

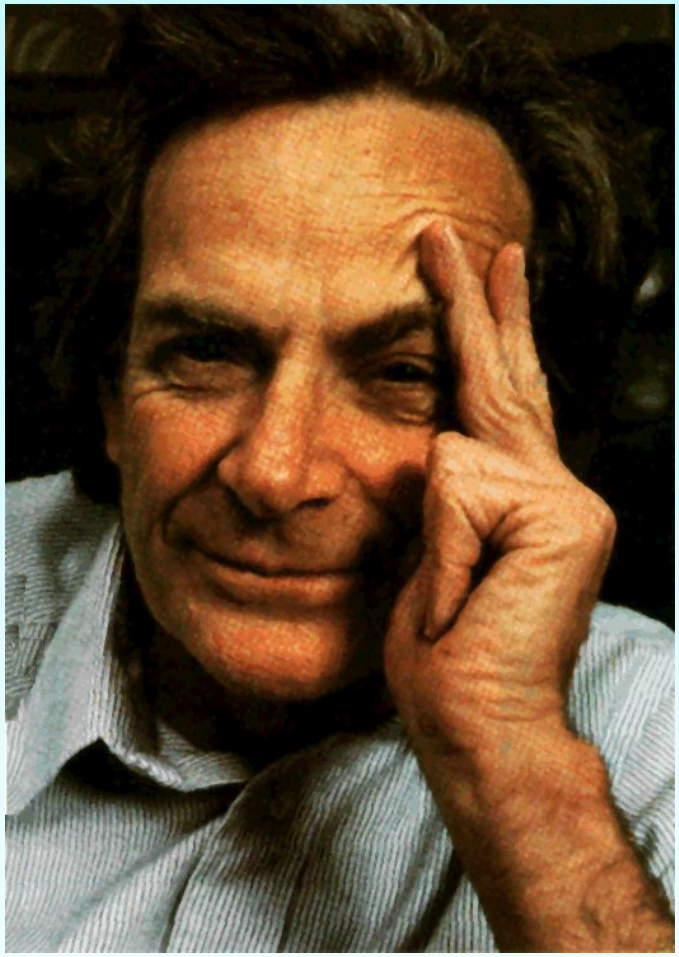
Ниже мы увидим, что более общая формулировка квантовой механики может быть дана в терминах матрицы плотности. В этом подходе принцип суперпозиции выглядит довольно искусственной конструкцией (см. параграф "Принцип суперпозиции на языке матрицы плотности"). Помимо этого активно используются фейнмановская формулировка в терминах интегралов по траекториям, алгебраический подход (C^*–алгебры и алгебры фон Неймана), формализм квантовой логики, томографическая формулировка (группа *В.И. Манько* в ФИАН). В перечисленных выше подходах к построению квантовой механики принцип суперпозиции либо не используется, либо играет вспомогательную роль. Процесс измерения можно описать не прибегая к принципу суперпозиции также в терминах POVM-элементов (см. параграф "Понятие о POVM-элементах").

Так в чем же тогда состоит смысл принципа суперпозиции? Скорее всего, этот принцип задает простейший вариант построения максимально возможной корреляции между состояниями микрообъектов (см. параграф "Граница Цирельсона"). Степень такой корреляции как раз выделяет квантовый подход среди других возможных подходов (в том числе классического) к описанию окружающего нас мира.

Пример использования принципа суперпозиции для "описания" состояния макроскопических объектов (собак): "Присел полежать". Надеюсь, все понимают, в чем тут "шутка юмора", и почему собакен на рисунке на самом деле не находится в суперпозиции состояний? :)



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_i. 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:

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

где $\hat{P}_{\varphi_i} = |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$ – проектор на чистое состояние $|\varphi_i\rangle$. Коэффициенты c_i 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_i 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.

Эквивалентность "матричной" и "следовой" формулировок **Постулата N4** показана в математическом приложении **"След оператора и его свойства"**.

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:

$$\langle A\rangle_\psi = \left\langle \psi \middle| \hat{A} \middle| \psi \right\rangle = \mathbf{Tr}\left(\hat{P}_\psi \hat{A}\right).$$

Легко показать, что *условная* вероятность измерения конкретного значения $a_{i'}$ наблюдаемой A согласно квантовой теории равна $w_{i'} = w\left(a_{i'}\,|\psi\right) = |c_{i'}|^2$, 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 временнóго 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

$$\langle A \rangle_\psi (t) \equiv \left\langle \psi(t) \middle| \hat{A}(t) \middle| \psi(t) \right\rangle,$$

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

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

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

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

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

Согласно Постулату N1 решение этого уравнения необходимо искать при помощи оператора эволюции $\hat{U}(t,\,t_0)$ в следующем виде:

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

Оператор эволюции обладает следующими свойствами:

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

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 $\hat{B} \equiv \dfrac{d\,\hat{A}}{dt}$. 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:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle\, A\,\rangle_{\psi}\,(t) &= \frac{d}{dt}\left\langle\, \psi^{(S)}(t)\,\middle|\,\hat{A}^{(S)}\,\middle|\,\psi^{(S)}(t)\,\right\rangle = \\
&= \left(\frac{d\,\langle\, \psi^{(S)}(t)\,|}{dt}\right)\hat{A}^{(S)}\,\middle|\,\psi^{(S)}(t)\,\right\rangle + \\
&+ \left\langle\, \psi^{(S)}(t)\,\middle|\,\hat{A}^{(S)}\left(\frac{d\,|\,\psi^{(S)}(t)\,\rangle}{dt}\right) =
\end{aligned}$$

$$= \left\langle \psi^{(S)}(t) \left| \frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}^{(S)}, \hat{A}^{(S)} \right] \right| \psi^{(S)}(t) \right\rangle.$$

Таким образом выражение для оператора $\hat{B}^{(S)}$ имеет вид

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

хотя оператор $\hat{A}^{(S)}$ явно от времени НЕ зависит.

На этом краткое изложение одного из возможных наборов аксиом квантовой механики чистых состояний закончено. Более подробное обсуждение этого набора и выявление его связи с процессом измерения в микромире можно найти в книге: Никитин Н.В., Томс К.С., Фотина О.В., "Аксиомы квантовой механики", М. "Университетская книга", 2015. Регулярно обновляемый и пополняемый электронный вариант книги находится по адресу: http://nuclphys.sinp.msu.ru/qma/.

Проективные измерения

Измерения, которые описываются в терминах ортогональных состояний $|\,\varphi_i\,\rangle$ или соответствующих им проекторов $\hat{P}_{\varphi_i}$, называются проективными измерениями (англ. PVMs – Projector Valued Measures). Поскольку $\langle\,\varphi_{i'}\,|\,\varphi_{i''}\,\rangle = \delta_{i'\,i''}$, то проекторы удовлетворяют условию ортогональности

$$\hat{P}_{\varphi_{i'}}\,\hat{P}_{\varphi_{i''}} = \hat{P}_{\varphi_{i'}}\,\delta_{i'\,i''}$$

и образуют ортогональное разложение единицы, если состояния $|\,\varphi_i\,\rangle$ образуют базис, например, как собственные векторы оператора некоторой наблюдаемой (см. параграф "Постулаты квантовой механики (для чистых состояний)"), т. е.

$$\sum_i \hat{P}_{\varphi_i} = \hat{1}.$$

В силу Постулата N4 (проекционного постулата М. Борна), для любого вектора $|\,\psi\,\rangle \in \mathcal{H}$ автоматически выполняется условие положительности проекторов

$$\left\langle\,\psi\,\middle|\,\hat{P}_{\varphi_i}\,\middle|\,\psi\,\right\rangle \equiv w_i = |c_i|^2 \geq 0,$$

а состояние системы после проективного измерения $\hat{P}_{\varphi_i}$ *с точностью до нефизической фазы* α можно записать в общем виде как

$$|\,\varphi_i\,\rangle = \frac{\hat{P}_{\varphi_i}\,|\,\psi\,\rangle}{\sqrt{w_i}}\,e^{i\alpha}.$$

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 должа 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:

$$|\phi\rangle\,|0\rangle \to |\phi\rangle\,|\phi\rangle.$$

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

$$|\psi\rangle\,|0\rangle \to |\psi\rangle\,|\psi\rangle = \Big(C_1\,|\varphi_1\rangle + C_2\,|\varphi_2\rangle\Big) \times \Big(C_1\,|\varphi_1\rangle + C_2\,|\varphi_2\rangle\Big) =$$

$$= C_1^2\,|\varphi_1\rangle\,|\varphi_1\rangle + C_2^2\,|\varphi_2\rangle\,|\varphi_2\rangle + C_1 C_2\Big(|\varphi_1\rangle\,|\varphi_2\rangle + |\varphi_2\rangle\,|\varphi_1\rangle\Big).$$

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

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

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

D. Dieks

Вычисления, ведущие к доказательству теоремы о невозможности клонирования (по-английски *“No-cloning theorem”*), доступны любому студенту. Однако сама теорема была доказана только в 1982 году (спустя более полувека после создания квантовой механики!) и опубликована в Nature: W.K. Wootters and W.H. Zurek, "A Single Quantum Cannot Be Cloned”, Nature 299, p.802 (1982). Независимо вышла аналогичная работа: D. Dieks, ”Communication by EPR devices”, Phys. Lett. A 92, p.271 (1982).

Клонирование известных состояний

В теореме о невозможности клонирования ключевую роль играет тот факт, что клонируемый вектор НЕИЗВЕСТЕН. Известный вектор $|\psi\rangle$ клонировать можно! Более того, можно клонировать и векторы, ортогональные известному вектору $|\psi\rangle$. Осуществляется подобное клонирование при помощи одного и того же унитарного оператора $\hat{U}$ (см. J.L. Park, "The concept of transition in quantum mechanics", Found. Phys. 1, p.23 (1970).).

Докажем это утверждение. Пусть $\hat{U}$ – искомый унитарный оператор. Рассмотрим два состояния $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ и $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$, для которых осуществляется операция клонирования. Тогда:

$$\hat{U}\Big(|\psi\rangle \otimes |0\rangle\Big) = |\psi\rangle \otimes |\psi\rangle$$
$$\hat{U}\Big(|\varphi\rangle \otimes |0\rangle\Big) = |\varphi\rangle \otimes |\varphi\rangle.$$

"Пустой" вектор $|0\rangle$ также принадлежит гильбертовому пространству $\mathcal{H}$. При этом для явной реализации операции клонирования было использовано понятие прямого произведения (см. параграф "Прямое или тензорное произведение"). Системы $|\psi\rangle \otimes |0\rangle$, $|\varphi\rangle \otimes |0\rangle$, $|\psi\rangle \otimes |\psi\rangle$ и $|\varphi\rangle \otimes |\varphi\rangle$ определены в гильбертовом пространстве $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$. В этом же пространстве действует унитарный оператор $\hat{U}$.

Скалярно умножим первое равенство на второе. Получим:

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

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 $|\varphi\rangle = \left|\psi^{(\perp)}\right\rangle$. Утверждение доказано.

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

Приведем пример клонирования известного чистого состояния и ортогонального к нему. Пусть необходимо клонировать **известное** состояние $|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ из двумерного гильбертова пространства $\mathcal{H}_2$. Легко указать ортогональное состояние для $|+\rangle$: это $|-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. В качестве "пустого" вектора выберем вектор $|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$. Тогда искомое унитарное преобразование $\hat{U}$ в пространстве $\mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_2$ будет иметь вид:

$$\hat{U} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Унитарность матрицы $\hat{U}$:

$$\hat{U}\hat{U}^{\dagger} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Покажем, как работает клонирование. В технике параграфа "Прямое или тензорное произведение" получаем

$$|+\rangle \otimes |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad |+\rangle \otimes |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix};$$

$$|-\rangle \otimes |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad |-\rangle \otimes |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Тогда

$$\hat{U}\Big(|+\rangle \otimes |0\rangle\Big) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |+\rangle \otimes |+\rangle$$

и

$$\hat{U}\Big(|-\rangle \otimes |0\rangle\Big) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |-\rangle \otimes |-\rangle.$$

Таким образом клонирование известного состояния действительно выполнено.

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 $|\varphi_{i'}\rangle$. Говорят, что произошла РЕДУКЦИЯ или "стягивание" вектора $|\psi\rangle$ к вектору $|\varphi_{i'}\rangle$. 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 N6? 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 N6 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**:

$$|\phi\rangle\,|\phi\rangle \to |\phi\rangle\,|0\rangle.$$

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 придания 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:

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

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

$$\begin{aligned} |\psi\rangle|\psi\rangle &= C_1^2\,|\varphi_1\rangle|\varphi_1\rangle + C_2^2\,|\varphi_2\rangle|\varphi_2\rangle + C_1C_2\,(|\varphi_1\rangle|\varphi_2\rangle + |\varphi_2\rangle|\varphi_1\rangle) \to \\ &\to C_1^2\,|\varphi_1\rangle\,|0\rangle + C_2^2\,|\varphi_2\rangle\,|0\rangle + \sqrt{2}\,C_1C_2\,|\Phi\rangle, \end{aligned}$$

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:

$$\mathbf{const} \times \Big(C_1\,|\varphi_1\rangle|0\rangle + C_2\,|\varphi_2\rangle|0\rangle\Big) = C_1^2\,|\varphi_1\rangle|0\rangle + C_2^2\,|\varphi_2\rangle|0\rangle + \sqrt{2}C_1C_2\,|\Phi\rangle.$$

Оно превращается в тождество, если

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

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

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

уничтожить нельзя. Теперь рассмотрим уничтожение одной из копий чистого состояния

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

Применим искомую процедуру к самому вектору

$$\left|\,\psi^{(\perp)}\,\right\rangle\left|\,\psi^{(\perp)}\,\right\rangle \to \left|\,\psi^{(\perp)}\,\right\rangle|\,0\,\rangle \to C_2^*\,|\,\varphi_1\,\rangle\,|\,0\,\rangle - C_1^*\,|\,\varphi_2\,\rangle\,|\,0\,\rangle$$

и к его разложению в суперпозицию

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

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

Результаты обеих процедур уничтожения согласуются, если выбрать

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

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

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

невозможно уничтожить так же, как и копию состояния $\left|\,\chi^{(1)}\,\right\rangle$.

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

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

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

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

С другой стороны, эта процедура невыполнима, поскольку

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

$$+\,\alpha\,\beta\left(\left|\chi^{(1)}\right\rangle\left|\chi^{(2)}\right\rangle + \left|\chi^{(2)}\right\rangle\left|\chi^{(1)}\right\rangle\right) \to ?,$$

а, как было доказано выше, уничтожение копий состояния $\left|\chi^{(1)}\right\rangle$ и $\left|\chi^{(2)}\right\rangle$ 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 так же, 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).

Вектор состояния Вселенной

Из теоремы о невозможности клонирования можно заключить, что понятие вектора состояния Вселенной как целого (которое используется, например, во многомировой интерпретации квантовой механики) НЕ имеет смысла.

Действительно, согласно проекционному постулату М.Борна в каждом отдельном измерении состояния Вселенной ее вектор состояния $|\Psi\rangle$ случайным образом переходит в один из базисных векторов $|\varphi_i\rangle$. При этом любая информация об исходном векторе состояния $|\Psi\rangle$ теряется. То есть после одного измерения мы ничего не можем сказать об исходном векторе состояния Вселенной.

В квантовой механике проблема восстановления неизвестного вектора состояния $|\psi\rangle$ некоторой физической системы решается путем создания ансамблей одинаково приготовленных систем. Над каждым объектом из ансамбля производится измерение, которое его разрушает. Только после измерения многих идентичных систем можно узнать достаточно информации, чтобы восстановить неизвестный вектор состояния $|\psi\rangle$.

Со Вселенной ситуация принципиально иная. Вселенная по определению существует всего в одном-единственном экземпляре. Значит, если мы хотим узнать информацию о единственном векторе состояния $|\Psi\rangle$, мы должны придумать некоторую последовательность измерений этого вектора любыми приборами, которая может восстановить значения всех коэффициентов C_i при базисных векторах $|\varphi_i\rangle$.

Но если такая последовательность измерений существует, то с ее помощью мы можем создать еще один вектор состояния $|\Psi\rangle$, идентичный данному неизвестному вектору состояния Вселенной. То есть мы можем клонировать неизвестный вектор состояния, что прямо противоречит теореме о невозможности клонирования.

Таким образом, в рамках квантовой механики НЕ существует последовательности измерений, которая может дать абсолютно полную информацию о векторе состояния Вселенной $|\Psi\rangle$. Поэтому, если следовать парадигме В. Гейзенберга, что в квантовую теорию должны входить только те величины, информацию о которых мы можем получить экспериментально, то вектор состояния Вселенной должен быть исключен из квантовой физики.

Задача о квантовой бомбе

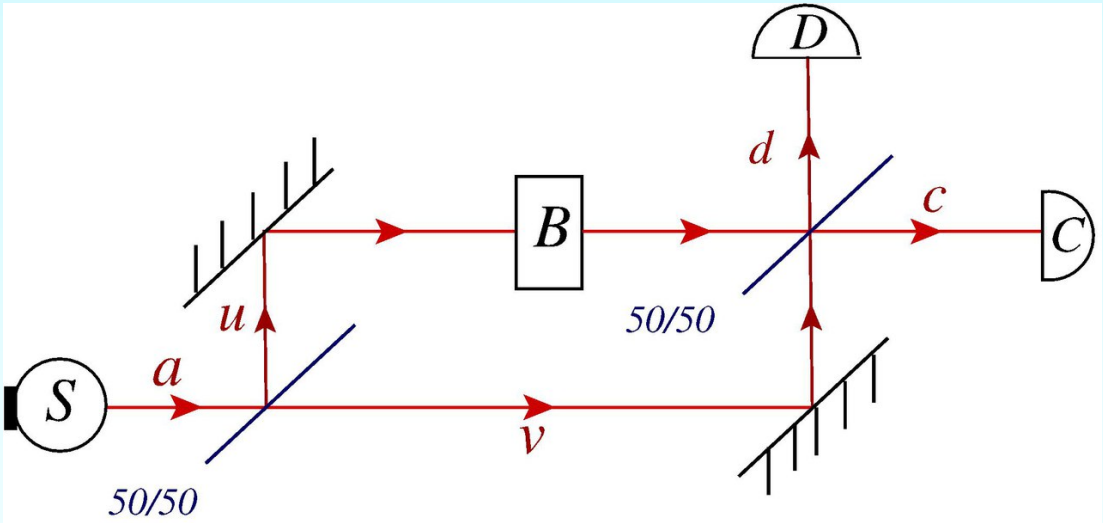
Принцип суперпозиции позволяет при помощи микрообъектов добиться успеха в такие задачах, которые принципиально НЕ могут быть решены на макроскопическом уровне. Хорошим примером служит задача о квантовой бомбе, предложенная двумя израильскими физиками Авшаломом Элитцуром и Львом Вайдманом в работе A. Elitzur, L. Vaidman, "Quantum mechanics interaction-free mearsurements", Foun. Phys. 23, pp. 987–997 (1993).

Эта задача чем-то напоминает логические задачи на применение понятия "метаинформация". Лучшие образцы подобных задач можно найти в книге Р.М. Смаллиана "Алиса в Стране Смекалки", М. "Мир" (1987) (см. задачи 86 и 87). Но вернемся к квантовой бомбе.

Условие задачи: на складе имеется большое число бомб с исправным и неисправным взрывателями. Исправный взрыватель со 100% – ой вероятностью поглощает попавший в него фотон и приводит бомбу в действие. Неисправный взрыватель никак не взаимодействует с фотоном и не взрывает бомбу.

Требуется придумать процедуру, каким образом идентифицировать хотя бы какое-то количество исправных бомб, при этом не уничтожив их.

Если бы фотоны были классическими объектами, то эта задача не имела бы решения. Но для фотонов, которые подчиняются принципу суперпозиции, решение существует!



Поместим бомбу в одно из плеч интерферометра Маха–Цандера, как показано на рисунке, и воспользуемся техникой из параграфа "Конструктор для быстрого анализа процессов однофотонной интерференции".

Неисправная бомба действует по правилу $|\,a\,\rangle\,|\,B_0^-\,\rangle \to |\,a\,\rangle\,|\,B_0^-\,\rangle$, а исправная бомба ничем не отличается от детектора первого типа: $|\,a\,\rangle\,|\,B_0^+\,\rangle \to |\,B^+\,\rangle$. Тогда для неисправной бомбы имеется следующая цепочка преобразований:

$$|\,a\,\rangle\,|\,B_0^-\,\rangle\,|\,C_0\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle \to \left(\frac{i}{\sqrt{2}}\,|\,u\,\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\,v\,\rangle\right)|\,B_0^-\,\rangle\,|\,C_0\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle \to$$

$$\to \left[\frac{i}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\,|\,c\,\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}\,|\,d\,\rangle\right) + \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{i}{\sqrt{2}}\,|\,c\,\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\,d\,\rangle\right)\right]|\,B_0^-\,\rangle\,|\,C_0\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle \to$$

$$\to i\,|\,c\,\rangle\,|\,B_0^-\,\rangle\,|\,C_0\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle \to i\,|\,B_0^-\,\rangle\,|\,C\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle.$$

Для исправной бомбы можем написать

$$|\,a\,\rangle\,|\,B_0^+\,\rangle\,|\,C_0\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle \to \left(\frac{i}{\sqrt{2}}\,|\,u\,\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\,v\,\rangle\right)|\,B_0^+\,\rangle\,|\,C_0\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle \to$$

$$\to \left(\frac{i}{\sqrt{2}}\,|\,B^+\,\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\,v\,\rangle\,|\,B_0^+\,\rangle\right)|\,C_0\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle \to$$

$$\to \left(\frac{i}{\sqrt{2}}\,|\,B^+\,\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{i}{\sqrt{2}}\,|\,c\,\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\,d\,\rangle\right)|\,B_0^+\,\rangle\right)|\,C_0\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle \to$$

$$\to \frac{i}{\sqrt{2}}\,|\,B^+\,\rangle\,|\,C_0\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle + \frac{i}{2}\,|\,B_0^+\,\rangle\,|\,C\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle + \frac{1}{2}\,|\,B_0^+\,\rangle\,|\,C_0\,\rangle\,|\,D\,\rangle.$$

Как видно из приведенного выше анализа, имеются три возможные ситуации:

1) $|\,B^{+}\,\rangle\,|\,C_0\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle$ **– бомба исправна и она взорвалась. Эта ситуация не удовлетворяет условию задачи.**

2) Сработал только детектор "C". Этому соответствуют случаи $\left|\,B_0^{-}\,\right\rangle\,|\,C\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle$ **и** $\left|\,B_0^{+}\,\right\rangle\,|\,C\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle$**. Хотя бомба не взорвалась, но она может быть как исправной, так и неисправной. Такая ситуация тоже не подходит.**

3) Наконец, сработал только детектор "D", то есть $\left|\,B_0^{+}\,\right\rangle\,|\,C_0\,\rangle\,|\,D\,\rangle$**, и ИСПРАВНАЯ бомба не взорвалась. Это как раз то, что нужно по условию задачи!**

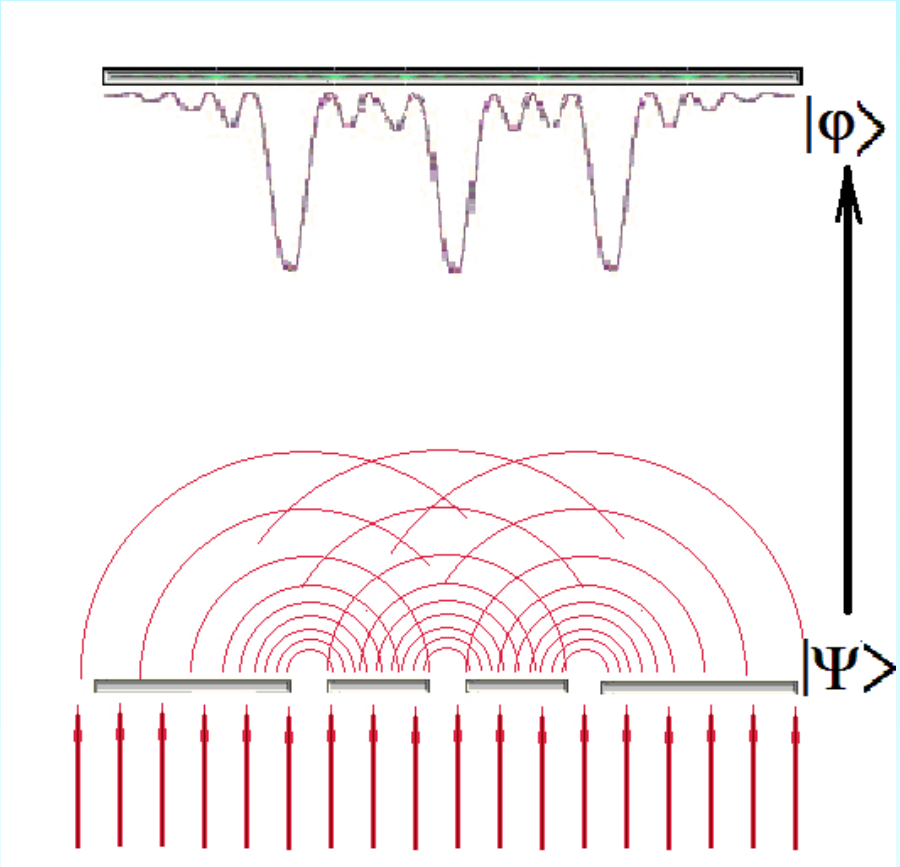
Таким образом $|1/2|^2 = 1/4$ **всех исправных бомб удается идентифицировать как исправные, еще** $|i/2|^2 = 1/4$ **исправных бомб не удается однозначно идентифицировать как исправные. И половина исправных бомб взрывается. Заметим, что число идентифицированных исправных бомб можно поднять до** $1/3$ **(как?).**

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 находится еще один детектирующий 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 перед падением на экран 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

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

Условная вероятность возникновения этого состояния оказывается вполне значимой: $w(\varphi|\psi) = |\langle\varphi|\ \psi\rangle|^2 = 1/9$.

Теперь поставим вопрос: с какой вероятностью в получившейся конфигурации экранов и щелей фотон проходит через щель "3"? Простые вычисления дают, что искомая вероятность

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

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. Зададимся тем же самым вопросом про вероятность прохождения фотонов, но уже через щель “1”. 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 невозможно интерпретировать с точки зрения канонического формализма квантовой механики!

Данный результат можно трактовать 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 запрещали бы такую ситуацию. Например, правило, что в природе невозможны такие конфигурации макроприборов, которые приводят к отрицательным вероятностям для наблюдаемых величин.

Заметим, что для совместно (иначе – одновременно) НЕнаблюдаемых величин совместные вероятности, вычисленные по правилам квантовой механики, могут оказаться отрицательными (см. параграф "Вычисление вероятности $w(f_+^{(A)}, f'^{(A)}_-, g'^{(B)}_-)$", где будет представлен пример отрицательной вероятности). Но такие вероятности невозможно измерить экспериментально, а потому эти отрицательные совместные вероятности не имеют никакого физического смысла.

В параграфе "Несимметричные проекторы и слабые величины" будут рассмотрены неразрушающие или "мягкие" измерения, которые могут приводить к отрицательным вероятностям, совместимым с экспериментом специального вида (см. параграф "Слабые величины и отрицательные вероятности"). Но аппарат неразрушающих измерений лежит за пределами канонического формализма квантовой теории, который основывается на подходе проективных измерений (см. параграф "Проективные измерения").

Смысловое различие между вектором состояния и волновой функцией

Обычно в учебниках по квантовой физике не делается никакого принципиального различия в описании квантовых систем при помощи векторов состояния и в терминах волновых функций. Однако такое достаточно тонкое различие существует. И его можно понять, если, например, задать два вопроса, которые на первый взгляд очень похожи. Но ответы на эти вопросы будут абсолютно разными.

Первый вопрос: если мы утверждаем, что квантовая система находится в состоянии $|\psi\rangle$, то насколько это утверждение зависит или не зависит от того, какие измерительные приборы мы используем для изучения микросистемы?

Второй вопрос: если мы утверждаем, что квантовая система описывается волновой функцией $\psi(\ldots)$, то насколько это утверждение зависит или не зависит от выбора типа измерительной аппаратуры?

Ответ на первый вопрос: **не зависит**. Квантовая система находится в некотором состоянии $|\psi\rangle$, даже если мы не планируем делать над этой системой никаких измерений, более того, вообще ничего о ней не знаем. То есть вектор состояния $|\psi\rangle$ отражает объективную реальность существования некоторой микросистемы в окружающем Мире.

Ответ на второй вопрос: **полностью зависит** от выбора типа измерительного макроприбора.

В этом легко убедиться. Что с точки зрения формализма квантовой механики означает утверждение: "Микросистема описывается волновой функцией $\psi(x)$"? Данное утверждение означает, что вектор состояния $|\psi\rangle$ был разложен по собственным векторам $|x\rangle$ оператора координаты $\hat{x}$ (для простоты рассматривается одномерный случай):

$$|\psi\rangle = \int dx\, \psi(x)\, |x\rangle.$$

Но такое разложение эквивалентно тому, что мы заранее условились выбрать для изучения квантовой системы макроприбор, который измеряет координату.

Мы могли бы выбрать другой макроприбор, который измеряет, например, импульс. Тогда, в силу некоммутативности операторов $\hat{p}$ и $\hat{x}$, волновые функции $\psi(x)$ уже не имели бы совершенно никакого смысла (вместо них нужно было бы рассматривать волновые функции $\psi(p)$), которые появляются как коэффициенты разложения по базису $|\,p\,\rangle$ в импульсном пространстве:

$$|\,\psi\,\rangle = \int dp\,\psi(p)\,|\,p\,\rangle.$$

В то же время квантовая система продолжает находиться в состоянии $|\,\psi\,\rangle$.

Таким образом, использование вектора состояния $|\,\psi\,\rangle$ в квантовой теории означает, что математический формализм квантовой механики признает квантовые системы объективно существующими вне зависимости от наличия или отсутствия макроскопического наблюдателя. Но наблюдаемые свойства микросистемы полностью зависят от выбора таким наблюдателем типа измерительного прибора. Результат этого субъективного выбора отражается в понятии волновой функции $\psi(\ldots)$.

Операторы измерения

Формализм проекционных операторов НЕ дает самого общего описания измерения (хотя на практике именно проективные измерения встречаются чаще всего). В качестве обобщения можно ввести набор операторов измерения $\{\hat{M}_\alpha\}$, которые НЕ ортогональны друг другу (то есть $\hat{M}_{\alpha'}\hat{M}_{\alpha''} \neq 0$, если $\alpha' \neq \alpha''$). Кроме того, в отличии от проекционных операторов, $\hat{M}_\alpha^2 \neq \hat{M}_\alpha$ и $\hat{M}_\alpha^\dagger \neq \hat{M}_\alpha$.

По аналогии с проекционными операторами, результат измерения при помощи $\hat{M}_\alpha$ можно записать следующим образом:

$$|\,\chi_\alpha\,\rangle = \frac{\hat{M}_\alpha\,|\,\psi\,\rangle}{\sqrt{w_\alpha}},$$

где w_α – по определению вероятность измерения состояния $|\,\chi_\alpha\,\rangle$. С учетом условия нормировки $\langle\,\chi_\alpha\,|\,\chi_\alpha\,\rangle = 1$, для вероятности получаем формулу

$$w_\alpha = \left\langle \psi \,\middle|\, \hat{M}_\alpha^\dagger\,\hat{M}_\alpha \,\middle|\, \psi \right\rangle = \mathbf{Tr}\left(\hat{P}_\psi \hat{M}_\alpha^\dagger\,\hat{M}_\alpha\right).$$

Так как $\sum\limits_\alpha w_\alpha = 1$, то операторы $\hat{M}_\alpha$ удовлетворяют условию полноты

$$\sum_\alpha \hat{M}_\alpha^\dagger\,\hat{M}_\alpha = \hat{1},$$

поскольку $\mathbf{Tr}\hat{P}_\psi = 1 = \sum\limits_\alpha w_\alpha = \sum\limits_\alpha \mathbf{Tr}\left(\hat{P}_\psi \hat{M}_\alpha^\dagger \hat{M}_\alpha\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{P}_\psi\left(\sum\limits_\alpha \hat{M}_\alpha^\dagger \hat{M}_\alpha\right)\right).$

Понятие о POVM–элементах

С другой стороны, проективные измерения представляют собой частный случай так называемого описания измерений при помощи положительно определенных операторов (англ. POVMs — Positive Operator–Valued Measures).

POVM–элементы $\hat{E}_\alpha$ (англ. "POVM elements") удовлетворяют условию положительной определенности

$$\left\langle \psi \middle| \hat{E}_\alpha \middle| \psi \right\rangle \geq 0$$

на любых векторах $|\,\psi\,\rangle$ из гильбертова пространства $\mathcal{H}$. Ортогональность различных операторов $\hat{E}_\alpha$ НЕ требуется. Однако операторы $\hat{E}_\alpha$ образуют неортогональное разложение единицы

$$\sum_\alpha \hat{E}_\alpha = \hat{1}.$$

Для POVM-элементов проекционный постулат М. Борна (Постулат N4) сразу формулируется в следовом варианте

$$w_\alpha = \mathbf{Tr}\left(\hat{P}_\psi \hat{E}_\alpha\right)$$

и явно не связан ни с принципом суперпозиции, ни с наличием какого-либо чистого состояния $|\,e_\alpha\,\rangle$, которое абсолютно гипотетически могло бы соответствовать измерению при помощи POVM–элемента $\hat{E}_\alpha$.

Между POVM–элементами и операторами измерений имеется прямая связь:

$$\hat{E}_\alpha = \hat{M}_\alpha^\dagger \hat{M}_\alpha,$$

из которой сразу следует, что $\hat{E}_\alpha$ – эрмитов оператор. Из этого же выражения понятно, что наиболее общая связь операторов $\hat{M}_\alpha$ и $\hat{E}_\alpha$ имеет вид

$$\hat{M}_\alpha = \hat{U}_\alpha \sqrt{\hat{E}_\alpha},$$

где $\{\hat{U}_\alpha\}$ – набор унитарных операторов (суммирования по дважды повторяющемуся индексу α нет!). Мы используем определение: оператор $\hat{B} = \sqrt{\hat{C}}$, когда выполняется равенство $\hat{B}^2 = \hat{C}$. Тогда Постулат N5 следующим образом записывается в следовом варианте:

$$\begin{aligned}\langle A \rangle_{M_\psi} &= \sum_\alpha w_\alpha \left\langle \chi_\alpha \middle| \hat{A} \middle| \chi_\alpha \right\rangle = \sum_\alpha \left\langle \psi \middle| \hat{M}_\alpha^\dagger \hat{A}\, \hat{M}_\alpha \middle| \psi \right\rangle = \\ &= \sum_\alpha \mathbf{Tr}\left(\hat{M}_\alpha^\dagger \hat{A}\, \hat{M}_\alpha\, \hat{P}_\psi\right) = \sum_\alpha \mathbf{Tr}\left(\sqrt{\hat{E}_\alpha}\, \hat{U}_\alpha^\dagger\, \hat{A}\, \hat{U}_\alpha \sqrt{\hat{E}_\alpha}\, \hat{P}_\psi\right).\end{aligned}$$

В явном виде через POVM–элементы $\hat{E}_\alpha$ среднее наблюдаемой A выразить нельзя кроме специального случая, когда $\hat{U}_\alpha = \hat{1}$.

POVM–элементы удобно использовать тогда, когда необходимо знать только вероятности измерения, но НЕ состояние микросистемы после измерения.

Впервые POVM–элементы были введены в книге

1) A. Peres, "Quantum Theory: Concepts and Methods", "Kluwer", 1993.
Они оказались крайне полезными в квантовой теории информации. Кроме того, при помощи POVM–элементов можно сформулировать альтернативную (менее наглядную, но более общую!) систему аксиом квантовой механики:

2) C. M. Caves and C. A. Fuchs, "Quantum Information: How Much Information in a State Vector?", in "The Dilemma of Einstein, Podolsky and Rosen – 60 Years Later", edited by A. Mann and M. Revzen, Ann. Israel Phys. Soc.12, pp.226–257 (1996);

3) C. A. Fuchs, "Quantum Foundations in the Light of Quantum Information", in "Decoherence and its Implications in Quantum Computation and Information Transfer", Proceedings of the NATO Advanced Research Workshop, Mykonos Greece, June 25–30, 2000, edited by A. Gonis and P. E. A. Turchi (IOS Press, Amsterdam, 2001), pp. 38–82. Also posted at quant-ph/0106166.

Пример использования POVM–элементов

Предположим, что у нас есть макроприбор, который с вероятностью $0 < w < 1$ выполняет измерение наблюдаемой A, а с вероятностью $1 - w$ выполняет измерение наблюдаемой B. Пусть соответствующие этим наблюдаемым эрмитовы операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ действуют в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$ конечной размерности d. Для простоты предположим, что оба оператора имеют невырожденный спектр и система находится в состоянии $|\,\psi\,\rangle$. Тогда

$$w(a_i|\psi) = w\,\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_\psi\,\hat{P}_{a_i}\right);$$

$$w(b_j|\psi) = (1-w)\,\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_\psi\,\hat{P}_{b_j}\right),$$

где проекторы $\hat{P}_{a_i}$ и $\hat{P}_{b_j}$ на собственные векторы $|\,a_i\,\rangle$ и $|\,b_j\,\rangle$ операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ соответственно обладают следующими свойствами:

$$\hat{P}_{a_{i'}}\,\hat{P}_{a_{i''}} = \delta_{i'\,i''}\hat{P}_{a_{i'}}\,, \qquad \sum_i \hat{P}_{a_i} = \hat{1};$$

$$\hat{P}_{b_{j'}}\,\hat{P}_{b_{j''}} = \delta_{j'\,j''}\hat{P}_{b_{j'}}\,, \qquad \sum_j \hat{P}_{b_j} = \hat{1}.$$

При этом проекторы $\hat{P}_{a_{i'}}$ и $\hat{P}_{b_{j'}}$ не ортогональны друг другу. Для этого в качестве операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ можно, например, выбрать $\hat{S}_x$ и $\hat{S}_z$. Чтобы описать такой прибор с единой точки зрения, введем POVM–операторы по правилу:

$$\hat{E}_\alpha = \begin{cases} w\,\hat{P}_{a_i}, & \text{если } \alpha = i = 1, 2, \ldots, d; \\ (1-w)\,\hat{P}_{b_j}, & \text{если } \alpha = d + j = d+1, d+2, \ldots, 2d. \end{cases}$$

Элементарно проверить, что для любого $|\,\psi\,\rangle \in \mathcal{H}$

$$\left\langle \psi \,\middle|\, \hat{E}_\alpha \,\middle|\, \psi \right\rangle = \begin{cases} w \left\langle \psi \,\middle|\, \hat{P}_{a_i} \,\middle|\, \psi \right\rangle \geq 0, & \text{если } \alpha = i \\ (1-w) \left\langle \psi \,\middle|\, \hat{P}_{b_j} \,\middle|\, \psi \right\rangle \geq 0, & \text{если } \alpha = d + j \end{cases}.$$

Кроме того,

$$\sum_\alpha \hat{E}_\alpha = w \sum_i \hat{P}_{a_i} + (1-w) \sum_j \hat{P}_{b_j} = w\,\hat{1} + (1-w)\,\hat{1} = \hat{1}.$$

Поскольку проекторы $\hat{P}_{a_{i'}}$ и $\hat{P}_{b_{j'}}$ не ортогональны, то операторы $\hat{E}_\alpha$ образуют неортогональное разложение единицы. И число этих операторов превышает размерность пространства.

В силу свойств проекционных операторов $\hat{P}^2 = \hat{P}$ и $\hat{P} = \hat{P}^\dagger$, легко можем записать операторы измерения как

$$\hat{M}_\alpha = \sqrt{\hat{E}_\alpha} = \begin{cases} \sqrt{w}\,\hat{P}_{a_i}, & \text{если } \alpha = i; \\ \sqrt{(1-w)}\,\hat{P}_{b_j}, & \text{если } \alpha = d + j. \end{cases}$$

Те, кто придумал POVM-аксиоматику квант. механики

Carlton M. Caves
University of New Mexico, USA

C. A. Fuchs
Perimeter Institute for Theoretical Physics, Canada

Еще раз о принципе суперпозиции

Выше при формулировке Постулата N3 (принципа суперпозиции)

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

предполагалось, что векторы $|\,\varphi_i\,\rangle$ ортогональны друг другу, т. е. что $\langle\,\varphi_{i'}\,|\,\varphi_{i''}\,\rangle = \delta_{i'\,i''}$. Такой подход ведет к простейшей модели проективных измерений, которая была рассмотрена в параграфе "Проективные измерения". Эта модель была введена на заре создания квантовой теории, когда техника измерения физических характеристик микросистем была еще крайне примитивна. Принимая во внимание более общее описание измерения при помощи неортогональных операторов измерения (см. параграф "Операторы измерения"), можно утверждать, что в терминах векторов состояния справедлива более общая трактовка принципа суперпозиции в виде

$$|\,\psi\,\rangle = \sum_i d_i\,|\,\chi_i\,\rangle,$$

где векторы $|\,\chi_i\,\rangle$ уже могут быть НЕ ортогональны друг другу.

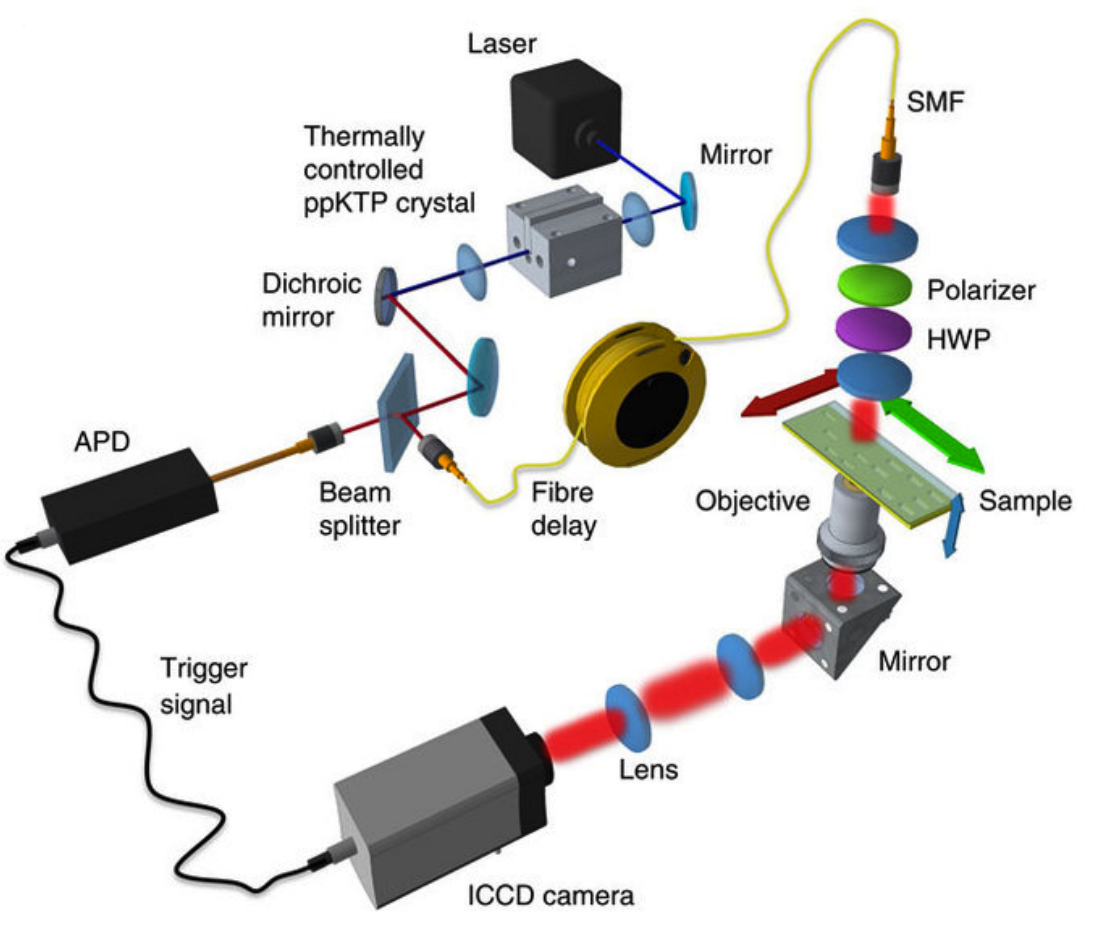
Однако в силу условия полноты для операторов измерения, проекторы $\hat{P}_{\chi_i} = |\,\chi_i\,\rangle\langle\,\chi_i\,|$ должны составлять неортогональное разложение единицы

$$\sum_i \hat{P}_{\chi_i} = \hat{1},$$

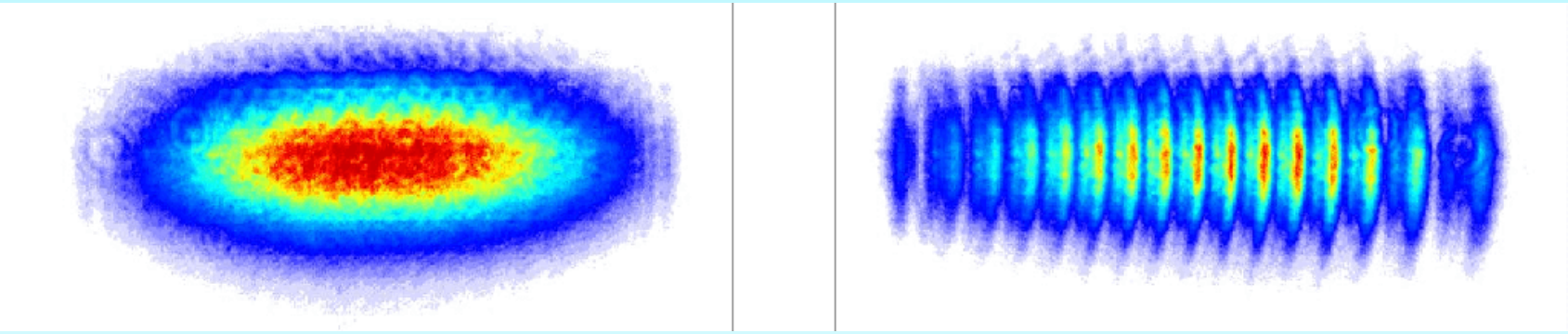
которое гарантирует правильную нормировку полной вероятности, если вероятности измерений вычислять согласно проекционному постулату М.Борна (Постулат N4):

$$w_i = \mathbf{Tr}\left(\hat{P}_\psi\,\hat{P}_{\chi_i}\right).$$

В качестве примера эксперимента, для описания которого может понадобится неортогональное разложение, можно привести эксперимент по интерференции фотонов через три щели, когда щели влияют друг на друга (O. S. Magana-Loaiza, I. De Leon, M. Mirhosseini, R. Fickler, A. Safari, U. Mick, B. McIntyre, P. Banzer, B. Rodenburg, G. Leuchs, R. W. Boyd, "Exotic Looped Trajectories of Photons in Three-Slit Interference", Nat. Commun. 7, 13987 (2016)), выполненный под руководством Р. Бойда. Если, как предполагалось в параграфе "Правила суперотбора", щели не влияют друг на друга, то соответствующие вектора прохода фотона через каждую щель ортогональны друг другу.



В эксперименте Р. Бойда щели были вырезаны в слое золота, напылённого на прозрачное стекло. Поскольку золото – хороший проводник, то в нём легко возбуждаются так называемые плазмоны. Плазмоны — это связанное состояние фотона и электрона в металле. За счёт них свет оказывается как бы привязанным к поверхности металла и может эффективно распространяться вдоль неё на относительно большие расстояния. Существование плазмонов увеличивает влияние одной щели на другую.



Изображение ОДНОЙ щели на экране, когда плазмоны не возбуждены (слева) и когда плазмоны возбуждены (справа).

Поэтому вектора состояния прохождения фотона через каждую щель уже нельзя считать независимыми, то есть ортогональными.

Использовался источник света, ширина луча которого меньше расстояния между щелями. Им освещалась только одна щель. При этом, если вектора состояния прохождения фотона через каждую щель ортогональны друг другу, то картина на экране не должна зависеть от того, есть другие щели, кроме освещаемой, или нет (эти щели находятся в тени). И действительно, когда использовался свет с такой поляризацией, что плазмоны не могли возбудиться, на экране наблюдалась отчетливая узкая полоса, расположенная напротив освещённой щели (см. рис. слева). Но когда поляризацию меняли, и плазмоны начинали эффективно возбуждаться, на экране возникала характерная интерференционная картина (см. рис. справа).

Несимметричные проекторы и слабые величины

Еще одним обобщением проектора $\hat{P}_\psi = |\,\psi\,\rangle\langle\,\psi\,|$ является несимметричный проекционный оператор $\hat{P}_{\varphi\,\psi} \sim |\,\psi\,\rangle\langle\,\varphi\,|$. Согласно условию нормировки $\mathbf{Tr}\,\hat{P}_\psi = \langle\,\psi\,|\;\psi\,\rangle = 1$. Чтобы $\mathbf{Tr}\,\hat{P}_{\varphi\,\psi}$ тоже был равен 1, несимметричный проектор необходимо записать в виде:

$$\hat{P}_{\varphi\,\psi} = \frac{|\,\psi\,\rangle\langle\,\varphi\,|}{\langle\,\varphi\,|\;\psi\,\rangle}.$$

Легко проверить, что для такого несимметричного проектора выполнено основное свойство проекционных операторов

$$\hat{P}^2_{\varphi\,\psi} = \hat{P}_{\varphi\,\psi}\,\hat{P}_{\varphi\,\psi} = \frac{|\,\psi\,\rangle\langle\,\varphi\,|\;\psi\,\rangle\langle\,\varphi\,|}{\langle\,\varphi\,|\;\psi\,\rangle^2} = \frac{|\,\psi\,\rangle\langle\,\varphi\,|}{\langle\,\varphi\,|\;\psi\,\rangle} = \hat{P}_{\varphi\,\psi}.$$

При помощи несимметричных проекторов можно определить так называемые слабые величины (англ. "Weak Values") по формуле, которая обобщает Постулат N5. Слабая величина наблюдаемой A, которой поставлен в соответствие эрмитов оператор $\hat{A}$, задается выражением:

$$\langle\,A\,\rangle_w = \mathbf{Tr}\left(\hat{P}_{\varphi\,\psi}\,\hat{A}\right) = \frac{\left\langle\,\varphi\,\middle|\,\hat{A}\,\middle|\,\psi\,\right\rangle}{\langle\,\varphi\,|\;\psi\,\rangle}.$$

Пусть эрмитов оператор $\hat{A}$ (для простоты!) имеет дискретный невырожденный спектр и $\hat{A}\,|\,a_i\,\rangle = a_i\,|\,a_i\,\rangle$. Напомним, что согласно спектральной теореме оператор $\hat{A}$ представим в виде

$$\hat{A} = \sum_i a_i\,\hat{P}_i,$$

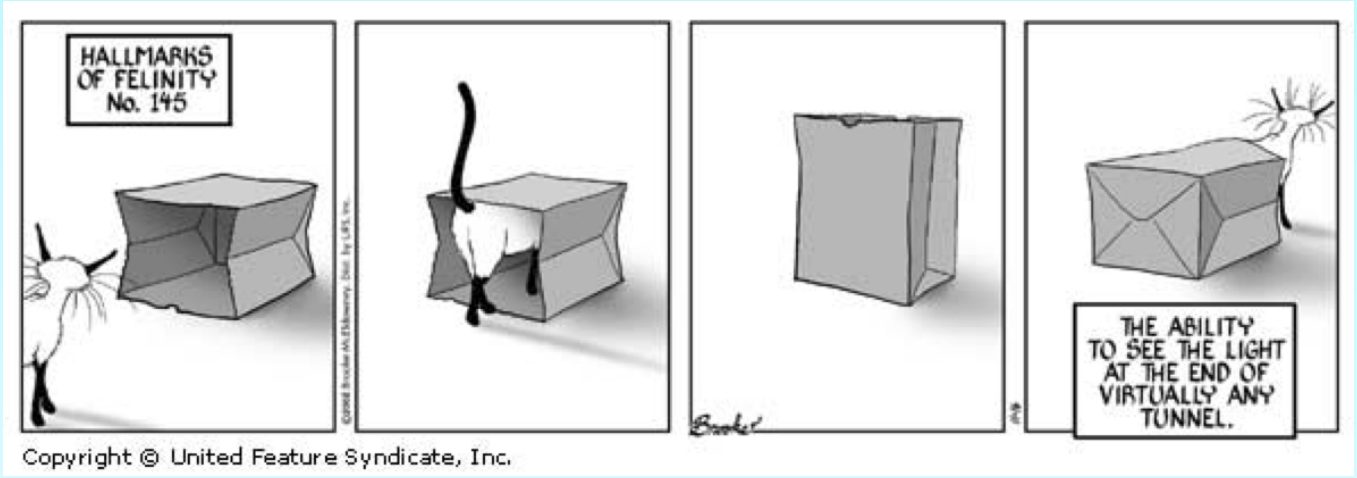
где $\hat{P}_i = |\,a_i\,\rangle\langle\,a_i\,|$ – проектор на чистое состояние $|\,a_i\,\rangle$. Тогда формула для $\langle\,A\,\rangle_w$ перепишется в виде

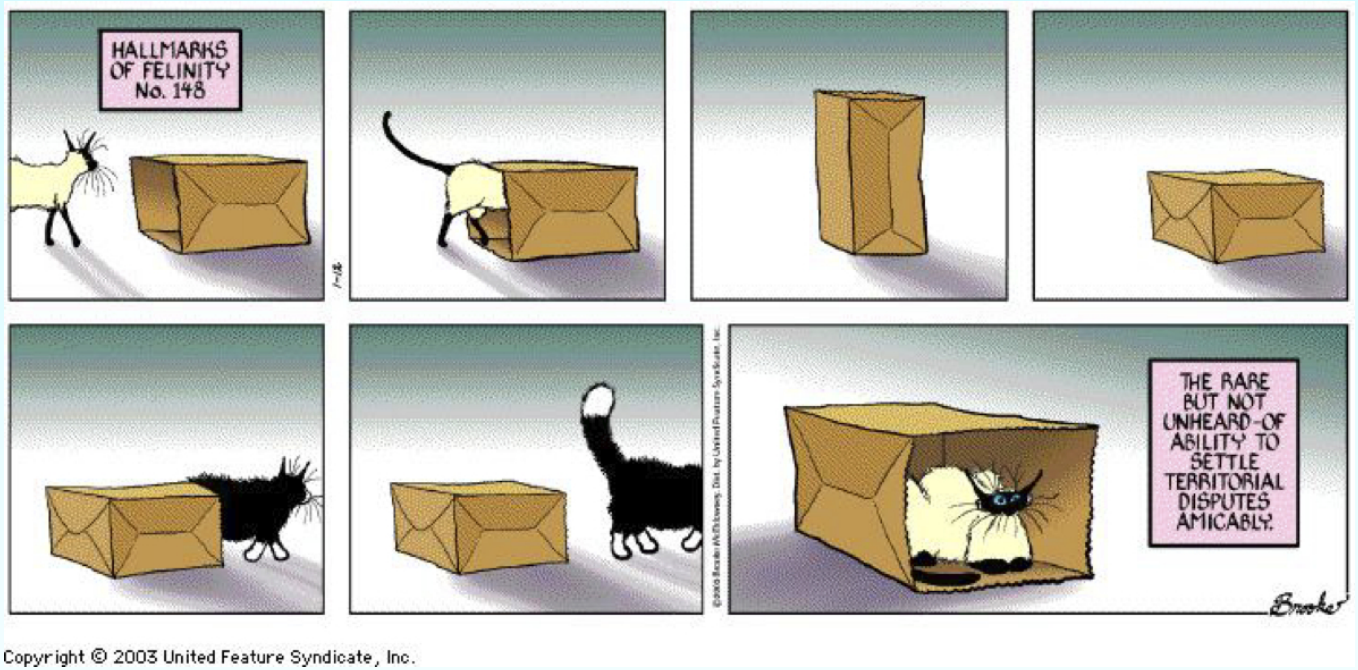
$$\langle\,A\,\rangle_w = \sum_i a_i\,\frac{\left\langle\,\varphi\,\middle|\,\hat{P}_i\,\middle|\,\psi\,\right\rangle}{\langle\,\varphi\,|\,\psi\,\rangle}.$$

С другой стороны, согласно определению среднего, $\langle\,A\,\rangle_w = \sum_i a_i\,w(i\,|\,\psi\,|\,\varphi)$, где $w(i'\,|\,\psi\,|\,\varphi)$ – **условная вероятность** измерить значение $a_{i'}$ из спектра наблюдаемой A, если начальное состояние системы было $|\,\psi\,\rangle$, а конечное – $|\,\varphi\,\rangle$. Таким образом

$$w(i'\,|\,\psi\,|\,\varphi) = \frac{\left\langle\,\varphi\,\middle|\,\hat{P}_{i'}\,\middle|\,\psi\,\right\rangle}{\langle\,\varphi\,|\,\psi\,\rangle}.$$

Эту формулу далее будет полезно сравнить с формулой **Ааронова–Бергмана–Лебовица**.





Симметричные (верхний рисунок) и несимметричные (нижний рисунок) проекторы в терминах кошек и коробок. Рисунки взяты с сайта http://www.oocities.org/tawley/felinity.html.

Между слабыми величинами $\langle A \rangle_w$ и "обычными средними" $\langle A \rangle_\psi$ существует прямая связь. Пусть

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

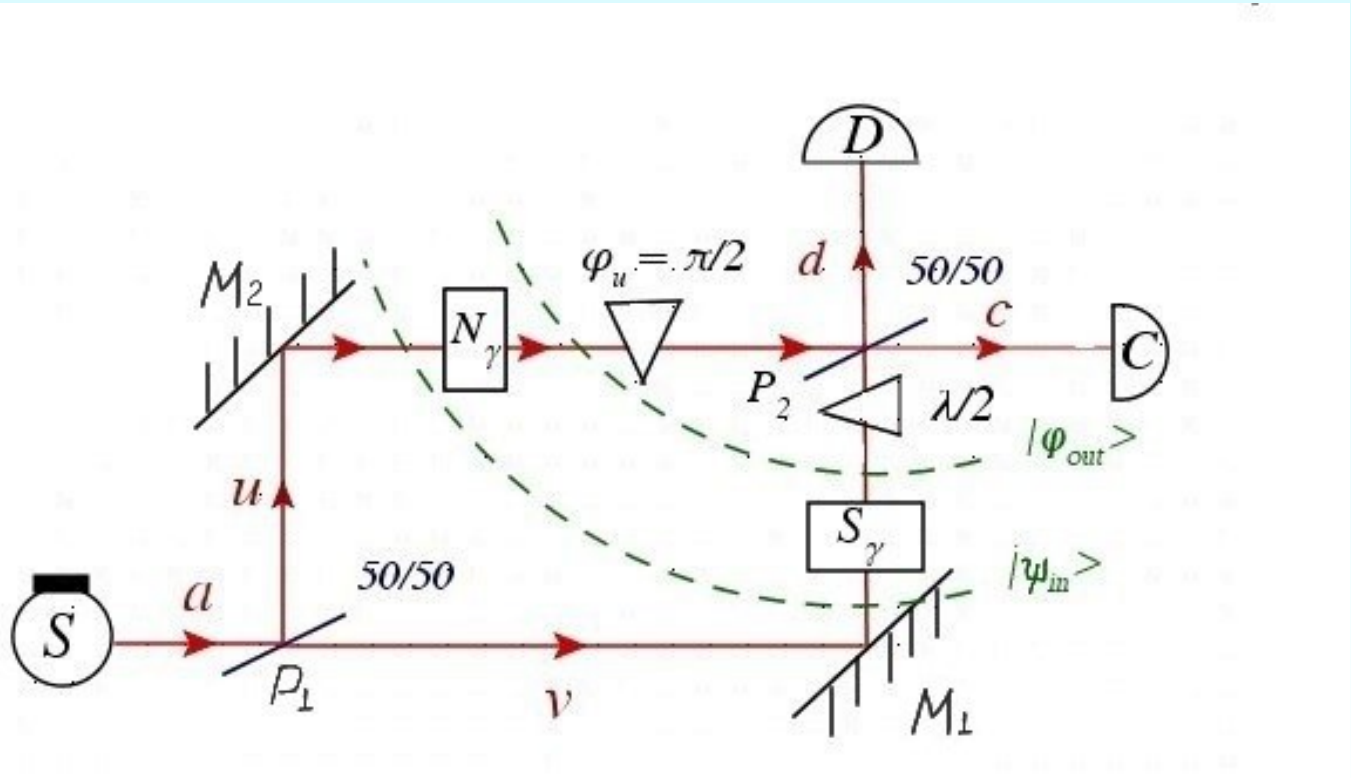
где вектора $|\varphi_i\rangle$ образуют базис $\langle \varphi_{i'} | \varphi_{i''} \rangle = \delta_{i' i''}$. Тогда $c_i = \langle \varphi_i | \psi \rangle$, вероятность $w_i = |c_i|^2$ и $\sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| = \hat{1}$. Вычислим среднее значение слабой величины для наблюдаемой A в состоянии $|\psi\rangle$. Имеем:

$$\begin{aligned}
\langle \bar{A} \rangle_w^{(\psi)} &= \sum_i w_i \langle A \rangle_w^{(\varphi_i)} = \sum_i c_i^* c_i \frac{\left\langle \varphi_i \middle| \hat{A} \middle| \psi \right\rangle}{c_i} = \\
&= \sum_i c_i^* \left\langle \varphi_i \middle| \hat{A} \middle| \psi \right\rangle = \sum_i \langle \psi | \varphi_i \rangle \left\langle \varphi_i \middle| \hat{A} \middle| \psi \right\rangle = \\
&= \left\langle \psi \middle| \left(\sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \right) \hat{A} \middle| \psi \right\rangle = \left\langle \psi \middle| \hat{1}\,\hat{A} \middle| \psi \right\rangle = \\
&= \left\langle \psi \middle| \hat{A} \middle| \psi \right\rangle = \langle A \rangle_\psi .
\end{aligned}$$

Впервые слабые величины были введены в работе **Y. Aharonov, D. Albert, and L. Vaidman, Phys. Rev. Lett. 60, 1351 (1988)**.

Квантовый Чеширский Кот

Использование слабых величин может приводить к забавным парадоксам. Один из них позволяет получить ненулевое значение поляризации фотона в канале интерферометра даже в том случае, когда по рассматриваемому каналу фотон пролететь НЕ может. Это явление получило название квантового Чеширского Кота (англ. "Quantum Cheshire Cat") и было описано в работе Y. Aharonov, S. Popescu, D. Rohrlich, P. Skrzypczyk, "Quantum Cheshire Cats", New J. of Phys., 15, 113015 (2013).



На рисунке "N_γ" – детектор для мягкого (неразрушающего, англ. "non–demolition") измерения числа фотонов; "S_γ" – детектор для мягкого измерения поляризации фотона. Фазовая задержка $\varphi_u = \pi/2$. Полуволновая пластинка $\lambda/2$ меняет вертикальную поляризацию фотона $|\,V\,\rangle$ на горизонтальную $|\,H\,\rangle$. Остальные обозначения стандартны и взяты из параграфа "Конструктор для быстрого анализа процессов однофотонной интерференции".

Пусть источник фотонов "S" производит фотоны с горизонтальной поляризацией $|\,H\,\rangle$, а детекторы "C" и "D" могут не только регистрировать фотон, но и отслеживать его поляризацию (соответствующие усложнения в конструкции детекторов НЕ приведены на рисунке). Тогда

$$|\,a\,\rangle\,|\,H\,\rangle\,|\,C_0\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle \to \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(i\,|\,u\,\rangle + |\,v\,\rangle\Big)\,|\,H\,\rangle\,|\,C_0\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle \to$$

$$\to \frac{i}{\sqrt{2}}\Big(i\,|\,u\,\rangle + |\,v\,\rangle\Big)\,|\,H\,\rangle\,|\,C_0\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle \equiv |\,\Psi_{in}\,\rangle.$$

Состояние $|\,\Psi_{in}\,\rangle$ по–английски носит название "pre-selected state". В русском языке устоявшийся термин отсутствует.

После выполнения неразрушающих измерений детекторами "N_γ" и "S_γ" состояние квантовой системы изменилось. Пусть система перешла в состояние

$$|\,\Phi_{out}\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\,|\,u\,\rangle\,|\,H\,\rangle + |\,v\,\rangle\,|\,V\,\rangle\Big)\,|\,C_0\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle.$$

Состояние $|\,\Phi_{out}\,\rangle$ носит название **"post-selected state"**. Посмотрим, что дальше будет происходить в интерферометре с данным состоянием.

$$|\,\Phi_{out}\,\rangle \to \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(i\,|\,u\,\rangle\,|\,H\,\rangle + |\,v\,\rangle\,|\,H\,\rangle\Big)\,|\,C_0\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle \to$$

$$\to \left[\frac{i}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\,|\,c\,\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}\,|\,d\,\rangle\right) + \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{i}{\sqrt{2}}\,|\,c\,\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\,d\,\rangle\right)\right]|\,H\,\rangle\,|\,C_0\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle \to$$

$$\to i\,|\,c\,\rangle\,|\,H\,\rangle\,|\,C_0\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle \to i\,|\,H\,\rangle\,|\,C\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle.$$

Таким образом, если сработал **ТОЛЬКО** детектор "C" и этот детектор зарегистрировал попадание фотона с поляризацией $|\,H\,\rangle$, то можно утверждать, что после прохождения детекторов "N_γ" и "S_γ" фотон действительно был в состоянии $|\,\Phi_{out}\,\rangle$.

Введем оператор прохождения фотона по пути $P_1 M_2 P_2$:

$$\hat{P}_{122} = |\, u \,\rangle \langle\, u \,|.$$

Тогда условную вероятность прохождения фотона по пути $P_1 M_2 P_2$ можно вычислить по формуле для $w(i \,|\, \psi \,|\, \varphi)$ из параграфа **"Несимметричные проекторы и слабые величины"**:

$$w(P_1 M_2 P_2) = \frac{\left\langle \Phi_{out} \,\middle|\, \hat{P}_{122} \,\middle|\, \Psi_{in} \right\rangle}{\langle\, \Phi_{out} \,|\, \Psi_{in} \,\rangle} = \frac{-1/2}{-1/2} = 1.$$

При вычислениях было использовано, что $\langle\, H \,|\, V \,\rangle = 0$ и $\langle\, u \,|\, v \,\rangle = 0$. Аналогично можно ввести проектор на плече $P_1 M_1 P_2$ по формуле $\hat{P}_{112} = |\, v \,\rangle \langle\, v \,|$ и найти, что $w(P_1 M_1 P_2) = 0$.

Таким образом, если на вход интерферометра был подан фотон в состоянии $|\, a \,\rangle \,|\, H \,\rangle$, а на выходе интерферометра сработал только детектор "C", который зарегистрировал фотон в состоянии $|\, H \,\rangle$, то можно утверждать, что с единичной вероятностью фотон прошел по пути $P_1 M_2 P_2$.

Теперь найдем среднюю (слабую) поляризацию фотона на пути $P_1 M_1 P_2$, по которому, напомним, фотон НЕ ПРОХОДИЛ. Соответствующий оператор поляризации

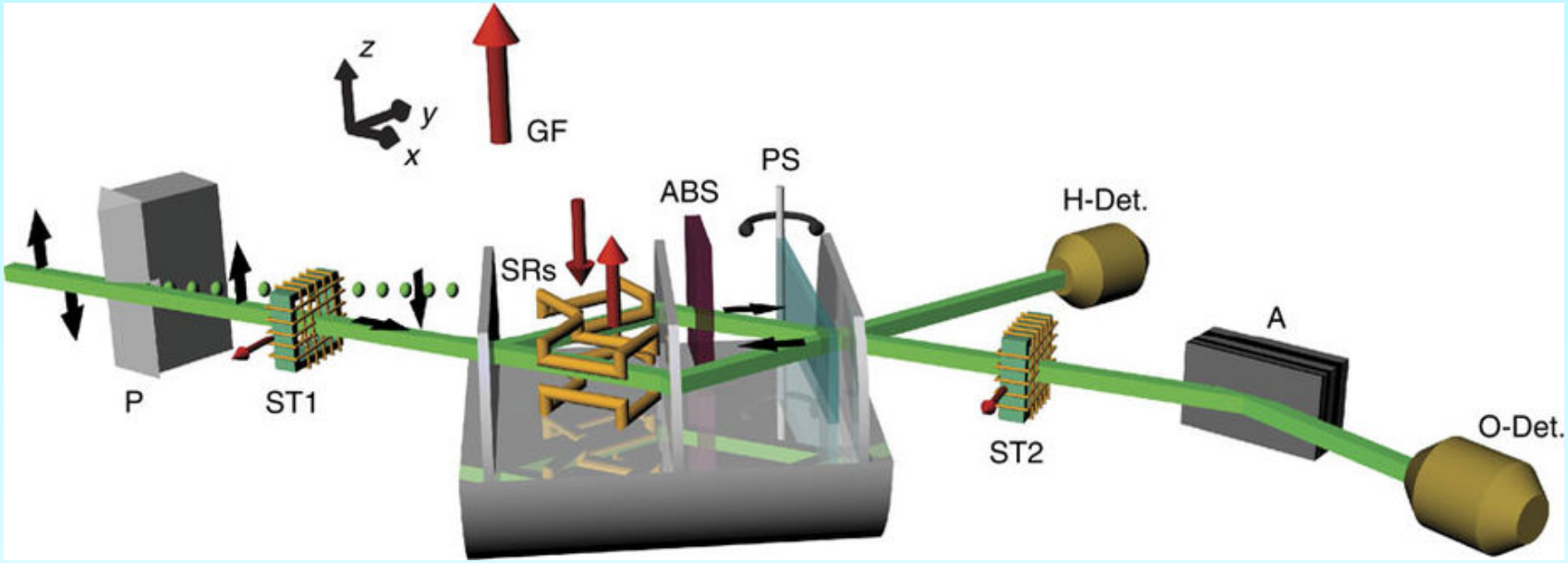
$$\hat{S}_{112} = |\, v \,\rangle\langle\, v \,| \Big(|+\rangle\langle +| - |-\rangle\langle -| \Big),$$

где $|+\rangle = (|\, H \,\rangle + i\,|\, V \,\rangle)/\sqrt{2}$ и $|-\rangle = (|\, H \,\rangle - i\,|\, V \,\rangle)/\sqrt{2}$. Заметим, что поскольку $\left[\hat{P}_{122},\, \hat{S}_{112}\right] = 0$, то вероятность прохождения фотона по пути $P_1 M_2 P_2$ и поляризация фотона на пути $P_1 M_1 P_2$ совместно измеримы.

Для среднего значения слабой поляризации получаем

$$\langle\, S_\gamma(P_1 M_1 P_2) \,\rangle_w = \frac{\left\langle\, \Phi_{out} \,\middle|\, \hat{S}_{112} \,\middle|\, \Psi_{in} \,\right\rangle}{\langle\, \Phi_{out} \,|\, \Psi_{in} \,\rangle} = \frac{-1/2}{-1/2} = 1.$$

Таким образом мы получили парадоксальную (с классической точки зрения) ситуацию: фотон имеет НЕнулевую (максимальную!) поляризацию в том плече интерферометра, по которому он проходит с нулевой вероятностью! Прямо как у Чеширского Кота: кота уже нет, но улыбка его осталась.



Экспериментальное подтверждение существования квантового Чеширского Кота было получено в работе T. Denkmayr, H. Geppert, S. Sponar, H. Lemmel, A. Matzkin, J. Tollaksen, Y. Hasegawa, "Observation of a quantum Cheshire Cat in a matter-wave interferometer experiment", Nat. Commun. 5, 4492 (2014).

Пучок нейтронов поляризуется, проходя сквозь магнитные двулучепреломляющие призмы (P). Чтобы предотвратить деполяризацию пучка, всю экспериментальную установку в определенном направлении пронизывает магнитное поле (GF). Устройство для изменения направления спина (ST1) поворачивает спин нейтрона на угол $\pi/2$.

Предварительный отбор волновой функции микросистемы $|\Psi_{in}\rangle$ завершается при помощи двух устройств для поворота спина (SR) внутри нейтронного интерферометра. Эти устройства также используются для выполнения слабых измерений. Поглотители (ABS) вставляются в пути пучка, когда измеряются вероятности прохождения нейтронов по одному из плеч интерферометра. Фазовращатель (PS) позволяет настраивать относительную фазу между пучками, которые идут по разным плечам интерферометра. Два исходящих из интерферометра пучка регистрируются детекторами H и O в отраженном и прямом направлениях соответственно. Только нейтроны, попадающие в детектор O, подвержены постселекции с использованием устройства для изменения направления спина (ST2) и спинового анализатора (A).

Слабые величины и отрицательные вероятности

Рассмотрим трехщелевой эксперимент из параграфа "Правила суперотбора". Напомним, что рассматривается pre-selected state

$$|\,\Psi\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(|\,1\,\rangle + |\,2\,\rangle + |\,3\,\rangle\right)$$

микрочастицы до прохождения трех щелей и post-selected state вида

$$|\,\Phi\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(|\,1\,\rangle - |\,2\,\rangle + |\,3\,\rangle\right),$$

которое получается после прохождения частицей щелей и взаимной интерференции на самой себе. Оператор прохождения микрочастицы сквозь i–ю щель имеет вид $\hat{P}_i = |\,i\,\rangle\langle\,i\,|$. Тогда условная вероятность прохождения через первую щель будет:

$$w_1 = w(1\,|\,\Psi\,|\,\Phi) = \frac{\left\langle\,\Phi\,\middle|\,\hat{P}_1\,\middle|\,\Psi\,\right\rangle}{\langle\,\Phi\,|\;\Psi\,\rangle} = \frac{1/3}{(1-1+1)/3} = 1.$$

Аналогично $w_3 = w(3\,|\,\Psi\,|\,\Phi) = 1$. Однако для второй щели

$$w_2 = w(2\,|\,\Psi\,|\,\Phi) = \frac{\left\langle \Phi \,\middle|\, \hat{P}_2 \,\middle|\, \Psi \right\rangle}{\langle \Phi \,|\, \Psi \rangle} = \frac{-1/3}{(1-1+1)/3} = -1.$$

Вопрос: как можно проинтерпретировать подобный результат с точки зрения эксперимента?

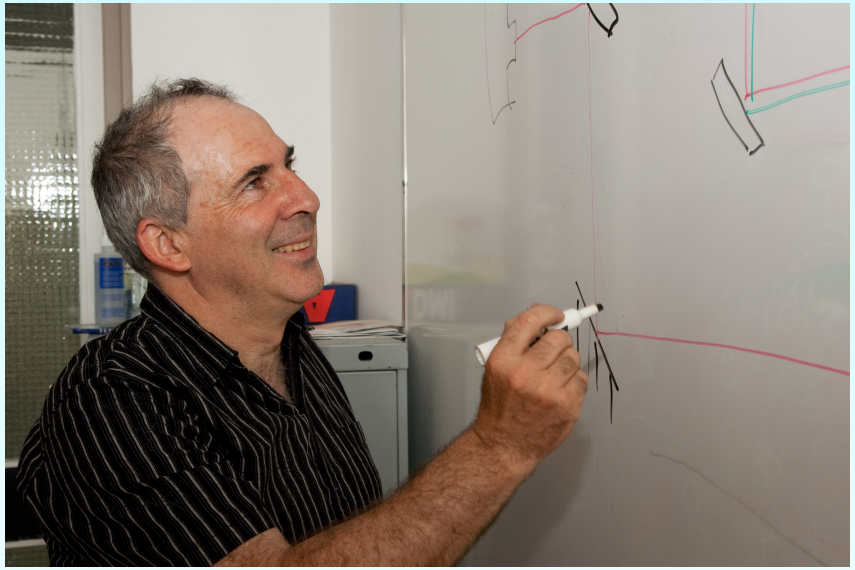
Ответ: предположим, что у нас есть положительно заряженная микрочастица, которая может находиться в состояниях $|\,1\,\rangle$, $|\,2\,\rangle$ или $|\,3\,\rangle$ так, что ее начальное и конечное состояния описывались бы $|\,\Psi\,\rangle$ и $|\,\Phi\,\rangle$ соответственно. Для того, чтобы проверить, находится ли частица в положении $|\,i\,\rangle$, возьмем электрон, который будет лететь вдоль экрана со щелями. Соответствующий гамильтониан взаимодействия можно написать в форме

$$\mathcal{H}^{(i)} = \hat{x}_e \otimes \hat{P}_i,$$

где $\hat{x}_e$ – оператор координаты электрона. Тогда у щелей "1" и "3" электрон будет притягиваться к щелям, а от щели "2", наоборот, отталкиваться, как будто бы в состоянии $|\,2\,\rangle$ находится не положительно, а отрицательно заряженная частица. Это достаточно парадоксальное толкование находит свое экспериментальное подтверждение (см. K.J. Resch, J.S. Lundeen, A.M. Steinberg, "Experimental Realization of the Quantum Box Problem", Phys. Lett A, 324, p.125 (2004)).

Слабые величины, эффект Ааронова–Бома, задача о квантовой бомбе и много всего другого придумано ими

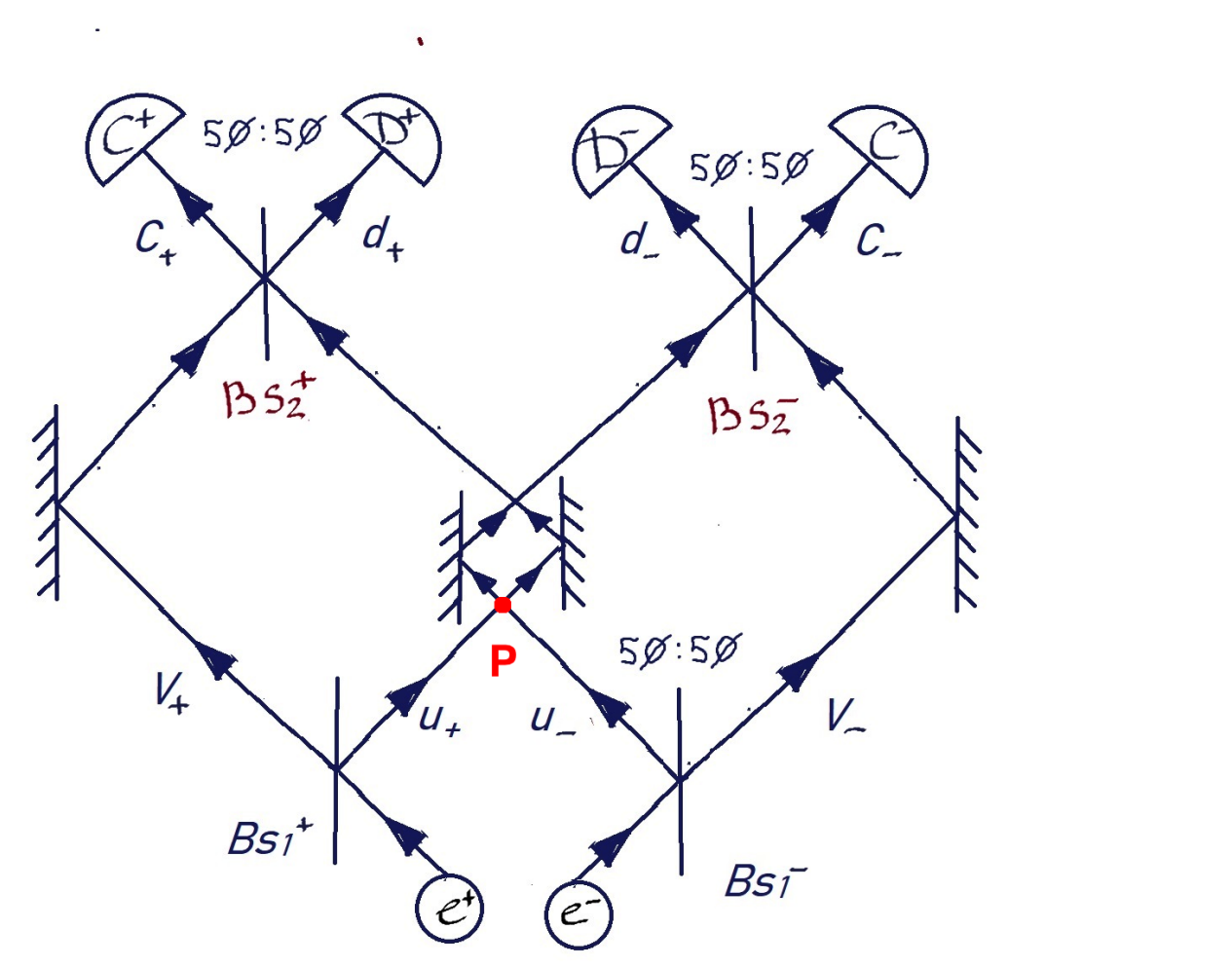
проф. Якир Ааронов
род. 28.08.1932
Университет Чепмена, США



проф. Лев Вайдман
род. 04.06.1955
Тель-Авивский университет, Израиль

Парадокс Харди (Hardy's Paradox)

Парадокс Харди был предложен Люсьеном Харди в работе: L. Hardy, "Quantum mechanics, local realistic theories, and Lorentz-invariant realistic theories", PRL 68, pp. 2981–2984 (1992).



Рассмотрим два интерферометра а la интерферометр Маха–Цандера, но не для фотонов, а для электронов e^- и позитронов e^+. Как было показано в параграфе "Задача о квантовой бомбе", если электрон и позитрон могли бы без помех проходить каждый через свой интерферометр, то на выходе всегда срабатывали бы только детекторы C^+ и C^-.

Теперь объединим оба интерферометра так, что их плечи u_+ и u_- пересекаются в точке "P". Если электрон и позитрон оба идут по этим путям, то со 100%–й вероятностью происходит аннигиляция $e^+e^- \to \gamma\gamma$ или в обозначениях Харди $|\, u_+ \,\rangle\, |\, u_- \,\rangle \to |\, \gamma\gamma \,\rangle$.

Теперь давайте рассмотрим ситуацию, когда аннигиляция НЕ произошла, но сработал детектор D^+. В этом случае e^- должен пройти по пути u_- и как-то повлиять на вектор состояния позитрона $|\, u_+ \,\rangle$ (например, изменить фазу данного состояния) без того, чтобы сам позитрон прошел по пути u_+. Тут прослеживается прямая аналогия с эффектом Ааронова–Бома.

В квантовой механике такая ситуация носит название "измерения без взаимодействия" (Interraction Free Measurement). Задача о квантовой бомбе тоже относится к классу подобных измерений.

Таким образом срабатывание детектора D^+ сигнализирует нам о том, что e^- прошел по пути u_-. Если сработает детектор D^-, то в силу симметрии задачи это должно указывать на то, что e^+ прошел по пути u_+.

Из приведенных выше рассуждений должно стать "очевидным", что совместное срабатывание детекторов D^+ и D^- без аннигиляционной вспышки в подобной схеме абсолютно НЕвозможно. Так ли это? Проведем прямые вычисления.

$$
\begin{aligned}
& |\, e^+ \,\rangle\, |\, e^- \,\rangle\, |\, C_0^+ \,\rangle\, |\, D_0^+ \,\rangle\, |\, C_0^- \,\rangle\, |\, D_0^- \,\rangle \to \\
\to\ & \frac{1}{2}\Big(i\,|\, u_+ \,\rangle + |\, v_+ \,\rangle\Big)\Big(i\,|\, u_- \,\rangle + |\, v_- \,\rangle\Big)\, |\, C_0^+ \,\rangle\, |\, D_0^+ \,\rangle\, |\, C_0^- \,\rangle\, |\, D_0^- \,\rangle \to \\
\to\ & \frac{1}{2}\Big(-|\,\gamma\gamma\,\rangle + i\,|\, u_+ \,\rangle\, |\, v_- \,\rangle + i\,|\, v_+ \,\rangle\, |\, u_- \,\rangle + |\, v_+ \,\rangle\, |\, v_- \,\rangle\Big) \times \\
& \times\, |\, C_0^+ \,\rangle\, |\, D_0^+ \,\rangle\, |\, C_0^- \,\rangle\, |\, D_0^- \,\rangle \to \\
\to\ & \frac{1}{2}\Big(-|\,\gamma\gamma\,\rangle + \frac{i}{2}\Big(|\, c_+ \,\rangle + i\,|\, d_+ \,\rangle\Big)\Big(i\,|\, c_- \,\rangle + |\, d_- \,\rangle\Big) + \\
& + \frac{i}{2}\Big(i\,|\, c_+ \,\rangle + |\, d_+ \,\rangle\Big)\Big(|\, c_- \,\rangle + i\,|\, d_- \,\rangle\Big) + \\
& + \frac{1}{2}\Big(i\,|\, c_+ \,\rangle + |\, d_+ \,\rangle\Big)\Big(i\,|\, c_- \,\rangle + |\, d_- \,\rangle\Big)\Big)\, |\, C_0^+ \,\rangle\, |\, D_0^+ \,\rangle\, |\, C_0^- \,\rangle\, |\, D_0^- \,\rangle \to
\end{aligned}
$$

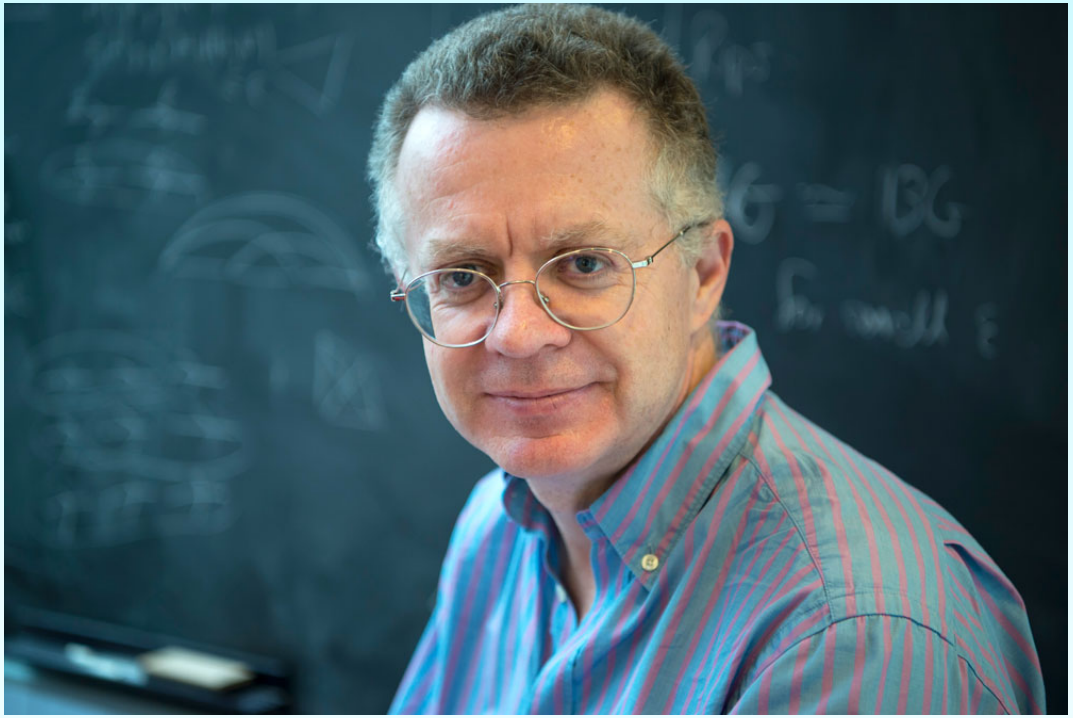
$$\to \quad \frac{1}{4}\Big(-2\,|\,\gamma\gamma\,\rangle - 3\,|\,c_+\,\rangle\,|\,c_-\,\rangle + i\,|\,c_+\,\rangle\,|\,d_-\,\rangle + i\,|\,d_+\,\rangle\,|\,c_-\,\rangle - |\,d_+\,\rangle\,|\,d_-\,\rangle\Big)\times$$
$$\times\,|\,C_0^+\,\rangle\,|\,D_0^+\,\rangle\,|\,C_0^-\,\rangle\,|\,D_0^-\,\rangle \to$$
$$\to \quad \frac{1}{4}\Big(-2\,|\,\gamma\gamma\,\rangle\,|\,C_0^+\,\rangle\,|\,D_0^+\,\rangle\,|\,C_0^-\,\rangle\,|\,D_0^-\,\rangle - 3\,|\,C^+\,\rangle\,|\,D_0^+\,\rangle\,|\,C^-\,\rangle\,|\,D_0^-\,\rangle +$$
$$+\,i\,|\,C^+\,\rangle\,|\,D_0^+\,\rangle\,|\,C_0^-\,\rangle\,|\,D^-\,\rangle + i\,|\,C_0^+\,\rangle\,|\,D^+\,\rangle\,|\,C^-\,\rangle\,|\,D_0^-\,\rangle -$$
$$-\,|\,C_0^+\,\rangle\,|\,D^+\,\rangle\,|\,C_0^-\,\rangle\,|\,D^-\,\rangle\Big).$$

Теперь обратим внимание на пятое слагаемое в финальной итерации. Оно имеет вид $|\,C_0^+\,\rangle\,|\,D^+\,\rangle\,|\,C_0^-\,\rangle\,|\,D^-\,\rangle$. То есть сработали оба детектора D^+ и D^-, но аннигиляции не произошло! И вероятность такого события равна $|-1/4|^2 = 1/16$. То есть "интуитивно понятное" и "очевидное" рассуждение оказалось ошибочным! В этом и состоит парадокс Харди.

Почему произошла ошибка? Потому что в квантовом мире мы непоследовательно применяли квантовые рассуждения, периодически скатываясь к "очевидным" классическиподобным рассуждениям.

Вам, конечно, известно, что физика не щадит никого?

Люсьен Харди
в молодые годы



Люсьен Харди
в настоящее время

Часть 2

МАТРИЦА ПЛОТНОСТИ: ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА

Чистые и 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 НЕ является наиболее общим и, более того, НЕ всегда возможно!

Например, в реальных экспериментах квантовые системы приготавливаются и/или измеряются при помощи неидеальных макроприборов. Поэтому типичная экспериментальная ситуация состоит в том, что после приготовления/измерения неидеальным макроприбором 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. При этом, вообще говоря, не существует чистого состояния $|\,\psi\,\rangle$, которое можно сопоставить такой 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 недостаточно задания одного вектора состояния $|\,\psi\,\rangle$, называются смешанными состояниями.

Заметим, что тут нет противоречия с Постулатом N1 из параграфа "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. Даже если такую систему как целое можно задать при помощи вектора состояния $|\psi\rangle$, то для ее подсистем подобное описание во многих случаях не представляется возможным. Также при помощи векторов состояния нельзя описать открытые микросистемы и, следовательно, процедуру измерения в квантовой механике.

Таким образом понятие смешанного состояния является более общим, чем понятие чистого состояния. А вероятности W_ℓ могут иметь как классическую, так и квантовую природу.

Матрица плотности чистого состояния

Чистые состояния можно задавать не только при помощи вектора состояния $|\psi\rangle$ в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$, но и при помощи проекционного оператора $\hat{P}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ на это состояние, который определен на прямом произведении $\mathcal{H}\otimes\mathcal{H}$ гильбертовых пространств. 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:

$$\hat{\rho} \stackrel{\mathbf{def}}{=} \hat{P}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|.$$

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 определять не только для базисных состояний, но и для любых чистых состояний $|\psi\rangle$.

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

а) эрмитовость: $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$;

б) диагональные элементы ρ_{ii} 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: $\langle A \rangle_\rho = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{A}\right)$.

Напомним, что матрица (оператор), у которой все диагональные матричные элементы неотрицательны, в математике называется положительно определенной матрицей (положительно определенным оператором). Следовательно, по условию б) матрица плотности $\hat{\rho}$ – положительно определенный оператор.

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 формулировку со следом.

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

а) эрмитовость очевидна из того, что оператор $\hat{\rho}$ по определению является проектором на чистое состояние $|\,\psi\,\rangle$;

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

в) в базисе $\{|\,n_i\,\rangle\}$ след матрицы плотности $\hat{\rho}$ имеет вид:

$$\mathbf{Tr}\hat{\rho} = \sum_i \langle\, n_i\,|\,\hat{\rho}\,|\;n_i\,\rangle = \sum_i \langle\, n_i\,|\;\psi\,\rangle\,\langle\,\psi\,|\;n_i\,\rangle = \sum_i \langle\,\psi\,|\;n_i\,\rangle\,\langle\, n_i\,|\;\psi\,\rangle =$$

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

г) поскольку $\hat{\rho} \equiv \hat{P}_\psi$, то по свойству проектора $\hat{\rho}^2 = \hat{P}_\psi^2 = \hat{P}_\psi = \hat{\rho}$. Тогда $\mathbf{Tr}\,\hat{\rho}^2 = \mathbf{Tr}\,\hat{\rho} = 1$ согласно результату пункта в);

д) данное свойство совпадает с Постулатом N5 о соответствии наблюдаемых величин и операторов из параграфа "Постулаты квантовой механики для чистых состояний".

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 базисе 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

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

В качестве альтернативного варианта вычисления элементов матрицы плотности можно воспользоваться формальным определением операции прямого произведения бра– и кет–векторов. Именно, в базисе $\{|\, n_i \,\rangle\}$ вектор $|\, \psi \,\rangle$ записывается в виде столбца

$$|\, \psi \,\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_j \\ \vdots \end{pmatrix},$$

а вектор $\langle\, \psi \,|$ в виде строки

$$\langle\, \psi \,| = (c_1^*,\, c_2^*,\, \ldots,\, c_i^*,\, \ldots).$$

Тогда

$$\hat{\rho} = |\, \psi \,\rangle \langle\, \psi \,| = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_j \\ \vdots \end{pmatrix} \otimes (c_1^*,\, c_2^*,\, \ldots,\, c_i^*,\, \ldots) = \begin{pmatrix} c_1 c_1^* & c_1 c_2^* & \ldots & c_1 c_i^* & \ldots \\ c_2 c_1^* & c_2 c_2^* & \ldots & c_2 c_i^* & \ldots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_i c_1^* & c_i c_2^* & \ldots & c_i c_i^* & \ldots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.$$

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

Соответствующий бра-вектор

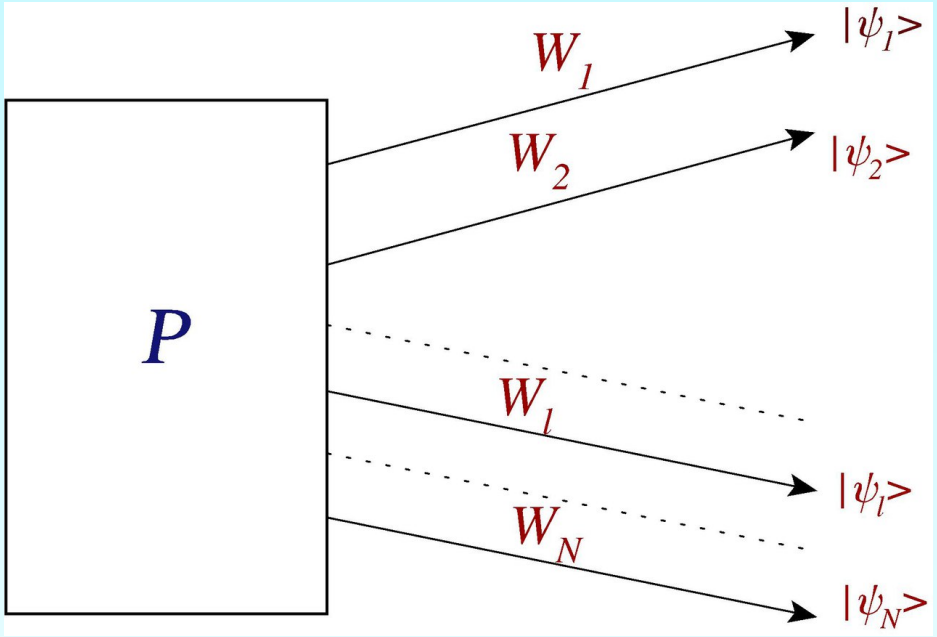
$$\langle\,\psi\,| \;=\; \begin{pmatrix} \cos\theta, & \sin\theta\, e^{-i\varphi} \end{pmatrix}.$$

Тогда по правилам прямого (тензорного) произведения для матрицы плотности получаем

$$\begin{aligned} \hat{\rho} = |\,\psi\,\rangle\langle\,\psi\,| \;&=\; \begin{pmatrix} \cos\theta \\ \sin\theta\, e^{i\varphi} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \cos\theta, & \sin\theta\, e^{-i\varphi} \end{pmatrix} = \\ &=\; \begin{pmatrix} \cos^2\theta & \cos\theta\,\sin\theta\, e^{-i\varphi} \\ \cos\theta\,\sin\theta\, e^{i\varphi} & \sin^2\theta \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Какой из двух способов построения матрицы плотности чистого состояния, из приведенных в настоящем параграфе, выбрать, дело вкуса. Однако формализм прямого произведения кажется более простым, а, следовательно, более предпочтительным.

Появление матрицы плотности смешанного состояния



Чтобы ввести матрицу плотности смешанного состояния, рассмотрим процесс приготовления квантовой системы неидеальным макроскопическим прибором "P" (см. рис.). Пусть с вероятностью W_1 такой прибор приготовляет квантовую систему в состоянии $|\psi_1\rangle$, с вероятностью W_2 – в состоянии $|\psi_2\rangle$ и так далее. И пусть, для простоты, этих состояний будет конечное число – N. Состояния $|\psi_\ell\rangle$, где $\ell \in \{1, \ldots N\}$, не обязательно должны быть ортогональны друг другу.

Пусть микросистема обладает некоторой наблюдаемой A, которой ставится в соответствие эрмитов оператор $\hat{A}$. Найдем среднее значение наблюдаемой A для микросистемы, приготовленной при помощи неидеального макроприбора. В параграфе "Постулаты квантовой механики (для чистых состояний)" было показано, что среднее значение наблюдаемой A в чистом состоянии $|\,\psi_\ell\,\rangle$ можно найти по формуле

$$\langle\, A\,\rangle_{\psi_\ell} = \mathbf{Tr}\left(\hat{P}_{\psi_\ell}\,\hat{A}\right),$$

где $\hat{P}_{\psi_\ell} = |\,\psi_\ell\,\rangle\,\langle\,\psi_\ell\,|$ – проектор на чистое состояние $|\,\psi_\ell\,\rangle$. Тогда для "неидеального" состояния ρ имеем:

$$\langle\, A\,\rangle_\rho = \sum_{\ell=1}^{N} W_\ell\,\langle\, A\,\rangle_{\psi_\ell} = \sum_{\ell}^{N} W_\ell \mathbf{Tr}\left(\hat{P}_{\psi_\ell}\hat{A}\right) = \mathbf{Tr}\left(\left(\sum_{\ell}^{N} W_\ell\,\hat{P}_{\psi_\ell}\right)\hat{A}\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}\hat{A}\right),$$

где оператор

$$\hat{\rho} = \sum_{\ell}^{N} W_\ell\,\hat{P}_{\psi_\ell}$$

называется матрицей плотности смешанного состояния.

Свойства матрицы плотности смешанного состояния

Таким образом матрицу плотности смешанного состояния можно рассматривать как совокупность проекторов $\hat{P}_{\psi_\ell} = |\,\psi_\ell\,\rangle\,\langle\,\psi_\ell\,|$ на чистые состояния $|\,\psi_\ell\,\rangle$, каждый из которых "срабатывает" 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 параграфа "Матрица плотности чистого состояния". Все вероятности W_ℓ являются действительными числами, удовлетворяют неравенству $1 \geq W_\ell \geq 0$ и подчиняются стандартному 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_{ii} 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:** $\langle A \rangle_{\rho} = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{A}\right)$.

Доказательства свойств матрицы плотности для смешанных состояний похожи на доказательства свойств матрицы плотности чистых состояний. При этом необходимо учитывать действительность, неотрицательность и нормировку на единицу вероятностей W_{ℓ}.

Начнем с пункта а). Поскольку все $\hat{\rho}_{\ell}$ – эрмитовы как матрицы плотности чистых состояний, а вероятности W_{ℓ} – действительные числа, то эрмитовость матрицы $\hat{\rho}$ становится очевидной.

Перейдем к доказательству пункта б). Имеем:

$$\rho_{ii} = \langle\, n_i \,|\, \hat{\rho} \,|\, n_i \,\rangle = \sum_{\ell} W_\ell \,\langle\, n_i \,|\, \hat{\rho}_\ell \,|\, n_i \,\rangle = \sum_{\ell} W_\ell \,(\rho_\ell)_{ii} \geq 0.$$

Свойство доказано.

Далее рассмотрим доказательство пункта в):

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

Для доказательства пункта г) следует воспользоваться неравенством $\sum\limits_\ell W_\ell \geq \sum\limits_\ell W_\ell^2$, которое очевидно для $0 \leq W_\ell \leq 1$. Свойство д) фактически было доказано в параграфе **"Появление матрицы плотности смешанного состояния"**.

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.

Примеры матриц плотности

Легко проверить, что матрицы

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \hat{\rho} = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 & 1 & i \\ 1 & 1 & 1 \\ -i & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

удовлетворяют всем свойствам матриц плотности чистых состояний, а матрицы

$$\hat{\rho} = \frac{1}{56}\begin{pmatrix} 49 & 8i \\ -8i & 7 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \hat{\rho} = \frac{1}{8}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 1-i & 0 \\ 0 & 1+i & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

могут описывать только смешанные состояния. Матрица же

$$\hat{\rho} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

НЕ является матрицей плотности, поскольку $\mathrm{Tr}\,\hat{\rho}^2 = \frac{3}{2} > 1$. Это лишний раз демонстрирует важность учета свойства г) при построении матриц плотности квантовых систем.

Степень совпадения или fidelity

Пусть некоторая микросистема может находиться в одном из двух состояний A или B, задаваемых матрицами плотности $\hat{\rho}_A$ и $\hat{\rho}_B$ соответственно. Тогда (условная) вероятность перехода из состояния A в состояние B выражается формулой:

$$w_{A\to B} \equiv w\left(\rho_B \,|\, \rho_A\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}_B^{\dagger}\hat{\rho}_A\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}_B\,\hat{\rho}_A\right).$$

При написании последнего равенства было использовано свойство эрмитовости матрицы плотности. Вероятность w_{AB} получила специальное название "fidelity" (обычно на русский язык этот термин переводят как "степень совпадения состояний" или реже "фиделити", используя прямую кальку с английского). В силу перестановочности операции взятия следа (см. параграф "След оператора и его свойства")

$$w_{A\to B} = w\left(\rho_B \,|\, \rho_A\right) = w\left(\rho_A \,|\, \rho_B\right) = w_{B\to A}.$$

Выведем формулу для степени совпадения.

Если состояния A и B являются чистыми, то есть описываются векторами состояния $|\,\psi_A\,\rangle$ и $|\,\psi_B\,\rangle$, то согласно Постулату N4 (см. параграф "Постулаты квантовой механики для чистых состояний")

$$w_{A\to B} = |\langle\,\psi_B\,|\;\psi_A\,\rangle|^2 = \mathbf{Tr}\Big(\hat{P}_B\,\hat{P}_A\Big),$$

где $\hat{P}_A = |\,\psi_A\,\rangle\,\langle\,\psi_A\,|$ и $\hat{P}_B = |\,\psi_B\,\rangle\,\langle\,\psi_B\,|$ – проекторы на чистые состояния $|\,\psi_A\,\rangle$ и $|\,\psi_B\,\rangle$ соответственно.

Пусть теперь состояние A остается чистым, а состояние B задается матрицей плотности $\hat{\rho}_B = \sum\limits_{\ell} W_\ell^{(B)}\,\hat{P}_\ell^{(B)}$, где $\hat{P}_\ell^{(B)}$ – проекторы на чистые состояния $\Big|\,\psi_\ell^{(B)}\,\Big\rangle$. Тогда

$$w_{A\to B} = \sum_{\ell} W_\ell^{(B)}\,\Big|\Big\langle\,\psi_\ell^{(B)}\,|\;\psi_A\,\Big\rangle\Big|^2 = \sum_{\ell} W_\ell^{(B)}\,\mathbf{Tr}\Big(\hat{P}_\ell^{(B)}\hat{P}_A\Big) = \mathbf{Tr}\Big(\hat{\rho}_B\hat{P}_A\Big).$$

Наконец, сопоставим состоянию A матрицу плотности $\hat{\rho}_A = \sum\limits_{m} W_m^{(A)}\,\hat{P}_m^{(A)}$, где $P_m^{(A)}$ – проекторы на чистые состояния $\Big|\,\psi_m^{(A)}\,\Big\rangle$. Тогда

$$w_{A\to B} = \sum_{m} W_m^{(A)}\,\mathbf{Tr}\Big(\hat{\rho}_B\hat{P}_m^{(A)}\Big) = \mathbf{Tr}\Big(\hat{\rho}_B\,\hat{\rho}_A\Big).$$

Формула для fidelity доказана.

Связь fidelity и вероятности измерения значения $a_{n'}$

Получим достаточно тривиальный, но важный для многих приложений результат.

Рассмотрим квантовую систему, которая до измерения находилась в состоянии $\hat{\rho}$. Произведем измерение значения наблюдаемой A, которая (для простоты!) обладает дискретным невырожденным спектром $\{a_n\}$. Вопрос: какова вероятность $w_{n'}$ того, что при измерении будет найдено значение $a_{n'}$ из спектра наблюдаемой A?

Для ответа на данный вопрос сопоставим наблюдаемой A эрмитов оператор $\hat{A}$: $\hat{A}\,|\,a_n\,\rangle = a_n\,|\,a_n\,\rangle$. Если было измерено значение $a_{n'}$, то это означает, что после измерения квантовая система перешла в чистое состояние $|\,a_{n'}\,\rangle$. Этому состоянию соответствует матрица плотности (проектор) $\hat{P}_{a_{n'}} = |\,a_{n'}\,\rangle\langle\,a_{n'}\,|$. Тогда условная вероятность перехода (fidelity) из состояния $\hat{\rho}$ в состояние $\hat{P}_{a_{n'}}$ совпадает с вероятностью измерения значения $a_{n'}$ спектра наблюдаемой A и задается выражением

$$w_{n'} = w\left(a_{n'}\,|\,\rho\right) \equiv w\left(P_{a_{n'}}\,|\,\rho\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{P}_{a_{n'}}\right) = \left\langle\,\hat{P}_{a_{n'}}\,\right\rangle_{\rho}.$$

Пример: состояние частицы со спином $S = 1$ в базисе $|\, S = 1,\, S_z \,\rangle$ описывается матрицей плотности

$$\hat{\rho} = \frac{1}{5}\begin{pmatrix} 1 & 0 & -i \\ 0 & 1 & 0 \\ i & 0 & 3 \end{pmatrix}.$$

Какова вероятность измерить проекцию спина этой частицы на ось x равной $+1$?

Решение: из университетского курса квантовой механики известно, что в базисе $|\, S = 1,\, S_z \,\rangle$ вектор $|\, S = 1,\, S_x = +1 \,\rangle = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$. Проектор на такое состояние

$$\hat{P}_{S=1,\, S_x=+1} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 2 & \sqrt{2} \\ 1 & \sqrt{2} & 1 \end{pmatrix}.$$

Тогда

$$w\,(S = 1,\, S_x = +1 \,|\, \rho) = \mathbf{Tr}\Big(\hat{\rho}\; \hat{P}_{S=1,\, S_x=+1}\Big) = \frac{3}{10}.$$

Почему смешанное состояние не сводится к чистому?

Чтобы ответить на этот вопрос, в качестве примера рассмотрим квантовое состояние, которое описывается матрицей плотности

$$\hat{\rho} = w\,\hat{P}_1 + (1-w)\,\hat{P}_2,$$

где $\hat{P}_1$ и $\hat{P}_2$ – проекторы на *ортогональные* чистые состояния $|\,\psi_1\,\rangle$ и $|\,\psi_2\,\rangle$ в двумерном гильбертовом пространстве, а параметр w удовлетворяет условию $0 < w < 1$ (в обоих случаях неравенство строгое!).

Если предположить, что $\hat{\rho}$ *может быть* матрицей плотности чистого состояния, то для нее параметр чистоты $\mu = 1$. Тогда

$$\begin{aligned} 1 &= \mu = \mathbf{Tr}\,\hat{\rho}^2 = \mathbf{Tr}\left(w\,\hat{P}_1 + (1-w)\,\hat{P}_2\right)^2 = \\ &= \mathbf{Tr}\left(w^2\,\hat{P}_1^2 + (1-w)^2\,\hat{P}_2^2 + w\,(1-w)\left(\hat{P}_1\,\hat{P}_2 + \hat{P}_2\,\hat{P}_1\right)\right) = \\ &= \mathbf{Tr}\left(w^2\,\hat{P}_1 + (1-w)^2\,\hat{P}_2\right) = w^2 + (1-w)^2 = 1 - 2\,w\,(1-w). \end{aligned}$$

Таким образом в нашем примере условие чистоты выполняется только, если $w = 0$ или $w = 1$, то есть НЕ существует такого чистого состояния $|\,\psi\,\rangle$, что $\hat{\rho} = |\,\psi\,\rangle\,\langle\,\psi\,|$.

Физический смысл элементов матрицы плотности

Пусть система, которая описывается матрицей плотности $\hat{\rho}$, обладает наблюдаемой A. Этой наблюдаемой соответствует эрмитов оператор $\hat{A}$ с собственными векторами $|\, a_n \,\rangle$ и собственными значениями a_n (для простоты рассматриваем только дискретный невырожденный спектр). Тогда элементы матрицы плотности $\hat{\rho}$ в a–представлении:

$$\rho_{n'n''} = \langle\, a_{n'} \,|\, \hat{\rho} \,|\, a_{n''} \,\rangle.$$

В этом случае диагональные матричные элементы $\rho_{n'n'}$ задают вероятность $w_{n'}$ получить значение $a_{n'}$ при измерении наблюдаемой A. Недиагональные матричные элементы $\rho_{n'n''}$ (где $n' \neq n''$) определяют дисперсию и корреляции в системе. Действительно

$$\rho_{n'n'} = \langle\, a_{n'} \,|\, \hat{\rho} \,|\, a_{n'} \,\rangle = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{P}_{a_{n'}}\right) = w_{n'}$$

и

$$\Delta A = \sqrt{\langle\, A^2 \,\rangle_\rho - \left(\langle\, A \,\rangle_\rho\right)^2} = \sqrt{\mathbf{Tr}\left(\hat{A}\,\hat{\rho}\,\hat{A}\right) - \left(\mathbf{Tr}\left(\hat{A}\,\hat{\rho}\right)\right)^2} =$$

$$= \sqrt{\sum_{n\,n'\,n''} A_{nn'}\,\rho_{n'n''}\,A_{n''n} - \left(\sum_{n\,n'} A_{nn'}\,\rho_{n'n}\right)^2}.$$

Матрица плотности смешанного состояния в координатном представлении

В практических вычислениях часто удобно использовать координатное или любое другое представление в бесконечномерном гильбертовом пространстве. В этом случае основным объектом становится не матрица плотности $\hat{\rho}$, а ее ядро в координатном представлении $\rho(x, \tilde{x}) = \langle x | \hat{\rho} | \tilde{x} \rangle$ (для простоты рассматривается только одномерный случай).

В терминах ядер свойства матрицы плотности смешанного состояния можно записать следующим образом:

а) **эрмитовость:** $\rho^*(x, \tilde{x}) = \rho(\tilde{x}, x)$;

б) **диагональные элементы матрицы плотности** $\rho(x, x) \geq 0$;

в) **след матрицы плотности** $\int dx\, \rho(x, x) = 1$;

г) **след квадрата матрицы плотности** $\int dx\, d\tilde{x}\ |\rho(x, \tilde{x})|^2 \leq 1$, **и равенство достигается только для чистых состояний;**

д) **среднее значение любой наблюдаемой** A **вычисляется по формуле:** $\langle A \rangle_\rho = \int dx\, d\tilde{x}\, A(x, \tilde{x})\, \rho(\tilde{x}, x)$, **где величина** $A(x, \tilde{x}) = \left\langle x \middle| \hat{A} \middle| \tilde{x} \right\rangle$ **– ядро оператора** $\hat{A}$ **в координатном представлении.**

Для доказательства свойств а) – д) запишем матрицу плотности $\hat{\rho}$ в терминах ядра $\rho(x,\,\tilde{x})$:

$$\hat{\rho} = \hat{1}_x\,\hat{\rho}\,\hat{1}_{\tilde{x}} = \int dx\,d\tilde{x}\;|\,x\,\rangle\,\langle\,x\,|\,\hat{\rho}\,|\;\tilde{x}\,\rangle\,\langle\,\tilde{x}\,| = \int dx\,d\tilde{x}\,\rho(x,\,\tilde{x})\;|\,x\,\rangle\,\langle\,\tilde{x}\,|.$$

а) Эрмитово сопряжение дает

$$\hat{\rho}^{\dagger} = \int dx\,d\tilde{x}\,\rho^{*}(x,\,\tilde{x})\;|\,\tilde{x}\,\rangle\,\langle\,x\,| = \int d\tilde{x}\,dx\,\rho^{*}(\tilde{x},\,x)\;|\,x\,\rangle\,\langle\,\tilde{x}\,|.$$

При переходе к последнему равенству сделана замена $x \leftrightarrow \tilde{x}$. Если $\hat{\rho} = \hat{\rho}^{\dagger}$, то $\rho(x,\,\tilde{x}) = \rho^{*}(\tilde{x},\,x)$ или $\rho^{*}(x,\,\tilde{x}) = \rho(\tilde{x},\,x)$. Первое свойство доказано.

б) Вычисляем: $0 \le \langle\,X\,|\,\hat{\rho}\,|\;X\,\rangle = \int dx\,d\tilde{x}\,\rho(x,\,\tilde{x})\;\langle\,X\,|\;x\,\rangle\,\langle\,\tilde{x}\,|\;X\,\rangle =$
$= \int dx\,d\tilde{x}\,\rho(x,\,\tilde{x})\,\delta(X-x)\,\delta(\tilde{x}-X) = \rho(X,\,X)$. Второе свойство доказано.

в) Данное свойство предлагается доказать самостоятельно. Напомним только, что в бесконечномерных пространствах $\mathbf{Tr}\,\hat{A} = \int dX\,\left\langle\,X\,\middle|\,\hat{A}\,\middle|\;X\,\right\rangle$.

г) $1 \ge \mathbf{Tr}\,\hat{\rho}^2 = \int dX\,dx\,d\tilde{x}\,dx'\,d\tilde{x}'\;\langle\,X\,|\;x\,\rangle\;\langle\,\tilde{x}\,|\;x'\,\rangle\,\langle\,\tilde{x}'\,|\;X\,\rangle\;\rho(x,\,\tilde{x})\,\rho(x',\,\tilde{x}') =$
$= \int dX\,d\tilde{x}\,\rho(X,\,\tilde{x})\,\rho(\tilde{x},\,X) = \int dX\,d\tilde{x}\,\rho(X,\,\tilde{x})\,\rho^{*}(X,\,\tilde{x}) = \int dX\,d\tilde{x}\;|\rho(X,\,\tilde{x})|^2$.
Таким образом свойство г) доказано. Проверку свойства д) проведите самостоятельно. Она во многом похожа на доказательство свойства г).

Пример: введем безразмерную координату Q, которая связана с "размерной" координатой x соотношением $Q = x/\sqrt{2\,D}$. В Q–представлении рассмотрим функцию двух переменных

$$\rho\left(Q,\,\tilde{Q}\right) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\left(1 + 2\,Q\,\tilde{Q}\right)\,e^{-\left(Q^2+\tilde{Q}^2\right)/2}.$$

Проверить, что функция $\rho\left(Q,\,\tilde{Q}\right)$ является ядром матрицы плотности смешанного состояния и найти $\left\langle\, Q^2\,\right\rangle_\rho$.

Решение: чтобы показать, что функция $\rho\left(Q,\,\tilde{Q}\right)$ является ядром оператора плотности в Q–представлении, необходимо проверить, что эта функция удовлетворяет свойствам **а)** – **г)** из параграфа **"Матрица плотности смешанного состояния в координатном представлении"**.

а) Очевидно, что $\rho\left(Q,\,\tilde{Q}\right) = \rho^*\left(\tilde{Q},\,Q\right)$, поскольку $\rho\left(Q,\,\tilde{Q}\right)$ – действительная симметричная по своим аргументам функция.

б) Функция $\rho\left(Q,\,Q\right) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\left(1 + 2\,Q^2\right)\,e^{-\,Q^2} \geq 0$ при любых действительных значениях переменной Q.

в) Для получения следа оператора, задаваемого ядром $\rho\left(Q,\,\tilde{Q}\right)$, необходимо вычислить гауссовы интегралы. Тогда получим, что

$$\begin{aligned}\mathbf{Tr}\,\hat{\rho} &= \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dQ\,\rho\,(Q,\,Q) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dQ\,\left(1+2\,Q^2\right)\,e^{-\,Q^2} = \\ &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\left(\sqrt{\pi}+2\,\frac{\sqrt{\pi}}{2}\right) = 1.\end{aligned}$$

г) Теперь найдем след оператора $\hat{\rho}^{\,2}$. Простые, но технически громоздкие вычисления дают:

$$\begin{aligned}\mathbf{Tr}\,\hat{\rho}^{\,2} &= \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dQ d\tilde{Q}\left|\rho\left(Q,\,\tilde{Q}\right)\right|^2 = \frac{1}{4\,\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dQ d\tilde{Q}\,\left(1+2\,Q\,\tilde{Q}\right)^2 e^{-\left(Q^2+\tilde{Q}^2\right)} = \\ &= \frac{1}{4\,\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dQ\,e^{-\,Q^2}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{Q}\,\left(1+4Q\tilde{Q}+4Q^2\tilde{Q}^2\right)\,e^{-\,\tilde{Q}^2} = \\ &= \frac{1}{4\sqrt{\pi}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dQ\,\left(1+2\,Q^2\right)\,e^{-\,Q^2} = \frac{1}{2} < 1.\end{aligned}$$

Таким образом мы проверили, что функция $\rho\left(Q,\,\tilde{Q}\right)$ является ядром матрицы плотности смешанного состояния в Q–представлении.

Из курса квантовой механики известно, что ядро оператора квадрата безразмерной координаты в Q–представлении имеет вид $Q^2\,\delta\left(Q\,-\,\tilde{Q}\right)$. Следовательно

$$\begin{aligned}
\left\langle\, Q^2 \,\right\rangle_\rho &= \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dQ d\tilde{Q}\, Q^2 \delta\left(Q\,-\,\tilde{Q}\right)\, \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\left(1\,+\,2\,Q\,\tilde{Q}\right)\, e^{-\left(Q^2\,+\,\tilde{Q}^2\right)/2} = \\
&= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dQ\, \left(Q^2\,+\,2\,Q^4\right)\, e^{-\,Q^2} = \\
&= \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\left(\frac{\sqrt{\pi}}{2}\,+\,2\,\frac{3\sqrt{\pi}}{4}\right) = 1.
\end{aligned}$$

Самостоятельно найдите $\left\langle\, Q \,\right\rangle_\rho$, $\left\langle\, P \,\right\rangle_\rho$ и $\left\langle\, P^2 \,\right\rangle_\rho$, где $\hat{P}$ – оператор безразмерного импульса.

"Отцы" матрицы плотности

Лев Давидович Ландау
(09.01.1908 – 01.04.1968)

Джон фон Нейман
(28.12.1903 – 08.02.1957)

О терминологии "Московской школы"

В заметной части старых советских учебников и монографий по квантовой механике вместо термина "чистое состояние" используется термин "когерентный ансамбль". А вместо термина "смешанное состояние" – термин "некогерентный ансамбль".

Это связано с большим влиянием, которым в Советском Союзе обладала "Московская школа" квантовой механики. Ярчайшими представителями данной школы являлись академик Л.И. Мандельштам, академик Д.И. Блохинцев, академик М.А. Марков и профессор К.В. Никольский. Они разрабатывали теорию косвенных измерений и так называемую Московскую или ансамблевую интерпретацию квантовой механики, при помощи которой пытались примирить Копенгагенскую интерпретацию Н. Бора и В. Гейзенберга со Статистической интерпретацией А. Эйнштейна. Представители "Московской школы" много времени отдали работам по волновой оптике. Поэтому естественно, что в их терминологии чувствуется сильное влияние оптических понятий. Впоследствии терминология "Московской школы" была частично использована в квантовой оптике.

Активным противником Московской интерпретации квантовой механики был академик В.А. Фок, отстаивавший "ортодоксальную" Копенгагенскую интерпретацию как единственно верную.

Неоднозначность разложения матрицы плотности смешанного состояния на чистые

По виду матрицы плотности смешанного состояния $\hat{\rho}$ невозможно 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, или разложению по различным наборам чистых (чаще всего – базисных) состояний.

Унитарная свобода в представлении матрицы плотности

Вопрос: есть ли какая-либо связь между наборами различных чистых состояний, из которых строится одна и та же матрица плотности?

Ответ: из двух нормированных наборов чистых состояний $\{|\,\psi_\ell\,\rangle\}$ и $\{|\,\varphi_m\,\rangle\}$ можно построить одну и ту же матрицу плотности $\hat{\rho}$ тогда и только тогда, когда эти наборы связаны соотношением

$$\sqrt{W_\ell}\,|\,\psi_\ell\,\rangle = \sum_m \sqrt{w_m}\,U_{\ell\,m}\,|\,\varphi_m\,\rangle,$$

где $U_{\ell\,m}$ – унитарная матрица (т.е. $\sum\limits_\ell U^\dagger_{\tilde{m}\,\ell} U_{\ell\,m} = \delta_{\tilde{m}\,m}$), W_ℓ и w_m – вероятности, с которыми состояния $|\,\psi_\ell\,\rangle$ и $|\,\varphi_m\,\rangle$ входят в матрицу плотности $\hat{\rho}$. Последнюю, следовательно, можно записать в виде

$$\hat{\rho} = \sum_\ell W_\ell\,\hat{P}_{\psi_\ell} = \sum_m w_m\,\hat{P}_{\varphi_m}.$$

Если количество векторов состояния в наборах разное, то набор с меньшим числом состояний следует дополнить нулевыми векторами и нулевыми вероятностями до числа состояний в бОльшем наборе.

Докажем прямое утверждение теоремы.

$$
\begin{aligned}
\hat{\rho} &= \sum_{\ell} W_\ell \, \hat{P}_{\psi_\ell} = \sum_{\ell} \sqrt{W_\ell} \, |\, \psi_\ell \,\rangle \langle\, \psi_\ell \,| \, \sqrt{W_\ell} = \\
&= \sum_{\ell\, m\, \tilde{m}} U_{\ell\, m} \sqrt{w_m} \, |\, \varphi_m \,\rangle \langle\, \varphi_{\tilde{m}} \,| \, \sqrt{w_{\tilde{m}}} \, U^*_{\ell\, \tilde{m}} = \\
&= \sum_{m\, \tilde{m}} \left(\sum_{\ell} U^\dagger_{\tilde{m}\, \ell} U_{\ell\, m} \right) \sqrt{w_m} \sqrt{w_{\tilde{m}}} \, |\, \varphi_m \,\rangle \langle\, \varphi_{\tilde{m}} \,| = \\
&= \sum_{m\, \tilde{m}} \delta_{m\, \tilde{m}} \sqrt{w_m} \sqrt{w_{\tilde{m}}} \, |\, \varphi_m \,\rangle \langle\, \varphi_{\tilde{m}} \,| = \sum_{m} w_m \, |\, \varphi_m \,\rangle \langle\, \varphi_m \,| = \\
&= \sum_{m} w_m \, \hat{P}_{\varphi_{\boldsymbol{m}}}.
\end{aligned}
$$

Прямое утверждение теоремы доказано.

Приступим к доказательству обратного утверждения. Пусть

$$
\hat{\rho} = \sum_{\ell} W_\ell \, |\, \psi_\ell \,\rangle \langle\, \psi_\ell \,| = \sum_{m} w_m \, |\, \varphi_m \,\rangle \langle\, \varphi_m \,|.
$$

Пусть $|\, \rho_k \,\rangle$ **и** ρ_k **— собственные векторы и собственные значения матрицы плотности** $\hat{\rho}$**. Тогда**

$$\hat{\rho} = \sum_k \rho_k \,|\,\rho_k\,\rangle\langle\,\rho_k\,| = \sum_k \rho_k \,\hat{P}_{\rho_k},$$

где $\rho_k > 0$. **Пусть теперь** $|\,\Psi\,\rangle$ **– произвольный нормированный вектор, такой, что для всех** k **выполняется условие ортогональности** $\left\langle \Psi \middle| \hat{P}_{\rho_k} \middle| \Psi \right\rangle = 0$. **Тогда**

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_k \rho_k \left\langle \Psi \middle| \hat{P}_{\rho_k} \middle| \Psi \right\rangle = \langle\,\Psi\,|\,\hat{\rho}\,|\,\Psi\,\rangle = \\ &= \sum_\ell W_\ell \left\langle \Psi \middle| \hat{P}_{\psi_\ell} \middle| \Psi \right\rangle = \sum_\ell W_\ell \,|\langle\,\Psi\,|\;\psi_\ell\,\rangle|^2. \end{aligned}$$

Поскольку все $W_\ell \geq 0$ **и** $|\langle\,\Psi\,|\;\psi_\ell\,\rangle|^2 \geq 0$, **то сумма неотрицательных чисел равна нулю тогда и только тогда, когда** $\sqrt{W_\ell}\,\langle\,\Psi\,|\;\psi_\ell\,\rangle = 0$. **Отсюда следует, что все векторы** $\sqrt{W_\ell}\,|\,\psi_\ell\,\rangle$ **лежат в том же гильбертовом пространстве, что и векторы** $|\,\rho_k\,\rangle$ **и могут быть разложены по базису, состоящему из векторов** $|\,\rho_k\,\rangle$ **(заметим, что векторы** $|\,\rho_k\,\rangle$ **образуют базис, поскольку являются собственными векторами эрмитового оператора** $\hat{\rho}$**), то есть**

$$\sqrt{W_\ell}\,|\,\psi_\ell\,\rangle = \sum_k C_{\ell\,k}\,\sqrt{\rho_k}\;|\,\rho_k\,\rangle.$$

Тогда

$$\sum_k \rho_k \,|\, \rho_k \,\rangle \langle\, \rho_k \,| = \hat{\rho} = \sum_\ell W_\ell \,|\, \psi_\ell \,\rangle \langle\, \psi_\ell \,| = \sum_{k\,\tilde{k}} \sqrt{\rho_k \rho_{k'}} \left(\sum_\ell C_{\ell k}\, C^*_{\ell \tilde{k}} \right) |\, \rho_k \,\rangle \langle\, \rho_{\tilde{k}} \,|.$$

Сравнивая правую и левую части этого равенства, получаем условие на матрицу $C_{\ell\, k}$:

$$\sum_\ell C^\dagger_{\tilde{k}\,\ell}\, C_{\ell\, k} \;=\; \delta_{\tilde{k}\, k},$$

которое является условием унитарности.

Аналогичные рассуждения приводят к разложению

$$\sqrt{w_m}\,|\, \varphi_m \,\rangle \;=\; \sum_k D_{m\,k} \sqrt{\rho_k}\;|\, \rho_k \,\rangle$$

и утверждению, что матрица $D_{m\,k}$ – тоже унитарная. Тогда матрица $U_{\ell\, m}$ преобразования от набора $\{|\, \varphi_m \,\rangle\}$ к набору $\{|\, \psi_\ell \,\rangle\}$

$$U_{\ell\, m} \;=\; \sum_k C_{\ell\, k}\, D^\dagger_{k\, m}$$

есть произведение двух унитарных матриц, то есть сама является унитарной матрицей. Обратное утверждение теоремы доказано.

Альтернативный набор условий для матрицы плотности чистого состояния

В практических вычислениях часто встает вопрос, является ли матрица, которая может быть бесконечномерной, заданной в виде прямого произведения нескольких нетривиальных матриц с параметрами и т.д., матрицей плотности или нет? Как правило, в подобных задачах критерии а), в) и г) проверить достаточно просто. Однако проверка критерия б) – неотрицательности диагональных матричных элементов – представляет серьезную проблему. В качестве примера такой матрицы приведем матрицу $\frac{1}{4}\left(\hat{1}^{(1)} \otimes \hat{1}^{(2)} - \sigma_i^{(1)} \otimes \sigma_i^{(2)}\right)$ из параграфа "Матрицы плотности состояний Белла и матрицы Паули", где $i = \{1, 2, 3\}$.

Для чистых состояний решению указанной выше проблемы может помочь следующая теорема: чтобы некоторая матрица $\hat{\rho}$ была матрицей плотности ЧИСТОГО состояния, необходимо и достаточно выполнение следующих двух условий:

А) **эрмитовость: $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$;**

Б) **след матрицы плотности $\mathbf{Tr}\,\hat{\rho}^2 = \mathbf{Tr}\,\hat{\rho}^3 = 1$.**

Докажем данную теорему. Пусть $|\,\rho_\ell\,\rangle$ и ρ_ℓ — собственные векторы и собственные значения матрицы $\hat{\rho}$. В силу эрмитовости (условие А)) векторы $|\,\rho_\ell\,\rangle$ образуют базис, в котором мы будем вычислять след. Тогда в базисе собственных векторов имеем:

$$\mathbf{Tr}\,\hat{\rho}^2 = \sum_\ell \rho_\ell^2 \;=\; 1 \quad \text{и} \quad \mathbf{Tr}\,\hat{\rho}^3 = \sum_\ell \rho_\ell^3 \;=\; 1.$$

Согласно условию Б), можем написать

$$0 = \mathbf{Tr}\,\hat{\rho}^2 - \mathbf{Tr}\,\hat{\rho}^3 = \sum_\ell \rho_\ell^2\,(1-\rho_\ell)$$

систему уравнений на ρ_ℓ.

Поскольку $\hat{\rho}$ — эрмитовая матрица, то ρ_ℓ — действительные числа и $1-\rho_\ell \geq 0$ согласно условию Б). Тогда у системы на ρ_ℓ могут быть всего два решения.

Первое: ВСЕ $\rho_\ell = 0$. Но это решение противоречит условию Б) и, следовательно, должно быть исключено.

Второе: при каком-то $\ell = \ell'$ одно собственное значение $\rho_{\ell'} = 1$, в то время как все остальные $\rho_{\ell \neq \ell'} = 0$. Но это и означает, что матрица $\hat{\rho}$ может быть представлена в виде

$$\hat{\rho} = |\, \rho_{\ell'} \,\rangle \langle\, \rho_{\ell'} \,|,$$

то есть является проекционным оператором $=$ матрицей плотности чистого состояния. Все доказано.

Впервые теорема была опубликована в работе N.S. Jones, N. Linden, "Parts of quantum states", Phys. Rev. A71, 012324 (2005).

Вопрос: почему понадобилось заменить условие чистоты $\mathbf{Tr}\,\hat{\rho} = \mathbf{Tr}\,\hat{\rho}^2 = 1$ на более сложное условие $\mathbf{Tr}\,\hat{\rho}^2 = \mathbf{Tr}\,\hat{\rho}^3 = 1$?
Ответ: без явного требования неотрицательности диагональных элементов ρ_{nn} условию чистоты $\mathbf{Tr}\,\hat{\rho} = \mathbf{Tr}\,\hat{\rho}^2 = 1$ удовлетворяет, например, матрица

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

которая не может быть матрицей плотности. Заметим, что критерию $\mathbf{Tr}\,\hat{\rho}^2 = \mathbf{Tr}\,\hat{\rho}^3 = 1$ эта матрица уже не удовлетворяет.

Покажем, как работает альтернативный набор условий для матрицы плотности на примере матрицы $\hat{\rho} = \frac{1}{4}\left(\hat{1}^{(1)} \otimes \hat{1}^{(2)} - \sigma_i^{(1)} \otimes \sigma_i^{(2)}\right)$. Легко видеть, что эта матрица эрмитова, поскольку эрмитовы матрицы Паули. Условие А) выполнено. Далее:

$$\mathbf{Tr}\,\hat{\rho} = \frac{1}{4}\left(\mathbf{Tr}\left(\hat{1}^{(1)}\right)\,\mathbf{Tr}\left(\hat{1}^{(2)}\right) - \mathbf{Tr}\left(\sigma_i^{(1)}\right)\,\mathbf{Tr}\left(\sigma_i^{(2)}\right)\right) = \frac{1}{4}\,(2*2-0*0) = 1.$$

Возводим $\hat{\rho}$ в квадрат и получаем

$$\hat{\rho}^2 = \frac{1}{16}\left(\hat{1}^{(1)} \otimes \hat{1}^{(2)} + \sigma_i^{(1)}\sigma_j^{(1)} \otimes \sigma_i^{(2)}\sigma_j^{(2)} - 2\,\sigma_i^{(1)} \otimes \sigma_i^{(2)}\right).$$

Вычисляем след $\mathbf{Tr}\,\hat{\rho}^2 = \frac{1}{16}\,(2*2 + 2\,\delta_{ij}\,2\,\delta_{ij} - 2*0*0) = \frac{1}{16}\,(4+12) = 1$.

Наконец, возводим в куб

$$\begin{aligned}\hat{\rho}^3 &= \frac{1}{64}\left(\hat{1}^{(1)} \otimes \hat{1}^{(2)} + 3\,\sigma_i^{(1)}\sigma_j^{(1)} \otimes \sigma_i^{(2)}\sigma_j^{(2)} - 3\,\sigma_i^{(1)} \otimes \sigma_i^{(2)} - \right.\\ &- \left.\sigma_i^{(1)}\sigma_j^{(1)}\sigma_k^{(1)} \otimes \sigma_i^{(2)}\sigma_j^{(2)}\sigma_k^{(2)}\right)\end{aligned}$$

и вычисляем след

$$\mathbf{Tr}\,\hat{\rho}^3 = \frac{2*2 + 3*2\,\delta_{ij}\,2\,\delta_{ij} - 3*0*0 - 2i\,\varepsilon_{ijk}\,2i\,\varepsilon_{ijk}}{64} = \frac{4+36+4*3!}{64} = 1.$$

Таким образом для матрицы $\hat{\rho}$ выполнено и условие Б), то есть эта матрица является матрицей плотности чистого состояния.

Нерелятивистская матрица плотности спина $s = 1/2$

Найдем матрицу плотности для нерелятивистского спина $s = 1/2$. Искомая матрица должна быть матрицей размерности 2×2. В стандартных курсах квантовой механики доказывается, что любая подобная матрица может быть разложена по базису, состоящему из единичной матрицы $\hat{1}$ и матриц Паули $\vec{\sigma}$, то есть

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

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

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

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

При помощи свойства д) для i–ой компоненты спина получаем:

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

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

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

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}\left(\hat{1} + (\vec{p}\,\vec{\sigma})\right) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 + p_3 & p_1 - i\,p_2 \\ p_1 + i\,p_2 & 1 - p_3 \end{pmatrix},$$

где **вектор поляризации** $\vec{p} = (p_1,\, p_2,\, p_3) = 2\left\langle \vec{S} \right\rangle_\rho = \langle \vec{\sigma} \rangle_\rho$. 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 $s = 1/2$.

Явный вид матриц плотности спина $s = 1/2$ для его проекций $\pm 1/2$ на произвольную ось

Во многих задачах необходимо знать явный вид матриц плотности частицы со спином $s = 1/2$, обладающей проекциями спина $\pm 1/2$ на направление, задаваемое в сферической системе координат единичным вектором $\vec{n} = (\sin\theta\cos\varphi,\ \sin\theta\sin\varphi,\ \cos\theta)$.

Такие матрицы легко написать, используя правило получения матриц плотности чистых состояний (проекторов на чистые состояния) из параграфа "Как строить матрицу плотности чистого состояния $|\,\psi\,\rangle$?".

Из обычных курсов квантовой механики известно, что спинор, отвечающий проекции спина $s_{\vec{n}} = +1/2$, имеет вид:

$$|\,s = 1/2,\ s_{\vec{n}} = +1/2\,\rangle \equiv |\,+_{\vec{n}}\,\rangle = \begin{pmatrix} \cos\dfrac{\theta}{2} \\ \sin\dfrac{\theta}{2}\,e^{i\varphi} \end{pmatrix}.$$

Тогда соответствующий ему проектор (матрица плотности) мо-

жет быть записан как

$$\hat{P}^{(+)}_{\vec{n}} = \hat{\rho}_+(\vec{n}) = \begin{pmatrix} \cos^2\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2}\,\sin\frac{\theta}{2}\,e^{-i\varphi} \\ \cos\frac{\theta}{2}\,\sin\frac{\theta}{2}\,e^{i\varphi} & \sin^2\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} =$$

$$= \frac{1}{2}\Big(\hat{1} + (\vec{n}\,\vec{\sigma}\,)\Big).$$

Аналогично, спинор, отвечающий проекции спина $s_{\vec{n}} = -1/2$, имеет вид:

$$|\,s = 1/2,\, s_{\vec{n}} = -1/2\,\rangle \equiv |-_{\vec{n}}\,\rangle = \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2} \\ \cos\frac{\theta}{2}\,e^{i\varphi} \end{pmatrix}.$$

Поэтому проектор (матрицу плотности) такого состояния можно написать следующим образом

$$\hat{P}^{(-)}_{\vec{n}} = \hat{\rho}_-(\vec{n}) = \begin{pmatrix} \sin^2\frac{\theta}{2} & -\cos\frac{\theta}{2}\,\sin\frac{\theta}{2}\,e^{-i\varphi} \\ -\cos\frac{\theta}{2}\,\sin\frac{\theta}{2}\,e^{i\varphi} & \cos^2\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} =$$

$$= \frac{1}{2}\Big(\hat{1} - (\vec{n}\,\vec{\sigma}\,)\Big).$$

Заметим, что для рассматриваемого случая вектор поляризации $\vec{p} = \vec{n}$ и, очевидно, $|\vec{p}\,| = 1$. Состояние чистое.

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 $[0,\,1]$ по правилам:

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 $\mathcal{H}_d$ размерности $d > 2$ для любого подобного отображения существует оператор $\hat{\rho}$, который обладает свойствами а) – д) матрицы плотности, и $W(\hat{P}) = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{P}\right)$.

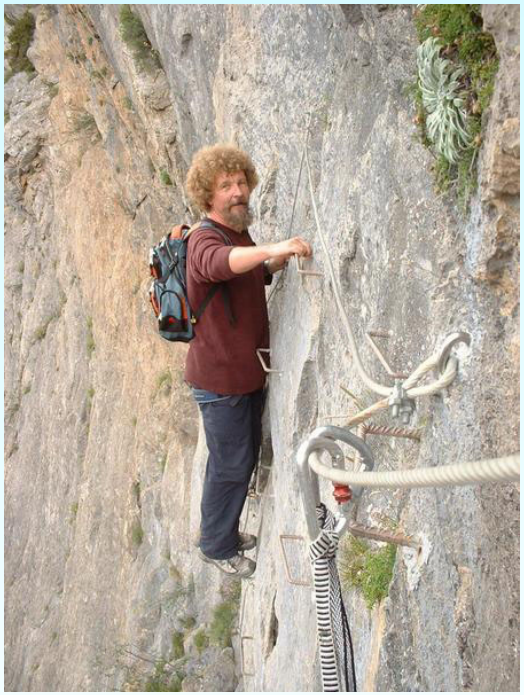
Док–во теоремы: A. M. Gleason, “Measures on the closed subspaces of a Hilbert space”. Indiana University Mathematics Journal 6, pp.885–893 (1957).

"Облегченное" доказательство для физиков изложено в книге: R. I. G. Hughes, "The Structure and Interpretation of Quantum Mechanics", IIMvard Univer ily Press, USA, pp.321–346 (1989) и занимает 25 страниц убористого книжного текста.

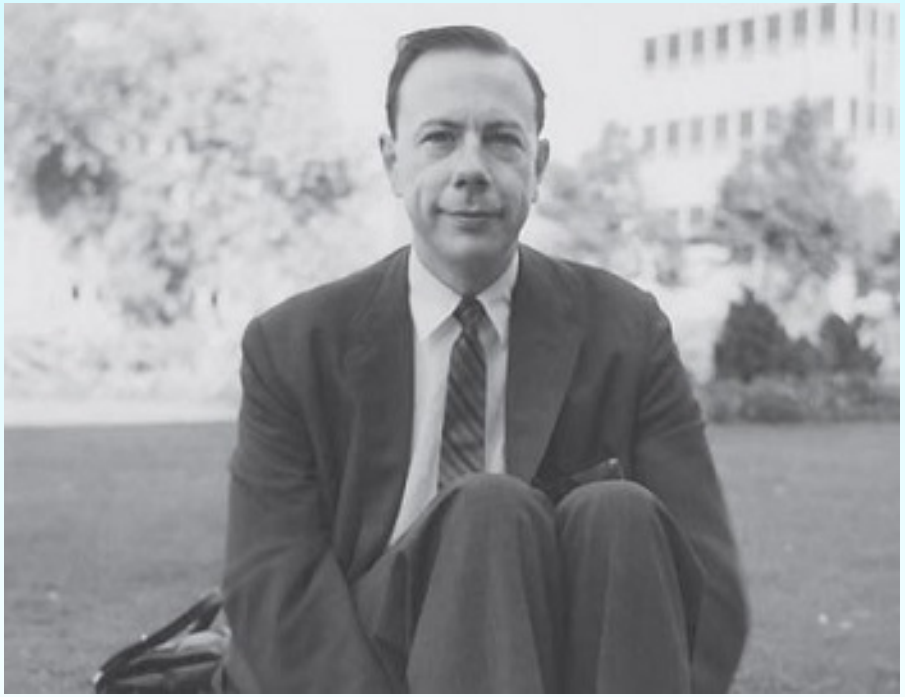
Иными словами, теорема Глизона при помощи Постулата N4 (проекционного постулата М.Борна), Постулата N5 (постулата о среднем значении) и "интуитивно понятного" определения свойств вероятности для макроскопически различимых состояний утверждает, что в подходе Дирака *наиболее общее описание произвольной квантовой системы может быть достигнуто в рамках формализма матрицы плотности*.

Однако принятие Глизоном без достаточного обоснования "интуитивно ясных" свойств вероятности зачастую 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 условие “3)” может не выполняется. Для иллюстрации этого рассмотрим проекции $+1/2$ спина фермиона на направления, задаваемые единичными векторами $\vec{a}$ и $\vec{b}$. Таким состояниям соответствуют проекторы $\hat{P}_a = \frac{1}{2}\left(\hat{1} + (\vec{a}\,\vec{\sigma})\right)$ и $\hat{P}_b = \frac{1}{2}\left(\hat{1} + (\vec{b}\,\vec{\sigma})\right)$. С одной стороны, $\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_a\,\hat{P}_b\right) = \frac{1}{2}\left(1 + \left(\vec{a}\,\vec{b}\right)\right) = 0$ только если $\vec{a} = -\vec{b}$. С другой, $W(\hat{P}_a + \hat{P}_b) = W(\hat{P}_a) + W(\hat{P}_b)$ для любых единичных векторов $\vec{a}$ и $\vec{b}$.



W.H.Zurek
подбирается с критикой



Эндрю Глизон
(04.11.1921 – 17.10.2008)

Подробнее разберем утверждение, сделанное на предыдущей странице.

Если состояние фермиона со спином $s = 1/2$ описывается при помощи матрицы плотности $\hat{\rho} = \frac{1}{2}\left(\hat{1} + (\vec{p}\,\vec{\sigma})\right)$, где $\vec{p}$ – поляризация фермиона (см. параграф "Нерелятивистская матрица плотности спина $s = 1/2$"), то

$$\begin{aligned} W(\hat{P}_a) &= \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{P}_a\right) = \frac{1}{4}\,\mathbf{Tr}\Big(\left(\hat{1} + (\vec{p}\,\vec{\sigma})\right)\left(\hat{1} + (\vec{a}\,\vec{\sigma})\right)\Big) = \\ &= \frac{1}{4}\left(\mathbf{Tr}\hat{1} + p_i a_j\,\mathbf{Tr}\left(\sigma_i\sigma_j\right)\right) = \frac{1}{4}\left(2 + 2\,p_i a_i\right) = \frac{1}{2}\left(1 + (\vec{p}\,\vec{a}\,)\right). \end{aligned}$$

Аналогично

$$W(\hat{P}_b) = \frac{1}{2}\left(1 + (\vec{p}\,\vec{b}\,)\right) \quad \text{и} \quad W(\hat{P}_a + \hat{P}_b) = \frac{1}{2}\left(1 + (\vec{p}\,(\vec{a} + \vec{b}\,)\,)\right).$$

То есть в пространстве размерности $d = 2$ для фермионов со спином $s = 1/2$ всегда справедливо равенство

$$W(\hat{P}_a + \hat{P}_b) = W(\hat{P}_a) + W(\hat{P}_b).$$

При этом далеко не для всех проекторов $\hat{P}_a$ и $\hat{P}_b$ выполняется условие $\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_a\,\hat{P}_b\right) = 0$. Подобная ситуация дает физикам еще один повод для критики теоремы Глизона.

Глизоноподобная теорема К. Фукса (2001 г.)

Теорема впервые была опубликована в работе C. A. Fuchs, "Quantum Foundations in the Light of Quantum Information", in "Decoherence and its Implications in Quantum Computation and Information Transfer", Proceedings of the NATO Advanced Research Workshop, Mykonos Greece, June 25–30, 2000, edited by A. Gonis and P. E. A. Turchi (IOS Press, Amsterdam, 2001), pp. 38–82. Кроме того, данную публикацию можно найти в архиве препринтов под номером quant-ph/0106166.

Кристофер Фукс сделал попытку обосновать предположения Глизона относительно свойств вероятности при помощи утверждения, что вероятность конкретного измерения напрямую связана с POVM–элементами, которые описывают данное измерение. Можно показать, что из такого предположения автоматически вытекают условия 1) – 3) для свойств вероятности. А сама теорема Глизона получает достаточно простое доказательство. Простота тут, естественно, относительно оригинального доказательства Э. Глизона.

Условие теоремы К. Фукса и некоторые сопутствующие рассуждения. Пусть каждое возможное состояние квантовой системы описывается при помощи одного из векторов $|\,\psi\,\rangle \in \mathcal{H}_d$, где $\mathcal{H}_d$ – конечномерное гильбертово пространство размерности $\dim\,\mathcal{H}_d = d$.

Пусть вероятности $W(\ldots)$ того или иного исхода любого допустимого измерения, которое может быть проведено над квантовой системой, описываются при помощи полного набора POVM–элементов $\{\hat{E}_\alpha\}$ (см. параграф "Понятие о POVM–элементах"). Напомним, что с помощью каждого подобного набора реализуется неортогональное разложение единицы

$$\sum_\alpha \hat{E}_\alpha \;=\; \hat{1}.$$

Рассмотрим множество $\mathcal{E}_d$, которое содержит все POVM–элементы и их полные наборы, которые описывают результаты любых возможных измерений над квантовой системой:

$$\mathcal{E}_d \;=\; \left\{\hat{E}_\alpha :\;\; \hat{E}_\alpha = \hat{E}_\alpha^\dagger,\; 0 \le \left\langle\, \psi \,\middle|\, \hat{E}_\alpha \,\middle|\, \psi \,\right\rangle \;\forall\,|\,\psi\,\rangle \in \mathcal{H}_d\right\}.$$

Естественно предполагать, что один и тот же POVM–элемент $\hat{E}_{\alpha'}$ может входить в разные полные наборы $\{\hat{E}_\alpha\}$. Поэтому вероятность, которой соответствует оператор $\hat{E}_{\alpha'}$, должна зависеть только от конкретного POVM–элемента $\hat{E}_{\alpha'}$, но не от набора $\{\hat{E}_\alpha\}$, куда этот POVM–элемент входит в данный момент.

Таким образом для вероятности $W(\ldots)$ правильно писать $W\left(\hat{E}_{\alpha'}\right)$, а не $W\left(\hat{E}_{\alpha'} \,|\, \{\hat{E}_\alpha\}\right)$.

Для каждого полного набора $\{\hat{E}_\alpha\}$ справедливо условие нормировки вероятностей

$$\sum_\alpha W\left(\hat{E}_\alpha\right) = 1,$$

поскольку при измерении какой–то результат точно будет достигнут.

Тогда существует оператор $\hat{\rho}$, характеризующий состояние квантовой системы, который обладает свойствами а) – г) матрицы плотности (см. параграф "Свойства матрицы плотности смешанного состояния"), и

$$W\left(\hat{E}_\alpha\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{E}_\alpha\right).$$

В этом состоит условие теоремы К. Фукса.

Заметим, что в отличие от теоремы Э. Глизона, в теореме К. Фукса отсутствует ограничение снизу на размерность пространства $\mathcal{H}_d$. Это связано с тем, что POVM–элементы не ортогональны друг другу, а проекторы – ортогональны. То есть для POVM–элементов предположение 3) теоремы Глизона может не выполняться.

Доказательство теоремы К. Фукса. С математической точки зрения функцию $W(\ldots)$ можно рассматривать как непрерывное отображение множества $\mathcal{E}_d$ на отрезок $[0,\,1]$, то есть $\mathcal{E}_d \overset{W}{\to} [0,\,1]$. Доказательство разобьем на шесть этапов.

1. Докажем, что отображение $W(\ldots)$ **аддитивно**, то есть что

$$W\left(\hat{E}_1 + \hat{E}_2\right) = W\left(\hat{E}_1\right) + W\left(\hat{E}_2\right).$$

Для этого рассмотрим полный набор POVM–элементов $\{\hat{E}_1,\,\hat{E}_2,\,\ldots,\,\hat{E}_n\}$. Тогда можно написать:

$$\hat{E}_1 + \hat{E}_2 + \hat{E}_3 + \ldots \hat{E}_n = \hat{1} \quad \Longrightarrow \quad W\left(\hat{E}_1\right) + W\left(\hat{E}_2\right) + \sum_{i=3}^{n} W\left(\hat{E}_i\right) = 1.$$

Положим теперь $\hat{E}_0 = \hat{E}_1 + \hat{E}_2$ и запишем

$$\hat{E}_0 + \hat{E}_3 + \ldots \hat{E}_n = \hat{1} \quad \Longrightarrow \quad W\left(\hat{E}_0\right) + \sum_{i=3}^{n} W\left(\hat{E}_i\right) = 1.$$

Поэтому

$$W\left(\hat{E}_1 + \hat{E}_2\right) = W\left(\hat{E}_0\right) = 1 - \sum_{i=3}^{n} W\left(\hat{E}_i\right) = W\left(\hat{E}_1\right) + W\left(\hat{E}_2\right).$$

Аддитивность отображения $W(\ldots)$ доказана.

2. Теперь покажем, что $W(\ldots)$ является **ограниченно-линейным** отображением на $\mathcal{E}_d$, то есть, что

$$W\left(\frac{n}{m}\hat{G}\right) = \frac{n}{m}W\left(\hat{G}\right),$$

где n и m – целые числа и $0 \leq \dfrac{n}{m}$.

Для этого воспользуемся свойством аддитивности. Тогда

$$m\,W\left(\frac{1}{m}\hat{E}\right) = W\left(\hat{E}\right) = n\,W\left(\frac{1}{n}\hat{E}\right).$$

Введем новый оператор $\hat{G} = \dfrac{1}{n}\hat{E}$. Тогда $W\left(\dfrac{n}{m}\hat{G}\right) = \dfrac{n}{m}W\left(\hat{G}\right)$. Линейность $W(\ldots)$, ограниченная рациональными числами, доказана.

3. Чтобы доказать **линейность** $W(\ldots)$ на множестве $\mathcal{E}_d$ введем действительное число g такое, что $\hat{E} = g\hat{G}$. Аппроксимируем g сверху и снизу сходящимися к g последовательностями действительных чисел (например, это могут быть десятичные дроби). Тогда в силу ограниченной линейности и непрерывности отображения $W(\ldots)$ немедленно получим:

$$W\left(g\,\hat{G}\right) = g\,W\left(\hat{G}\right).$$

Таким образом линейность $W(\ldots)$ на $\mathcal{E}_d$ доказана.

4. Пусть $\mathcal{O}_d$ – векторное пространство эрмитовых операторов, действующих на $\mathcal{H}_d$. Покажем, что $\dim \mathcal{O}_d = d^2$. Действительно, пусть $\hat{A} \in \mathcal{O}_d$. Оператор $\hat{A}$ в общем виде задается комплексной матрицей $d \times d$, которая содержит $2d^2$ действительных чисел. Условие эрмитовости оставляет только d^2 независимых действительных параметров, число которых определяет размерность пространства $\mathcal{O}_d$.

5. Пространство $\mathcal{O}_d$ натянуто на пространство $\mathcal{E}_d$, поскольку среди операторов в $\mathcal{E}_d$ по определению содержатся все проекционные операторы. То есть $\dim \mathcal{E}_d = \dim \mathcal{O}_d = d^2$. Тогда $\forall\, \hat{E} \in \mathcal{E}_d$ можем записать:

$$\hat{E} = \sum_{i=1}^{d^2} c_i \, \hat{\Pi}_i,$$

где $\hat{\Pi}_i$ – фиксированный операторный базис в $\mathcal{E}_d$, c_i – коэффициенты разложения. Поскольку операторы $\hat{E}$ и $\{\hat{\Pi}_i\}$ – эрмитовы, то коэффициенты c_i являются действительными числами. В силу линейности отображения $W(\ldots)$ на $\mathcal{E}_d$ получаем, что

$$W\left(\hat{E}\right) = \sum_{i=1}^{d^2} c_i \, W\left(\hat{\Pi}_i\right).$$

Определим оператор $\hat{\rho}$ как решение d^2 линейных уравнений

$$\begin{cases} W\left(\hat{\Pi}_1\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{\Pi}_1\right) \\ W\left(\hat{\Pi}_2\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{\Pi}_2\right) \\ \ldots \\ W\left(\hat{\Pi}_{d^2}\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{\Pi}_{d^2}\right) \end{cases}.$$

Оператор $\hat{\rho}$ описывается при помощи d^2 независимых параметров. Кроме того, справедливо соотношение

$$W\left(\hat{E}\right) = \sum_{i=1}^{d^2} c_i\, W\left(\hat{\Pi}_i\right) = \sum_{i=1}^{d^2} c_i\, \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{\Pi}_i\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}\sum_{i=1}^{d^2} c_i\,\hat{\Pi}_i\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{E}\right).$$

6. Рассмотрим свойства оператора $\hat{\rho}$.

a) Эрмитовость.

$$\mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{E}\right) = W\left(\hat{E}\right) = W^{\dagger}\left(\hat{E}\right) = \left(\mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{E}\right)\right)^{\dagger} = \mathbf{Tr}\left(\hat{E}^{\dagger}\,\hat{\rho}^{\dagger}\right).$$

Поскольку POVM–элементы эрмитовы по определению (т. е. $\hat{E}^{\dagger} = \hat{E}$), то

$$W\left(\hat{E}\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{E}\,\hat{\rho}^{\dagger}\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}^{\dagger}\,\hat{E}\right) \quad \Longrightarrow \quad \hat{\rho} = \hat{\rho}^{\dagger}.$$

Таким образом эрмитовость оператора $\hat{\rho}$ доказана.

б) Неотрицательность диагональных матричных элементов. Для доказательства рассмотрим проектор $\hat{P}_\psi = |\,\psi\,\rangle\,\langle\,\psi\,|$ на произвольное чистое состояние $|\,\psi\,\rangle \in \mathcal{H}_d$. Тогда из того, что вероятность $W\,(\ldots) \in [0,\,1]$, имеем:

$$0 \leq W\left(\hat{P}_\psi\right) = \mathbf{Tr}\,\left(\hat{\rho}\,\hat{P}_\psi\right) = \langle\,\psi\,|\,\hat{\rho}\,|\,\psi\,\rangle.$$

Неотрицательность доказана.

в) След оператора $\hat{\rho}$ вычисляем следующим образом:

$$\mathbf{Tr}\,\hat{\rho} = \mathbf{Tr}\,\left(\hat{\rho}\,\hat{1}\right) = \mathbf{Tr}\,\left(\hat{\rho}\sum_\alpha \hat{E}_\alpha\right) = \sum_\alpha \mathbf{Tr}\,\left(\hat{\rho}\,\hat{E}_\alpha\right) = \sum_\alpha W\left(\hat{E}_\alpha\right) = 1.$$

г) Наконец, найдем след оператора $\hat{\rho}^{\,2}$. Имеем:

$$\mathbf{Tr}\,\hat{\rho}^{\,2} = \mathbf{Tr}\,\left(\hat{\rho}\,\hat{\rho}\right) = W\left(\hat{\rho}\right) \leq 1,$$

поскольку $W\,(\ldots) \in [0,\,1]$.

Таким образом глизоноподобная теорема К. Фукса полностью доказана. Хотя доказательство тоже оказалось не очень коротким. Но и не на 25 страниц!

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

Количественное сравнение квантовых состояний

Вопрос: какие существуют количественные критерии, при помощи которых можно заключить, что два состояния квантовой системы, задаваемые матрицами плотности $\hat{\rho}_A$ и $\hat{\rho}_B$, «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):

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

4) Следовая метрика (trace distance):

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

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):

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

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

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

   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. $D_{Tr}\left(\hat{\rho}_A,\ \sum\limits_\ell W_\ell\hat{\rho}_\ell\right) \leq \sum\limits_\ell W_\ell\, D_{Tr}\left(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_\ell\right)$ **– 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 степень совпадения по Ульману $F_1(\hat{\rho}_A,\, \hat{\rho}_B)$?

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 следовую метрику $D_{Tr}(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B)$?

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 $\rho_i = |\sigma_i|^2$ (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 $\hat{\rho} = \hat{\rho}_A^{1/2}\, \hat{\rho}_B\, \hat{\rho}_A^{1/2} = \dfrac{1}{24} \begin{pmatrix} 9 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & 3 \end{pmatrix}$ **имеет собственные значения** $\rho_{1,\,2} = \dfrac{1}{4\sqrt{3}} \left(\sqrt{3} \pm 1\right) \geq 0$ **(то есть эта матрица действительно положительно определена). Поэтому**

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

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

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

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.

А как все-таки честно вычислять различные функции от матрицы плотности?

В параграфах "Пример вычисления $F_1(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B)$ и $D_{Tr}(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B)$" и "Пример вычисления остальных степеней совпадения и метрик" матрица $\hat{\rho}_A$ была намеренно выбрана диагональной. Поэтому не представляло труда найти, например, $\hat{\rho}_A^{1/2}$. Как быть в том случае, когда матрица плотности $\hat{\rho}$ не диагональна? Например,

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} 7/8 & i/5 \\ -i/5 & 1/8 \end{pmatrix},$$

и необходимо вычислить $\hat{\rho}^{1/2}$. Излюбленный студенческий метод – подбор – тут не проходит, поскольку

$$\hat{\rho}^{1/2} = \frac{1}{34\sqrt{10}} \begin{pmatrix} 16\sqrt{37} + \sqrt{3} & 4i\,(\sqrt{37} - \sqrt{3}) \\ -4i\,(\sqrt{37} - \sqrt{3}) & \sqrt{37} + 16\sqrt{3} \end{pmatrix}.$$

Мы привели ответ, который был получен честным способом, чтобы показать тщетность любых попыток "подобрать и угадать" даже в простейшем случае недиагональной матрицы 2×2.

Вопрос: а как честно найти любую разумную функцию от матрицы плотности $\hat{\rho}$?

Ответ: поскольку $\hat{\rho}$ – эрмитова матрица, то в силу спектральной теоремы всегда существует такое унитарное преобразование $\hat{S}$ (составленное из компонент собственных векторов матрицы $\hat{\rho}$), которое приводит $\hat{\rho}$ к диагональному виду. То есть

$$\hat{S}^{-1}\,\hat{\rho}\,\hat{S} = \hat{\rho}_{diag} = \begin{pmatrix} \rho_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \rho_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \rho_n \end{pmatrix}.$$

Для $\hat{\rho}_{diag}$ любая функция $F(\hat{\rho})$ вычисляется элементарно

$$F(\hat{\rho}_{diag}) = \begin{pmatrix} F(\rho_1) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & F(\rho_2) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & F(\rho_n) \end{pmatrix}.$$

После этого необходимо сделать обратное преобразование

$$F(\hat{\rho}) = \hat{S}\,F(\hat{\rho}_{diag})\,\hat{S}^{-1}.$$

Таким образом задача свелась к нахождению $\hat{S}$, $\hat{S}^{-1}$ и перемножению матриц. Как это делать, учат в курсе "Линейной алгебры". Мы напомним основные этапы без подробных выкладок на примере вычисления квадратного корня из приведенной в начале параграфа матрицы $\hat{\rho}$ размерности 2×2.

Поскольку в качестве столбцов в матрицу $\hat{S}$ входят компоненты собственных векторов матрицы $\hat{\rho}$, то сначала необходимо решить характеристическое уравнение $\det\left(\hat{\rho} - \rho\,\hat{1}\right) = 0$ для матрицы $\hat{\rho}$ и найти собственные значения этой матрицы. В нашем случае все сводится к квадратному уравнению с корнями $\rho_1 = {}^{37}\!/_{40}$ и $\rho_2 = {}^{3}\!/_{40}$.

После этого собственные векторы $|\,\rho_i\,\rangle$ матрицы плотности $\hat{\rho}$, отвечающие собственным значениям ρ_i, находятся из уравнения $\hat{\rho}\,|\,\rho_i\,\rangle = \rho_i\,|\,\rho_i\,\rangle$ и условия нормировки $\langle\,\rho_i\,|\;\rho_j\,\rangle = \delta_{ij}$. В рассматриваемом примере

$$|\,\rho_1\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{17}}\begin{pmatrix} 4i \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad |\,\rho_2\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{17}}\begin{pmatrix} 1 \\ 4i \end{pmatrix}.$$

Тогда

$$\hat{S} = \frac{1}{\sqrt{17}} \begin{pmatrix} 4i & 1 \\ 1 & 4i \end{pmatrix}.$$

Матрицу $\hat{S}^{-1}$ проще всего найти при помощи теоремы Гамильтона–Кэлли: "Всякая матрица (оператор) является корнем своего характеристического уравнения". Поэтому

$$0 = \det\left(\hat{S} - \lambda\,\hat{1}\right) = \lambda^2 - \frac{8i}{\sqrt{17}}\lambda - 1.$$

Откуда

$$\hat{S}^2 - \frac{8i}{\sqrt{17}}\hat{S} - \hat{1} = 0 \quad \Rightarrow \quad \hat{S} - \frac{8i}{\sqrt{17}}\hat{1} - \hat{S}^{-1} = 0.$$

Поэтому

$$\hat{S}^{-1} = \hat{S} - \frac{8i}{\sqrt{17}}\hat{1} = \frac{1}{\sqrt{17}} \begin{pmatrix} -4i & 1 \\ 1 & -4i \end{pmatrix}.$$

Дальнейшая задача сводится к безошибочному перемножению матриц и получению ответа, который приведен в начале параграфа.

Физические основания введения метрик (на примере следовой метрики $D_{Tr}(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B)$)

Пусть задано пространство состояний $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$, в котором "живут" всего два состояния $\hat{\rho}_A$ и $\hat{\rho}_B$. В этом пространстве можно определить "оператор измерения исхода A", то есть оператор измерения того, что квантовая система находится в состоянии $\hat{\rho}_A$. Обозначим этот оператор как $\hat{E}_A$. И "оператор измерения исхода, отличного от исхода A". Назовем данный оператор $\hat{E}_{\bar{A}}$. Согласно логике измерения

$$\hat{E}_A + \hat{E}_{\bar{A}} = \hat{1}.$$

По свойству нашего пространства $\hat{E}_{\bar{A}} \equiv \hat{E}_B$. Тогда вероятность успешного определения состояния $\hat{\rho}_A$ есть

$$w_{succses\ A} = \mathbf{Tr}\left(\hat{E}_A\,\hat{\rho}_A\right),$$

а вероятность успешного определения состояния $\hat{\rho}_B$ запишется как

$$w_{succses\ B} = \mathbf{Tr}\left(\hat{E}_B\,\hat{\rho}_B\right) = \mathbf{Tr}\left((\hat{1} - \hat{E}_A)\,\hat{\rho}_B\right) = 1 - \mathbf{Tr}\left(\hat{E}_A\,\hat{\rho}_B\right),$$

где было учтено, что $\mathbf{Tr}\left(\hat{1}\,\hat{\rho}_B\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}_B\right) = 1$.

Тогда максимальная вероятность успешного определения любого из двух состояний запишется в виде

$$
\begin{aligned}
w_{succses} &= \max_{\hat{0}\le\hat{E}_A\le\hat{1}} \frac{1}{2}\left[w_{succses\,A} + w_{succses\,B}\right] = \\
&= \frac{1}{2}\left[1 + \max_{\hat{0}\le\hat{E}_A\le\hat{1}} \mathbf{Tr}\left(\hat{E}_A\left(\hat{\rho}_A - \hat{\rho}_B\right)\right)\right] = \\
&= \frac{1}{2}\left[1 + \mathbf{Tr}\,|\hat{\rho}_A - \hat{\rho}_B|\right] = \frac{1}{2}\left[1 + D_{Tr}(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B)\right].
\end{aligned}
$$

Поскольку $0 \le D_{Tr}(\hat{\rho}_A, \hat{\rho}_B) \le 1$, то вероятность $w_{succses}$ меняется от простого угадывания состояния (когда $w_{succses} = 1/2$), до точного знания состояния (когда $w_{succses} = 1$).

То есть следовая метрика имеет прямое отношение к процедуре измерения квантовой системы и вероятности определения состояния микросистемы.

Больше подробностей можно узнать из обзора Mark M. Wilde, "From Classical to Quantum Shannon Theory", arXiv:1106.1445 [quant-ph].

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 базисным векторам $|\, b_j \,\rangle$ из пространства $\mathcal{H}_B$ подсистемы "B". Подобная конструкция получила название частичного следа матрицы плотности $\hat{\rho}$ по квантовым числам подсистемы "B". Аналогичное утверждение можно сформулировать для матрицы плотности $\hat{\rho}_B$ подсистемы "B".

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 $\{|\, b_j \,\rangle\}$ – введенный выше базис в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}_B$ подсистемы "B". Базис системы "$A + B$" состоит из векторов вида $|\, n_{ij} \,\rangle = |\, a_i \,\rangle \otimes |\, b_j \,\rangle \equiv |\, a_i \,\rangle\, |\, b_j \,\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$.

Тогда:

$$\mathbf{Tr}\left(\hat{F}\hat{\rho}\right) = \sum_{i,j}\left\langle\, n_{ij}\,\middle|\,\hat{F}\hat{\rho}\,\middle|\, n_{ij}\,\right\rangle = \sum_i\sum_j \langle\, b_j \,|\, \langle\, a_i \,|\, \hat{F}\,\hat{1}_a\,\hat{\rho}\,|\, a_i\,\rangle \,|\, b_j\,\rangle =$$

$$= \sum_j\sum_i \langle\, b_j \,|\left(\sum_k \left\langle\, a_i\,\middle|\,\hat{F}\,\middle|\, a_k\,\right\rangle \langle\, a_k \,|\, \hat{\rho} \,|\, a_i\,\rangle\right)|\, b_j\,\rangle =$$

$$= \sum_j\sum_i\sum_k \left\langle\, a_i\,\middle|\,\hat{F}\,\middle|\, a_k\,\right\rangle \langle\, b_j \,|\, \langle\, a_k \,|\, \hat{\rho} \,|\, a_i\,\rangle \,|\, b_j\,\rangle =$$

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

С другой стороны,

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

Из равенства $\mathbf{Tr}\left(\hat{F}\hat{\rho}\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{F}\hat{\rho}_A\right)$ **немедленно находим:**

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

то есть $\hat{\rho}_A = \mathbf{Tr}_B\hat{\rho}$**, что и требовалось доказать.**

Запутанные и факторизованные чистые состояния

Запутанными состояниями (англ. "entanglement states") обычно называются такие состояния, в которых определенные характеристики/наблюдаемые входящих в них микросистем связаны ("запутаны" или "сцеплены") между собой при помощи какого-либо закона сохранения. Запутанные состояния играют чрезвычайно важную роль при проверке оснований квантовой механики. С их помощью формулируются парадокс Эйнштейна-Подольского-Розена, парадокс кота Шредингера, неравенства Белла и неравенства Леггетта-Гарга, процедура измерения 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 $S = 0$ (синглетное состояние). 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 общий вектор состояния синглетного по спину состояния может быть записан в виде:

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

Заметим, что запутанные состояния можно создавать не только с помощью законов сохранения, но и (реже) при постановке экспериментов определенного типа. Любопытным примером тут может служить квантовый парадокс Л. де Бройля.

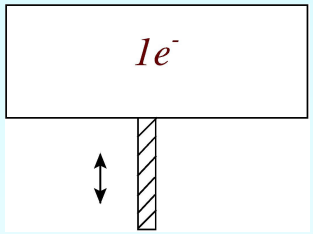


Рис. 1

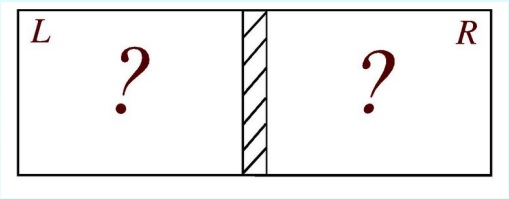


Рис. 2

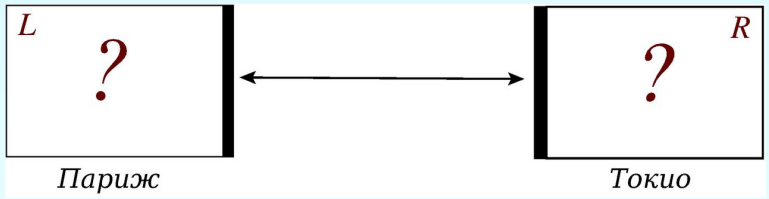


Рис. 3

Поместим один электрон в коробку с идеально отражающими стенками (как указано на рис. 1). Когда электрон пробудет долгое время в коробке (так что всякая информация о его местоположении будет утеряна), мгновенно разделим коробку пополам отражающей перегородкой (рис. 2).

После этого одну половинку доставим в Париж, а другую – в Токио (рис. 3). Если рассматривать электрон исключительно как частицу, то он должен находиться строго в одной из половинок коробки. Однако с точки зрения квантовой механики даже в представлении чисел заполнения это НЕ так. Электрон будет находиться в запутанном состоянии

$$|\,\psi^{+}\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\,|\,1_L\,\rangle\,|\,0_R\,\rangle + |\,0_L\,\rangle\,|\,1_R\,\rangle\,\Big),$$

где $|\,1_L\,\rangle$ означает, что электрон находится в левом ("L") ящике, $|\,0_R\,\rangle$ – что электрон отсутствует в правом ("R") ящике. В рассмотренном примере закон сохранения числа частиц реализует запутанное состояние только при определенной постановке эксперимента.

Схематично идея парадокса была представлена Л. де Бройлем еще в начале 1930-х годов (см. Люи де Брогль, "Введение в волновую механику", ДНТВУ, Харьков–Киев, 1934 г., стр. 14), то есть еще до публикации парадокса ЭПР (1935 г.). Однако окончательный вариант парадокса увидел свет лишь в работе de Broglie L., J. Phys. Radium 20, p.963 (1959).

В рассмотренных примерах частицы “1” и “2” или наличие/отсутствие электрона в каждом из двух ящиков можно рассматривать как две подсистемы единой квантовой системы. Такой взгляд подводит нас к более общему и более формальному определению запутанного состояния в терминах векторов состояния без явного привлечения законов сохранения или условий постановки эксперимента.

Пусть некоторая квантовая система состоит из подсистем “1”, “2”, ..., “n”. Тогда в гильбертовом пространстве всей системы можно ввести базис $\left|\psi_i^{(1)}\right\rangle \otimes \left|\psi_j^{(2)}\right\rangle \otimes \ldots \otimes \left|\psi_k^{(n)}\right\rangle$ и разложить вектор состояния системы $|\,\Psi\,\rangle$ по этому базису:

$$|\,\Psi\,\rangle = \sum_{i,j,\ldots,k} C_{i,j,\ldots,k} \left|\psi_i^{(1)}\right\rangle \otimes \left|\psi_j^{(2)}\right\rangle \otimes \ldots \otimes \left|\psi_k^{(n)}\right\rangle.$$

Если при любом выборе базиса в полученном разложении ДВА или более коэффициентов $C_{i,j,\ldots,k} \neq 0$, то говорят, что квантовая система находится в запутанном состоянии.

Если же в каком-либо базисе вектор состояния $|\,\Psi\,\rangle$ можно представить как

$$|\,\Psi\,\rangle = \left|\psi_{i'}^{(1)}\right\rangle \otimes \left|\psi_{j'}^{(2)}\right\rangle \otimes \ldots \otimes \left|\psi_{k'}^{(n)}\right\rangle,$$

то говорят, что система находится в факторизованном состоянии, которое является частным случаем сепарабельного состояния.

Квантовое происхождение вероятностей W_ℓ

Вопрос: в каком состоянии находится частица "1" из предыдущего параграфа, когда вся система находится в синглетном состоянии $|\, S=0,\, S_{\vec{a}}=0\,\rangle$?

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:

$$|\,2\,\rangle \equiv \left|+^{(1)}\right\rangle \otimes \left|-^{(2)}\right\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix} \quad \text{и} \quad |\,3\,\rangle \equiv \left|-^{(1)}\right\rangle \otimes \left|+^{(2)}\right\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix}.$$

Странный выбор названий базисных векторов станет ясен из параграфа "Явный вид матрицы плотности состояния $|\,\Psi^-\,\rangle$".

В рассматриваемом базисе с учетом определения операции прямого произведения бра- и кет-векторов

$$|\,a\,\rangle\langle\,b\,| = \begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\\a_4\end{pmatrix} \otimes \left(b_1,\, b_2,\, b_3,\, b_4\right) = \begin{pmatrix}a_1 b_1 & a_1 b_2 & a_1 b_3 & a_1 b_4\\ a_2 b_1 & a_2 b_2 & a_2 b_3 & a_2 b_4\\ a_3 b_1 & a_3 b_2 & a_3 b_3 & a_3 b_4\\ a_4 b_1 & a_4 b_2 & a_4 b_3 & a_4 b_4\end{pmatrix}$$

получаем:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}\left(|\,2\,\rangle\langle\,2\,| + |\,3\,\rangle\langle\,3\,| - |\,2\,\rangle\langle\,3\,| - |\,3\,\rangle\langle\,2\,|\right) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & -1 & 0\\ 0 & -1 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\end{pmatrix}.$$

Матрица плотности $\hat{\rho}^{(1)}$ частицы "1" в базисе

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

который соответствует выбору базиса $|\,2\,\rangle$ и $|\,3\,\rangle$ согласно определению прямого произведения

$$|\,a\,\rangle\,|\,b\,\rangle = \begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix}b_1\\b_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}a_1 b_1\\a_1 b_2\\a_2 b_1\\a_2 b_2\end{pmatrix},$$

равна

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

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

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

где на последнем шаге мы вновь воспользовались определением прямого произведения двух векторов

$$|\,a\,\rangle\,\langle\,b\,| = \begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix} \otimes (b_1,\, b_2) = \begin{pmatrix}a_1 b_1 & a_1 b_2\\a_2 b_1 & a_2 b_2\end{pmatrix}.$$

Легко видеть, что $\mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}^{(1)}\right)^2 = 1/2 < 1$. 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! Аналогичное рассуждение справедливо для частицы "2".

Этот простой пример иллюстрирует то, как возникают вероятности W_ℓ в самих квантовых системах при участии в их приготовлении и/или измерении только идеальных макроприборов.

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.

Альтернативный способ вычисления частичного следа

Покажем, как можно получить матрицу $\hat{\rho}^{(1)}$ из параграфа "Квантовое происхождение вероятностей W_ℓ", оставаясь только в рамках матричного формализма и техники прямых произведений. Для этого необходимо вычислить

$$\hat{1}^{(1)} \otimes \left| +^{(2)} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Эрмитово сопрягаем получившееся выражение

$$\left\langle +^{(2)} \right| \otimes \hat{1}^{(1)} = \left(\hat{1}^{(1)} \otimes \left| +^{(2)} \right\rangle \right)^{\dagger} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Аналогично

$$\hat{1}^{(1)} \otimes \left| -^{(2)} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ и } \left\langle -^{(2)} \right| \otimes \hat{1}^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Теперь задача свелась к простому перемножению матриц, поскольку

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

Указанный способ часто бывает предпочтительнее, если матрица плотности $\hat{\rho}$ изначально задана в виде матрицы.

Факторизация матрицы плотности

Вопрос: но разве классическая физика не является частным случаем квантовой физики в пределе $\hbar \to 0$? Тогда почему в рамках классической физики всегда можно говорить о знании полной информации для каждой из макроскопических подсистем, если известна информация о системе в целом, в то время как в рамках квантовой физики для микроскопических подсистем это, как правило, невозможно?

Ответ: тут ключевым является прилагательное "макроскопический". Даже при наличии взаимодействия между макроскопическими подсистемами одной системы эти подсистемы с точностью до выполнения соотношения неопределенности Гейзенберга всегда можно считать разделенными в пространстве, то есть сепарабельными. Тогда вектор состояния макроскопической системы (пусть эта система для простоты состоит только из двух подсистем) в каждый момент времени с требуемой в классической физике степенью точности можно записать в факторизованном виде

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

Тогда матрица плотности системы “1” + “2” также факторизуется, то есть

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

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.

Сепарабельное состояние для матрицы плотности

Пример факторизуемого состояния, записанного на языке матрицы плотности, приводит нас к общему определению понятия сепарабельного состояния в квантовой физике.

Пусть микросистема состоит из подсистем "1", "2", ..., "n". Тогда состояние такой квантовой системы будет сепарабельным, если ее матрица плотности $\hat{\rho}$ записывается в виде:

$$\hat{\rho} = \sum_{\ell} W_\ell \, \hat{\rho}_\ell^{(1)} \otimes \hat{\rho}_\ell^{(2)} \otimes \ldots \otimes \hat{\rho}_\ell^{(n)},$$

где $\hat{\rho}_\ell^{(\alpha)}$ — матрицы плотности чистых состояний (проекторы на чистые состояния) $\left| \psi_\ell^{(\alpha)} \right\rangle$ для α – ой подсистемы.

Если матрицу плотности $\hat{\rho}$ невозможно представить как сумму прямых произведений матриц плотности чистых состояний (*то есть как сумму факторизованных состояний*), то такое состояние может быть только запутанным.

Различные критерии сепарабельности будут рассмотрены ниже.

Как создать запутанное состояние?

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

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

Определим оператор инверсии $\hat{Z}$ по правилу $\hat{Z}\,|\pm\rangle = |\mp\rangle$ (*самостоятельно* постройте такой оператор *в явном виде*). Наконец, создадим состояние $\left|\psi^{(1)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|+^{(1)}\right\rangle - \left|-^{(1)}\right\rangle\right)$. Тогда:

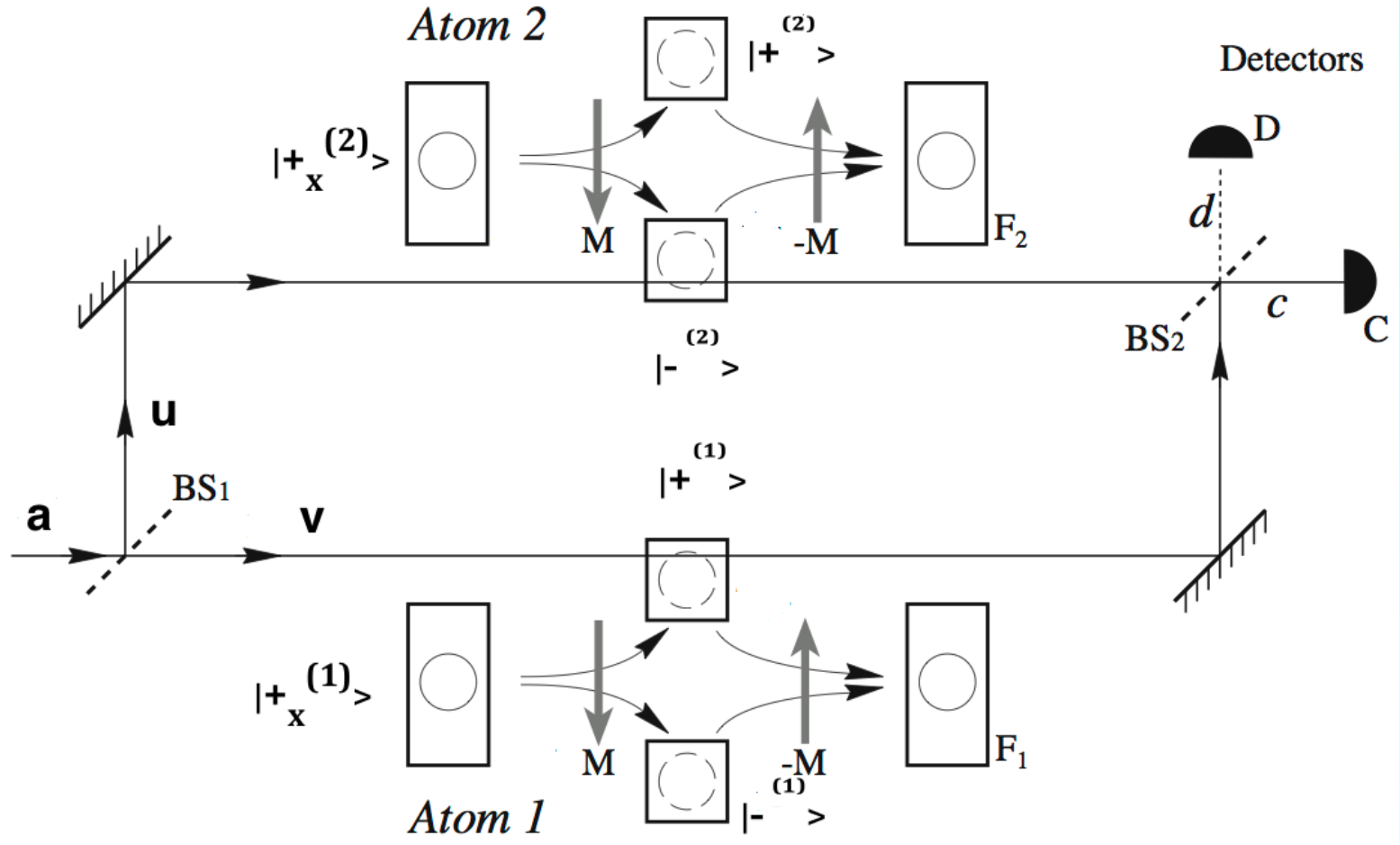
$$\left(\hat{1}^{(1)} \otimes \hat{Z}^{(2)}\right)\,\hat{U}\left|\psi^{(1)}\right\rangle\left|0^{(2)}\right\rangle \to \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|+^{(1)}\right\rangle\left|-^{(2)}\right\rangle - \left|-^{(1)}\right\rangle\left|+^{(2)}\right\rangle\right).$$

Таким образом, при помощи процедуры клонирования известного состояния оказалось возможно построить запутанное состояние. Но для этого потребовалось, чтобы микросистемы провзаимодействовали друг с другом. Аналогичная идея будет использована нами в параграфе "Модель измерения по фон Нему" при создании простейшей теории измерений.

Рассмотренный частный пример иллюстрирует общую идею о том, что ОДНИМ ИЗ способов создания запутанности между двумя микросистемами является непосредственное взаимодействие этих микросистем друг с другом.

В литературе можно встретить и более радикальное утверждение, что способ непосредственного взаимодействия является единственным способом создания запутанного состояния: см., например, книгу Дж. Прескилла, "Квантовая информация и квантовые вычисления", т. 1, М.-И., РХД, 2008 г., стр. 73 (перевод с издания 1998 г.) и многие другие книги.

Однако в 2002 году было показано, что если имеется какая–либо "ОБЩАЯ ПРИЧИНА", которая связывает две квантовые системы, то при помощи этой "общей причины" тоже можно создать запутанное состояние. При этом сами квантовые системы могут НЕ взаимодействовать друг с другом: A. Elitzur, S. Dolev, A. Zeilinger, "Time-Reversed EPR and the Choice of Histories in Quantum Mechanics", Proceedings of XXII Solvay Conference in Physics (2002) или в архиве arXiv:quant-ph/0205182. Идея "общей причины" основывается на парадоксе Харди (см. параграф "Парадокс Харди (Hardy's Paradox)").



Возьмем два атома "1" и "2" со спинами $s^{(i)} = 1/2$ каждый, где $i = \{1, 2\}$. Оба атома приведем в состояния $\left| +_x^{(i)} \right\rangle$, а затем при помощи приборов Штерна–Герлаха разделим эти состояния на состояния $\left| \pm^{(i)} \right\rangle$ (вдоль оси z) соответственно. Каждый из четырех типов состояний поместим в отдельную "коробку" (см. рис.). То есть у нас имеется четыре "коробки".

Добьемся того, чтобы после проведения подобной процедуры каждый атом описывался бы при помощи вектора состояния

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

Любая из четырех "коробок" полностью проницаема для фотонов. Но атом "коробку" покинуть не может. Если фотон попал в "коробку", то со 100%–ой вероятностью он будет поглощен атомом.

Теперь сконструируем интерферометр Маха–Цандера, на вход которого подаются одиночные фотоны. Техника описания такого интерферометра дана в параграфе "Конструктор для быстрого анализа процессов однофотонной интерференции". При этом "коробку" с состоянием $\left|+^{(1)}\right\rangle$ поместим в плече v интерферометра, а "коробку" с состоянием $\left|-^{(2)}\right\rangle$ поместим в плече u как показано на рисунке. Две другие "коробки" находятся вне плеч интерферометра. После этого рассмотрим прохождение фотона через интерферометр.

$$|\,a\,\rangle\,\frac{1}{\sqrt{2}}\left(i\left|+^{(1)}\right\rangle+\left|-^{(1)}\right\rangle\right)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(i\left|+^{(2)}\right\rangle+\left|-^{(2)}\right\rangle\right)|\,C_0\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle\,\to$$

$$\to\quad\frac{i\,|\,u\,\rangle+|\,v\,\rangle}{2\sqrt{2}}\left(i\left|+^{(1)}\right\rangle+\left|-^{(1)}\right\rangle\right)\left(i\left|+^{(2)}\right\rangle+\left|-^{(2)}\right\rangle\right)|\,C_0\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle.$$

Поскольку фотон всегда поглощается атомом из коробки, то после прохождения коробок мы должны исключить слагаемые, в которые входят произведения $|\,v\,\rangle\left|+^{(1)}\right\rangle$ и $|\,u\,\rangle\left|-^{(2)}\right\rangle$. Так мы учтем поглощение фотона атомом. Тогда получаем, что

$$\begin{aligned}
\tfrac{1}{2\sqrt{2}}\quad & \Big[-|\,u\,\rangle\left(i\left|+^{(1)}\right\rangle+\left|-^{(1)}\right\rangle\right)\left|+^{(2)}\right\rangle+\\
+\quad & |\,v\,\rangle\left|-^{(1)}\right\rangle\left(i\left|+^{(2)}\right\rangle+\left|-^{(2)}\right\rangle\right)\Big]\,|\,C_0\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle\,\to\\
\to\quad & \frac{1}{4}\Big[-\left(|\,c\,\rangle+i\,|\,d\,\rangle\right)\left(i\left|+^{(1)}\right\rangle+\left|-^{(1)}\right\rangle\right)\left|+^{(2)}\right\rangle+\\
+\quad & \left(i\,|\,c\,\rangle+|\,d\,\rangle\right)\left|-^{(1)}\right\rangle\left(i\left|+^{(2)}\right\rangle+\left|-^{(2)}\right\rangle\right)\Big]\,|\,C_0\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle\,\to
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
\to\quad & \frac{1}{4}\Big[\,|\,c\,\rangle\,\Big(-i\,\Big|+^{(1)}\Big\rangle\Big|+^{(2)}\Big\rangle + i\,\Big|-^{(1)}\Big\rangle\Big|-^{(2)}\Big\rangle - 2\,\Big|-^{(1)}\Big\rangle\Big|+^{(2)}\Big\rangle\Big) + \\
+\quad & |\,d\,\rangle\,\Big(\Big|+^{(1)}\Big\rangle\Big|+^{(2)}\Big\rangle + \Big|-^{(1)}\Big\rangle\Big|-^{(2)}\Big\rangle\Big)\Big]\,|\,C_0\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle \to \\
\to\quad & \frac{1}{4}\Big[-i\,\Big|+^{(1)}\Big\rangle\Big|+^{(2)}\Big\rangle + i\,\Big|-^{(1)}\Big\rangle\Big|-^{(2)}\Big\rangle - 2\,\Big|-^{(1)}\Big\rangle\Big|+^{(2)}\Big\rangle\Big]\,|\,C\,\rangle\,|\,D_0\,\rangle + \\
+\quad & \frac{1}{4}\Big[\Big|+^{(1)}\Big\rangle\Big|+^{(2)}\Big\rangle + \Big|-^{(1)}\Big\rangle\Big|-^{(2)}\Big\rangle\Big]\,|\,C_0\,\rangle\,|\,D\,\rangle.
\end{aligned}
$$

Таким образом, если на вход интерферометра подан одиночный фотон, а на выходе сработал только детектор "D" (состояние $|\,C_0\,\rangle\,|\,D\,\rangle$), то можно утверждать, что оба атома будут находиться в ЗАПУТАННОМ белловском состоянии

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

хотя атомы никогда непосредственно друг с другом НЕ взаимодействовали! Тем не менее, для запутанности атомов имеется "общая причина" – фотон, прошедший интерферометр Маха–Цандера.

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

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

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 $\sum\limits_\ell \sqrt{W_\ell}\left(\hat{U}_A\,|\,a_\ell\,\rangle\right)\,|\,b_\ell\,\rangle$, 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 НЕверно. 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 $\sum\limits_\ell \sqrt{W_\ell}\left|\ell^{(A)}\right\rangle\left|\ell^{(B)}\right\rangle\left|\ell^{(C)}\right\rangle$, 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:

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

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

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

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

Очевидно, что эти состояния образуют базис в пространстве двух спинов $s = 1/2$, который связан унитарным преобразованием с введенным ранее базисом $|\, 1 \,\rangle$, $|\, 2 \,\rangle$, $|\, 3 \,\rangle$ и $|\, 4 \,\rangle$.

Квантовая телепортация

Star Track

Half–Life 2

Телепортация давно существует в "Звездном пути", "Андромеде", "DOOM", "Half–Life" и много где еще. Однако первая научная статья по квантовой телепортации увидела свет только в 1993 году: C.H. Bennett, G. Brassard, C. Crepeau, R. Jozsa, A. Peres, W.K. Wootters, "Teleporting an Unknown Quantum State via Dual Classical and Einstein–Podolsky–Rosen Channels", Phys. Rev. Lett. 70, pp.1895–1899 (1993). Автором термина считают физика Чарльза Беннетта (первого автора статьи).

Задача: необходимо передать неизвестный вектор состояния

$$|\psi\rangle = C_1 \left|+^{(S)}\right\rangle + C_2 \left|-^{(S)}\right\rangle$$

от Аленушки к Братцуиванушке. Каким образом это сделать? Клонировать? Невозможно (см. параграф "Теорема о невозможности клонирования произвольного чистого состояния"). В "чемодане"? Трудно обеспечить во время переноски, чтобы система $|\psi\rangle$ оставалась замкнутой. При помощи ансамбля одинаково приготовленных квантовых систем $\{|\psi\rangle\}$ измерить коэффициенты C_1 и C_2 и передать их Братцуиванушке? Тоже плохо, поскольку любое измерение происходит с конечной точностью. А потому Братециванушка не сможет воспроизвести состояние $|\psi\rangle$ абсолютно точно. А что, если вектор $|\psi\rangle$ вообще в единственном экземпляре?

Чтобы **решить** данную **задачу**, была предложена следующая процедура. Сначала Аленушка и Братециванушка должны создать общее запутанное состояние

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

где индекс "A" относится к Аленушке, а индекс "B" – к Братцуиванушке.

Теперь рассмотрим полное состояние системы, которое включает в себя векторы, принадлежащие Аленушке, векторы Братцаиванушки и вектор $|\psi\rangle$, который тоже находится у Аленушки:

$$|\Psi_{tot}\rangle = |\psi\rangle \otimes |\Phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(C_1\left|+^{(S)}\right\rangle\left|+^{(A)}\right\rangle\left|+^{(B)}\right\rangle + \dots\right).$$

Далее разложим систему "$(S)+(A)$", которая находится на руках у Аленушки, по базису Белла. После простых вычислений, приходим к выражению:

$$\begin{aligned}
|\Psi_{tot}\rangle \;=\; & \frac{1}{2}\Big[\left|\Phi^+_{\psi A}\right\rangle\left(C_1\left|+^{(B)}\right\rangle + C_2\left|-^{(B)}\right\rangle\right) + \\
+ & \left|\Phi^-_{\psi A}\right\rangle\left(C_1\left|+^{(B)}\right\rangle - C_2\left|-^{(B)}\right\rangle\right) + \\
+ & \left|\Psi^+_{\psi A}\right\rangle\left(C_1\left|-^{(B)}\right\rangle + C_2\left|+^{(B)}\right\rangle\right) + \\
+ & \left|\Psi^-_{\psi A}\right\rangle\left(C_1\left|-^{(B)}\right\rangle - C_2\left|+^{(B)}\right\rangle\right)\Big].
\end{aligned}$$

После этого Аленушке необходимо выполнить измерение в базисе Белла и передать Братцуиванушке, какое состояние она зарегистрировала.

У Братцаиванушки может быть несколько тактик. Во первых, он может оставлять у себя события только тогда, когда знает, что Аленушка зарегистрировала состояние $\left|\,\Phi^{+}_{\psi\,A}\,\right\rangle$. Действительно, в этом случае состояние Братцаиванушки будет $C_1\left|+^{(B)}\right\rangle + C_2\left|-^{(B)}\right\rangle$, то есть в точности совпадет с состоянием $|\,\psi\,\rangle$. Во вторых, Братециванушка может проделывать над своим состоянием набор преобразований σ_1, $i\sigma_2$, $\hat{1}$ и σ_3 в зависимости от того, какое состояние получит Аленушка при данном измерении. Например, если Аленушка получила состояние $\left|\,\Psi^{+}_{\psi\,A}\,\right\rangle$ и сообщила об этом Братцуиванушке, то Братециванушка над своим состоянием должен проделать преобразование σ_1:

$$\sigma_1\left(C_1\left|-^{(B)}\right\rangle + C_2\left|+^{(B)}\right\rangle\right) = C_1\left|+^{(B)}\right\rangle + C_2\left|-^{(B)}\right\rangle \equiv |\,\psi\,\rangle.$$

Наконец заметим, что квантовая телепортация НЕ противоречит теореме о невозможности клонирования, поскольку неизвестное состояние $|\,\psi\,\rangle$ появляется у Братцаиванушки только после того, как оно исчезло у Аленушки. То есть состояние $|\,\psi\,\rangle$ остается в единственном экземпляре.

Самостоятельно подумайте над тем, почему с помощью квантовой телепортации нельзя передавать информацию от Аленушки к Братцуиванушке быстрее скорости света? Мы еще вернемся к этому вопросу в параграфе "Локальность нерелятивистской квантовой механики на макроуровне и теорема Эберхарда".

Явный вид матрицы плотности состояния $|\Psi^-\rangle$

Пусть вектора состояния обоих спинов $s = 1/2$ существуют в двумерных гильбертовых пространствах $\mathcal{H}^{(1)}$ и $\mathcal{H}^{(2)}$ соответственно. Для каждого из пространств $\mathcal{H}^{(\alpha)}$ введем базис

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

где $\alpha = \{1, 2\}$ — индекс подсистем. Вспоминая, что прямое произведение двух векторов явно задается как

$$\begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix}b_1\\b_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}a_1\,b_1\\a_1\,b_2\\a_2\,b_1\\a_2\,b_2\end{pmatrix} \text{ и } \begin{pmatrix}a_1\\a_2\end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix}b_1 & b_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}a_1\,b_1 & a_1\,b_2\\a_2\,b_1 & a_2\,b_2\end{pmatrix},$$

можно найти базис в гильбертовом пространстве $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$:

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

$$|\,3\,\rangle = \left|-^{(1)}\right\rangle \otimes \left|+^{(2)}\right\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix}, \quad |\,4\,\rangle = \left|-^{(1)}\right\rangle \otimes \left|-^{(2)}\right\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}.$$

В этом базисе синглетное по спину состояние запишется как

$$|\,\Psi^-\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\,2\,\rangle - |\,3\,\rangle\Big) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\\-1\\0\end{pmatrix},$$

а соответствующая ему матрица плотности имеет следующий явный вид:

$$\hat{\rho}^{(\Psi^-)} = |\,\Psi^-\,\rangle\langle\,\Psi^-\,| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0\\1\\-1\\0\end{pmatrix} \otimes (0,\,1,\,-1,0) =$$

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

Матрицы плотности состояний Белла и матрицы Паули

В практических вычислениях нередко бывает удобно использовать выражения для матриц плотности систем спинов $s = 1/2$, записанные через прямые произведения матриц Паули. Покажем, как можно получить подобные выражения.

В выбранном нами базисе при помощи идейно простых и достаточно однообразных вычислений легко найти, что

$$\left|+^{(\alpha)}\right\rangle\left\langle+^{(\alpha)}\right| = \frac{1}{2}\left(\hat{1}+\sigma_3\right)^{(\alpha)}; \quad \left|-^{(\alpha)}\right\rangle\left\langle-^{(\alpha)}\right| = \frac{1}{2}\left(\hat{1}-\sigma_3\right)^{(\alpha)};$$

$$\left|+^{(\alpha)}\right\rangle\left\langle-^{(\alpha)}\right| = \frac{1}{2}\left(\sigma_1+i\sigma_2\right)^{(\alpha)}; \quad \left|-^{(\alpha)}\right\rangle\left\langle+^{(\alpha)}\right| = \frac{1}{2}\left(\sigma_1-i\sigma_2\right)^{(\alpha)},$$

где σ_i — матрицы Паули, $\alpha = \{1, 2\}$. Тогда

$$\hat{\rho}^{(\Psi^-)} =$$

$$= \frac{1}{2}\Big(\left|+^{(1)}\right\rangle\left\langle+^{(1)}\right| \otimes \left|-^{(2)}\right\rangle\left\langle-^{(2)}\right| + \left|-^{(1)}\right\rangle\left\langle-^{(1)}\right| \otimes \left|+^{(2)}\right\rangle\left\langle+^{(2)}\right| -$$

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

$$= \frac{1}{2}\,\frac{1}{4}\Big(\big(\hat{1}+\sigma_3\big)^{(1)}\otimes\big(\hat{1}-\sigma_3\big)^{(2)} + \big(\hat{1}-\sigma_3\big)^{(1)}\otimes\big(\hat{1}+\sigma_3\big)^{(2)} -$$

$$(\sigma_1+i\sigma_2)^{(1)}\otimes(\sigma_1-i\sigma_2)^{(2)} - (\sigma_1-i\sigma_2)^{(1)}\otimes(\sigma_1+i\sigma_2)^{(2)}\Big) =$$

$$= \frac{1}{4}\Big(\hat{1}^{(1)}\otimes\hat{1}^{(2)} - \sigma_1^{(1)}\otimes\sigma_1^{(2)} - \sigma_2^{(1)}\otimes\sigma_2^{(2)} - \sigma_3^{(1)}\otimes\sigma_3^{(2)}\Big).$$

Таким образом, $\hat{\rho}^{(\Psi^-)} = \frac{1}{4}\Big(\hat{1}^{(1)}\otimes\hat{1}^{(2)} - \vec{\sigma}^{(1)}\otimes\vec{\sigma}^{(2)}\Big).$

Аналогично можно получить, что:

$$\hat{\rho}^{(\Psi^+)} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0&0&0&0\\0&1&1&0\\0&1&1&0\\0&0&0&0\end{pmatrix} = \frac{1}{4}\Big(\hat{1}^{(1)}\otimes\hat{1}^{(2)} + \vec{\sigma}^{(1)}\otimes\vec{\sigma}^{(2)} - 2\,\sigma_3^{(1)}\otimes\sigma_3^{(2)}\Big),$$

$$\hat{\rho}^{(\Phi^+)} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&0&0&1\\0&0&0&0\\0&0&0&0\\1&0&0&1\end{pmatrix} = \frac{1}{4}\Big(\hat{1}^{(1)}\otimes\hat{1}^{(2)} + \vec{\sigma}^{(1)}\otimes\vec{\sigma}^{(2)} - 2\,\sigma_2^{(1)}\otimes\sigma_2^{(2)}\Big)$$

и

$$\hat{\rho}^{(\Phi^-)} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&0&0&-1\\0&0&0&0\\0&0&0&0\\-1&0&0&1\end{pmatrix} = \frac{1}{4}\Big(\hat{1}^{(1)}\otimes\hat{1}^{(2)} + \vec{\sigma}^{(1)}\otimes\vec{\sigma}^{(2)} - 2\,\sigma_1^{(1)}\otimes\sigma_1^{(2)}\Big).$$

Приведем пример, когда использование матрицы плотности, записанной в терминах матриц Паули, существенно упрощает вычисления. Данный пример касается еще одного способа нахождения частичного следа. В параграфах "Квантовое происхождение вероятностей W_ℓ" и "Альтернативный способ вычисления частичного следа" были разобраны два способа вычисления матрицы плотности $\hat{\rho}^{(1)}$ частицы "1", если система двух спинов $s = 1/2$ находится в состоянии $|\,\Psi^-\,\rangle$. Рассмотрим третий, на наш взгляд, самый короткий, способ:

$$\begin{aligned}\hat{\rho}^{(1)} &= \mathbf{Tr}_{(2)}\,\hat{\rho}^{(\Psi^-)} = \\ &= \frac{1}{4}\left(\hat{1}^{(1)}\,\mathbf{Tr}\,\hat{1}^{(2)} - \sigma_\eta^{(1)}\,\mathbf{Tr}\,\sigma_\eta^{(2)}\right) = \frac{1}{2}\,\hat{1}^{(1)},\end{aligned}$$

где по дважды повторяющемуся индексу η происходит суммирование от 1 до 3. Результат, естественно, совпадает с предыдущими расчетами, но получается буквально "в одну строчку".

Аналогичные вычисления можно выполнить для матрицы $\hat{\rho}^{(2)}$ частицы "2" (проделайте их самостоятельно).

Рассмотрим более сложный и содержательный пример. Пусть необходимо найти условную вероятность $w\left(+^{(1)}_{\vec{a}}, +^{(2)}_{\vec{b}} \,\middle|\, \Psi^-\right)$, где $\vec{a}$ и $\vec{b}$ – произвольно направленные в пространстве единичные векторы. Из параграфа "Явный вид матриц плотности спина $s = 1/2$ для его проекций $\pm 1/2$ на произвольную ось" получаем $\hat{P}^{(1+)}_{\vec{a}} = \frac{1}{2}\left(\hat{1}^{(1)} + a_\alpha \sigma^{(1)}_\alpha\right)$ и $\hat{P}^{(2+)}_{\vec{b}} = \frac{1}{2}\left(\hat{1}^{(2)} + b_\beta \sigma^{(2)}_\beta\right)$, где по дважды повторяющимся индексам α и β происходит суммирование от 1 до 3. Тогда

$$
\begin{aligned}
& w\left(+^{(1)}_{\vec{a}}, +^{(2)}_{\vec{b}} \,\middle|\, \Psi^-\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}^{(\Psi^-)}\left(\hat{P}^{(1+)}_{\vec{a}} \otimes \hat{P}^{(2+)}_{\vec{b}}\right)\right) = \\
= & \frac{\mathbf{Tr}\left(\left(\hat{1}^{(1)} \otimes \hat{1}^{(2)}\right)\left(\hat{P}^{(1+)}_{\vec{a}} \otimes \hat{P}^{(2+)}_{\vec{b}}\right)\right)}{4} - \frac{\mathbf{Tr}\left(\left(\sigma^{(1)}_\eta \otimes \sigma^{(2)}_\eta\right)\left(\hat{P}^{(1+)}_{\vec{a}} \otimes \hat{P}^{(2+)}_{\vec{b}}\right)\right)}{4} = \\
= & \frac{\mathbf{Tr}\left(\left(\hat{1}^{(1)}\,\hat{P}^{(1+)}_{\vec{a}}\right) \otimes \left(\hat{1}^{(2)}\,\hat{P}^{(2+)}_{\vec{b}}\right)\right)}{4} - \frac{\mathbf{Tr}\left(\left(\sigma^{(1)}_\eta\,\hat{P}^{(1+)}_{\vec{a}}\right) \otimes \left(\sigma^{(2)}_\eta\,\hat{P}^{(2+)}_{\vec{b}}\right)\right)}{4} = \\
= & \frac{1}{4}\,\mathbf{Tr}\,\hat{P}^{(1+)}_{\vec{a}}\,\mathbf{Tr}\,\hat{P}^{(2+)}_{\vec{b}} - \frac{1}{4}\,\mathbf{Tr}\left(\sigma^{(1)}_\eta \hat{1}^{(1)}\right)\mathbf{Tr}\left(\sigma^{(2)}_\eta \hat{1}^{(2)}\right) - \\
- & \frac{1}{16} a_\alpha b_\beta \mathbf{Tr}\left(\sigma^{(1)}_\eta \sigma^{(1)}_\alpha\right)\mathbf{Tr}\left(\sigma^{(2)}_\eta \sigma^{(2)}_\beta\right) = \frac{1}{4} - 0 - \frac{1}{16}\,a_\alpha\,b_\beta\,2\,\delta_{\alpha\eta}\,2\,\delta_{\beta\eta} = \\
= & \frac{1}{4}\left(1 - \left(\vec{a}\,\vec{b}\right)\right).
\end{aligned}
$$

Общий вид матрицы плотности двух спинов $s = 1/2$

Найдем общий вид матрицы плотности двух спинов $s = 1/2$.

Как было показано в параграфе "Нерелятивистская матрица плотности спина $s = 1/2$", матрица плотности одного спина $s = 1/2$ является матрицей 2×2 и может быть разложена по матричному базису, состоящему из единичной матрицы $\hat{1}$ размерности 2×2 и трех матриц Паули σ_i. Поэтому матричный базис в пространстве $\mathcal{H}$ двух спинов $s = 1/2$, которое является прямым произведением пространств $\mathcal{H}^{(1)}$ и $\mathcal{H}^{(2)}$ каждого из спинов, должен иметь вид (см. параграф "Явный вид матрицы плотности состояния $|\Psi^-\rangle$"):

$$\hat{1}^{(1)} \otimes \hat{1}^{(2)}, \quad \hat{1}^{(1)} \otimes \sigma_i^{(2)}, \quad \sigma_j^{(1)} \otimes \hat{1}^{(2)}, \quad \sigma_j^{(1)} \otimes \sigma_i^{(2)}.$$

Разложение матрицы плотности $\hat{\rho}$ двух спинов $s = 1/2$ по этому базису дает

$$\hat{\rho} = \alpha\, \hat{1}^{(1)} \otimes \hat{1}^{(2)} + \beta_i\, \hat{1}^{(1)} \otimes \sigma_i^{(2)} + \zeta_j\, \sigma_j^{(1)} \otimes \hat{1}^{(2)} + \eta_{ij}\, \sigma_j^{(1)} \otimes \sigma_i^{(2)},$$

где по дважды повторяющимся индексам i и j производится суммирование от 1 до 3.

По свойству а) матрицы плотности (см. параграф "Свойства матрицы плотности смешанного состояния"), коэффициенты α, β_i, ζ_j и η_{ij} являются действительными числами.

Воспользуемся правилом вычисления следов для прямого произведения $\mathbf{Tr}\left(\hat{A}\otimes\hat{B}\right)=\mathbf{Tr}\hat{A}\cdot\mathbf{Tr}\hat{B}$ и свойством в) матрицы плотности. Тогда

$$1=\mathbf{Tr}\hat{\rho}=\alpha\left(\mathbf{Tr}\,\hat{1}^{(1)}\right)\cdot\left(\mathbf{Tr}\,1^{(2)}\right)=4\,\alpha\quad\Longrightarrow\quad\alpha=\frac{1}{4}.$$

Вспомним, что частичный след матрицы $\hat{\rho}$ по переменным одной из подсистем должен воспроизводить матрицу плотности спина $s=1/2$ другой подсистемы. Для матрицы плотности подсистемы "1" имеем:

$$\mathbf{Tr}_{(2)}\,\hat{\rho}=\hat{\rho}^{(1)}=\frac{1}{2}\left(\hat{1}^{(1)}+p_j^{(1)}\sigma_j^{(1)}\right),\quad\text{где}\quad p_j^{(1)}=\left\langle\,\sigma_j^{(1)}\,\right\rangle_{\rho^{(1)}}=\left\langle\,\sigma_j^{(1)}\,\right\rangle_{\rho}.$$

Явные вычисления дают

$$\begin{aligned}\mathbf{Tr}_{(2)}\,\hat{\rho}&=\frac{1}{4}\,\hat{1}^{(1)}\,\mathbf{Tr}\hat{1}^{(2)}+\beta_i\,\hat{1}^{(1)}\,\mathbf{Tr}\sigma_i^{(2)}+\zeta_j\,\sigma_j^{(1)}\,\mathbf{Tr}\hat{1}^{(2)}+\eta_{ij}\,\sigma_j^{(1)}\,\mathbf{Tr}\sigma_i^{(2)}=\\&=\frac{1}{2}\,\hat{1}^{(1)}+2\,\zeta_j\,\sigma_j^{(1)}\quad\Longrightarrow\quad\zeta_j=\frac{1}{4}\,p_j^{(1)}=\frac{1}{4}\left\langle\,\sigma_j^{(1)}\,\right\rangle_{\rho}.\end{aligned}$$

Вычисляя $\mathbf{Tr}_{(1)}\,\hat{\rho}$ находим, что $\beta_i=\frac{1}{4}\,p_i^{(2)}=\frac{1}{4}\left\langle\,\sigma_i^{(2)}\,\right\rangle_{\rho}$.

Таким образом

$$\hat{\rho} = \frac{1}{4}\hat{1}^{(1)} \otimes \hat{1}^{(2)} + \frac{1}{4}\,\hat{1}^{(1)} \otimes\, p_i^{(2)}\sigma_i^{(2)} + \frac{1}{4}\,p_j^{(1)}\,\sigma_j^{(1)} \otimes \hat{1}^{(2)} + \eta_{ij}\,\sigma_j^{(1)} \otimes \sigma_i^{(2)}.$$

Найдем тензор η_{ij}. По свойству д) матрицы плотности имеем

$$\left\langle \sigma_\omega^{(1)} \otimes \sigma_\delta^{(2)} \right\rangle_\rho = \mathbf{Tr}\left(\left(\sigma_\omega^{(1)} \otimes \sigma_\delta^{(2)}\right)\hat{\rho}\right) = \eta_{ij}\,\mathbf{Tr}\left(\sigma_\omega^{(1)}\sigma_j^{(1)}\right)\mathbf{Tr}\left(\sigma_\delta^{(2)}\sigma_i^{(2)}\right) =$$

$$= \eta_{ij}\,2\,\delta_{\omega\,j}\,2\,\delta_{\delta\,i} = 4\,\eta_{\delta\,\omega} \quad \Longrightarrow \quad \eta_{ij} = \frac{1}{4}\left\langle \sigma_j^{(1)} \otimes \sigma_i^{(2)} \right\rangle_\rho.$$

На последнем шаге перепишем матрицу плотности $\hat{\rho}$ в виде

$$\hat{\rho} = \frac{1}{4}\left[\hat{1}^{(1)} + \left(\vec{p}^{(1)}\,\vec{\sigma}^{(1)}\right)\right] \otimes \left[\hat{1}^{(2)} + \left(\vec{p}^{(2)}\,\vec{\sigma}^{(2)}\right)\right] + \frac{1}{4}\,C_{ji}\,\sigma_j^{(1)} \otimes \sigma_i^{(2)},$$

где введен новый тензор $C_{ji} = 4\left(\eta_{ij} - \frac{1}{4}p_j^{(1)}p_i^{(2)}\right)$. Учитывая выражения для $p_j^{(1)}$, $p_i^{(2)}$ и η_{ij}, легко получаем следующую формулу:

$$C_{ji} = \left\langle \sigma_j^{(1)} \otimes \sigma_i^{(2)} \right\rangle_\rho - \left\langle \vec{\sigma}_j^{(1)} \right\rangle_\rho \left\langle \vec{\sigma}_i^{(2)} \right\rangle_\rho.$$

Этим решается поставленная задача.

Зачем нужны критерии (условия) сепарабельности?

На практике (даже если матрица плотности известна явно) в подавляющем большинстве случаев очень трудно понять, отвечает ли она запутанному или сепарабельному состоянию. Простой пример. Возьмем матрицу плотности

$$\hat{\rho} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Легко заметить, что она может быть записана в виде суммы матриц плотности двух запутанных состояний

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}\left(\hat{\rho}^{(\Psi^-)} + \hat{\rho}^{(\Phi^-)}\right).$$

Из этого хочется сделать ОШИБОЧНЫЙ (!!!) вывод, что $\hat{\rho}$ тоже матрица плотности некоторого запутанного состояния.

Чтобы опровергнуть подобное утверждение, необходимо перейти к новым базисным состояниям

$$\left|A^{(\alpha)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|+^{(\alpha)}\right\rangle + \left|-^{(\alpha)}\right\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},$$

$$\left|B^{(\alpha)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|+^{(\alpha)}\right\rangle - \left|-^{(\alpha)}\right\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix},$$

где $\alpha = \{1, 2\}$ — индекс подсистем. Матрицы плотности

$$\hat{\rho}^{\left(A^{(\alpha)}\right)} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & 1\end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \hat{\rho}^{\left(B^{(\alpha)}\right)} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & -1\\-1 & 1\end{pmatrix}.$$

Из них можно составить прямые произведения

$$\hat{\rho}^{\left(A^{(1)}\right)} \otimes \hat{\rho}^{\left(B^{(2)}\right)} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix}1 & -1 & 1 & -1\\-1 & 1 & -1 & 1\\1 & -1 & 1 & -1\\-1 & 1 & -1 & 1\end{pmatrix}$$

и

$$\hat{\rho}^{\left(B^{(1)}\right)} \otimes \hat{\rho}^{\left(A^{(2)}\right)} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix}1 & 1 & -1 & -1\\1 & 1 & -1 & -1\\-1 & -1 & 1 & 1\\-1 & -1 & 1 & 1\end{pmatrix}.$$

Тогда

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}\left(\hat{\rho}^{\left(A^{(1)}\right)} \otimes \hat{\rho}^{\left(B^{(2)}\right)} + \hat{\rho}^{\left(B^{(1)}\right)} \otimes \hat{\rho}^{\left(A^{(2)}\right)}\right).$$

То есть, согласно определению сепарабельного состояния, матрица плотности $\hat{\rho}$ отвечает именно сепарабельному состоянию!

Открою секрет: в рассмотренном примере ответ был известен заранее из квантовой теории вычислений. А если ничего про матрицу плотности заранее не известно? А если она большой размерности? И т. д. В этом случае имеется несколько критериев или условий сепарабельности. В курсе будут рассмотрены:

1) условие сепарабельности А.Переса (см. раздел "Необходимое условие сепарабельности А.Переса");
2) редукционное условие сепарабельности (см. раздел "Редукционное условие сепарабельности");
3) критерий сепарабельности по Беллу (см. раздел "Критерий сепарабельности по Беллу").

Все перечисленные выше условия являются только НЕОБХОДИМЫМИ, но НЕ достаточными. При их НАРУШЕНИИ состояние заведомо НЕ может быть сепарабельным, то есть является запутанным. А при выполнении состояние может быть как сепарабельным, так и запутанным.

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 все матрицы плотности $\hat{\rho}_{\ell}^{(B)}$ подсистемы "B". Тогда получим новую матрицу

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

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

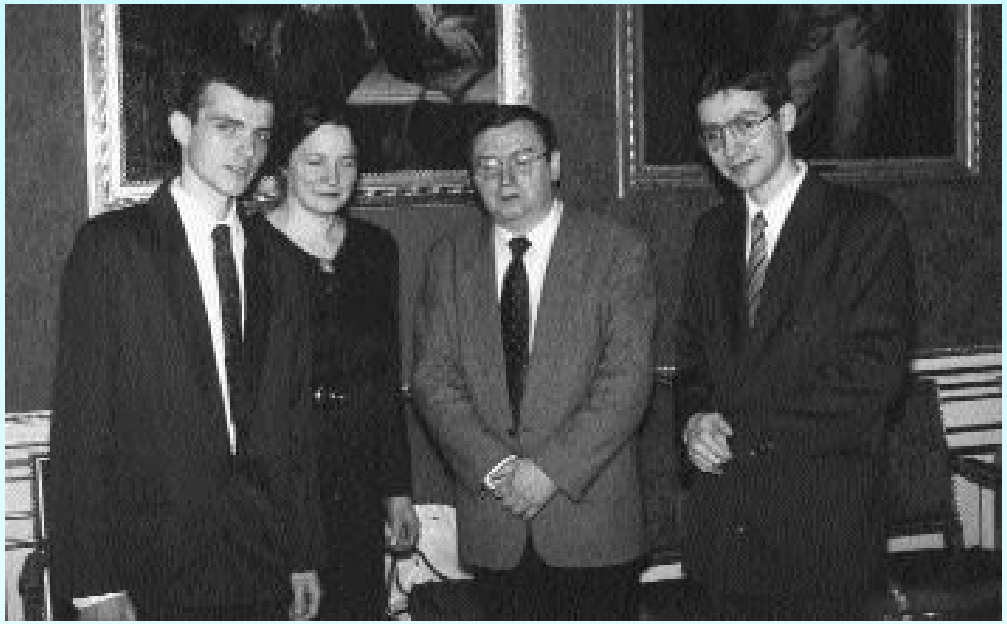
Это наблюдение позволяет сформулировать критерий сепарабельности А. Переса: если после частичного транспонирования матрица плотности $\hat{\rho}$ перешла в другую матрицу $(\hat{\rho})^{T_B}$, которая удовлетворяет всем свойствам матрицы плотности, то исходное состояние может быть сепарабельным.

Доказательство критерия фактически было дано выше. Еще раз подчеркнем, что критерий А. Переса представляет собой только необходимое условие, но НЕ достаточное. То 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 данный критерий часто 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).

Как на практике выполнять частичное транспонирование?

Для ответа на данный вопрос, например, частично транспонируем матрицу плотности $\hat{\rho}^{(\Psi^-)}$ по переменным подсистемы "2":

$$\left(\hat{\rho}^{(\Psi^-)}\right)^{T_2} = \frac{1}{4}\left[\hat{1}^{(1)} \otimes \left(\hat{1}^{(2)}\right)^T - \sigma_1^{(1)} \otimes \left(\sigma_1^{(2)}\right)^T - \sigma_2^{(1)} \otimes \left(\sigma_2^{(2)}\right)^T - \sigma_3^{(1)} \otimes \left(\sigma_3^{(2)}\right)^T\right]$$

$$= \frac{1}{4}\left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}^{(1)} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}^{(2)} - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^{(1)} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^{(2)} - \right.$$

$$\left. - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}^{(1)} \otimes \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}^{(2)} - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}^{(1)} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}^{(2)}\right] =$$

$$= \frac{1}{4}\left[\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \right.$$

$$\left. - \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\right] = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

То есть, чтобы выполнить частичное транспонирование матрицы $\hat{\rho}^{(\Psi^-)}$ размерности 4×4 по переменным подсистемы "2", необходимо провести независимое транспонирование внутри каждого блока размерности 2×2 этой матрицы. Наглядно это можно записать так. Если

$$\hat{\rho}^{(\Psi^-)} = \frac{1}{2} \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ \hline 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right),$$

то

$$\left(\hat{\rho}^{(\Psi^-)}\right)^{T_2} = \frac{1}{2} \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right).$$

Если же необходимо сделать частичное транспонирование по переменным подсистемы "1', то матрицу 4×4 нужно транспонировать блоками размерности 2×2:

$$\left(\hat{\rho}^{(\Psi^-)}\right)^{T_1} = \frac{1}{2} \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right).$$

Состояние Вернера и критерий сепарабельности Переса

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

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

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 $\hat{\rho}^{(W)}$**, используем уже знакомый базис в пространстве двух спинов** $s = 1/2$**:**

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

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

В этом базисе

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

Пользуясь рецептом параграфа "Как выполнять частичное транспонирование?" частичное транспонирование матрицы $\hat{\rho}^{(W)}$ по переменным подсистемы "B" можно независимо провести в каждом из четырех ее блоков 2×2. Такое транспонирование, очевидно, эквивалентно взаимной перестановке антидиагональных матричных элементов этих блоков. 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 $0 \leq x \leq 1$), а для матрицы $\left(\hat{\rho}^{(W)}\right)^{T_B}_{\mathbf{diag}}$ – только при $0 \leq x \leq 1/3$. Таким образом, в диапазоне

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

согласно необходимому условию сепарабельности 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

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

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.

Связь между матрицей плотности системы и матрицами плотности подсистем

В параграфе "Квантовое происхождение вероятностей W_ℓ" мы видели, что если матрица плотности всей системы находится в чистом белловском состоянии $|\, S = 0,\, S_z = 0 \,\rangle \equiv |\, \Psi^- \,\rangle$, то подсистемы "1" и "2" обе находятся в смешанных состояниях, которым соответствуют матрицы плотности $\hat{\rho}^{(i)} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hat{1}$, где $i = \{1,\, 2\}$.

Вопрос: а какие еще могут быть случаи "чистое/смешанное состояние" между системой и входящими в нее подсистемами?

Тривиальный случай: вся система находится в чистом состоянии и каждая из подсистем также находится в чистом состоянии. Пример:

$$|\, S = 1,\, S_z = +1 \,\rangle = \left|+^{(1)}\right\rangle \otimes \left|+^{(2)}\right\rangle \equiv |\, 1 \,\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Тогда

$$\hat{\rho} = |1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\0 & 0 & 0 & 0\\0 & 0 & 0 & 0\\0 & 0 & 0 & 0\end{pmatrix}.$$

В данном случае

$$\hat{\rho}^{(1)} = \mathbf{Tr}_{(2)}\,\hat{\rho} = \left|+^{(1)}\right\rangle\left\langle+^{(1)}\right| = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{pmatrix} = \left|+^{(2)}\right\rangle\left\langle+^{(2)}\right| = \hat{\rho}^{(2)}.$$

Следующий случай: вся система находится в смешанном состоянии и каждая из подсистем также находится в смешанном состоянии. Например:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{4}\Big(|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2| + |3\rangle\langle 3| + |4\rangle\langle 4|\Big) = \frac{1}{4}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\0 & 1 & 0 & 0\\0 & 0 & 1 & 0\\0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}.$$

В этом случае:

$$\begin{aligned}\hat{\rho}^{(1)} &= \mathbf{Tr}_{(2)}\,\hat{\rho} = \frac{1}{4}\Big(\Big|+^{(1)}\Big\rangle\Big\langle+^{(1)}\Big| + \Big|+^{(1)}\Big\rangle\Big\langle+^{(1)}\Big| + \\ &+ \Big|-^{(1)}\Big\rangle\Big\langle-^{(1)}\Big| + \Big|-^{(1)}\Big\rangle\Big\langle-^{(1)}\Big|\Big) = \\ &= \frac{1}{2}\Big(\Big|+^{(1)}\Big\rangle\Big\langle+^{(1)}\Big| + \Big|-^{(1)}\Big\rangle\Big\langle-^{(1)}\Big|\Big) = \frac{1}{2}\,\hat{1} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Аналогично

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

Наконец, система находится в смешанном состоянии, но одна из подсистем находится в чистом состоянии (заметим, что обе подсистемы в чистом состоянии находиться не могут). Пример:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}\Big(|\,1\,\rangle\langle\,1\,| + |\,2\,\rangle\langle\,2\,|\Big) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\end{pmatrix}.$$

Матрицы плотности подсистем имеют вид:

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

Часть 3

ФОРМУЛА ФОН НЕЙМАНА И ЕЕ СЛЕДСТВИЯ

Условная матрица плотности и формула фон Неймана

Пусть квантовая система, которая описывается матрицей плотности $\hat{\rho}$, обладает некоторой наблюдаемой характеристикой A. Сопоставим этой наблюдаемой эрмитов оператор $\hat{A}$ с дискретным невырожденным спектром $\{a_n\}$ (для простоты). Хорошо известно, что собственные вектора $|\, a_n \,\rangle$ оператора $\hat{A}$ образуют ортонормированный базис.

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

Ответ: Согласно следствию из проекционного постулата М. Борна после измерения система перейдет в чистое состояние $|\, a_{n'} \,\rangle$, которому соответствует матрица плотности (условная матрица плотности) чистого состояния (так называемое правило Г. Людерса):

$$
\begin{aligned}
\hat{\rho}^{(A)}_{n'} \quad &\equiv \quad \hat{P}^{(A)}_{n'} = |\, a_{n'} \,\rangle \langle\, a_{n'} \,| = \frac{w_{n'}}{w_{n'}} \,|\, a_{n'} \,\rangle \langle\, a_{n'} \,| = \frac{\rho_{n'\,n'}}{w_{n'}} \,|\, a_{n'} \,\rangle \langle\, a_{n'} \,| = \\
&= \quad \frac{1}{w_{n'}} \,|\, a_{n'} \,\rangle \, \rho_{n'\,n'} \, \langle\, a_{n'} \,| = \frac{1}{w_{n'}} \,|\, a_{n'} \,\rangle \, \langle\, a_{n'} \,|\, \hat{\rho} \,|\, a_{n'} \,\rangle \, \langle\, a_{n'} \,| = \\
&= \quad \frac{\hat{P}^{(A)}_{n'} \, \hat{\rho} \, \hat{P}^{(A)}_{n'}}{w_{n'}} = \frac{\hat{P}^{(A)}_{n'} \, \hat{\rho} \, \hat{P}^{(A)}_{n'}}{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(A)}_{n'} \, \hat{\rho}\right)} = \frac{\hat{P}^{(A)}_{n'} \, \hat{\rho} \, \hat{P}^{(A)}_{n'}}{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(A)}_{n'} \, \hat{\rho} \, \hat{P}^{(A)}_{n'}\right)}.
\end{aligned}
$$

В процессе вычислений мы воспользовались результатом параграфов "Связь fidelity и вероятности измерения значения $a_{n'}$", "Физический смысл элементов матрицы плотности", свойством проектора $\hat{P}^2 = \hat{P}$ и цикличностью следа для записи вероятности измерения значения $a_{n'}$ в нескольких эквивалентных формах:

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

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

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

носит название **формулы фон Неймана**. Обобщение формулы фон Неймана для измерений, разделенных некоторым промежутком времени, и для неортогональных состояний будет дано в параграфе "Обобщенные правило Людерса и формула 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 Братцемиванушкой. Хотя обычно их называют Алисой и Бобом. Пусть Аленушка измерила значение $a_{n'}$. Тогда матрица плотности квантовой системы станет $\hat{\rho}^{(A)}_{n'}$. Далее за приборы встает Братециванушка. 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:

$$w(a_{k'} \mid a_{n'}) = \mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(A)}_{k'}\hat{\rho}^{(A)}_{n'}\right) = \frac{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(A)}_{k'}\hat{P}^{(A)}_{n'}\,\hat{\rho}\,\hat{P}^{(A)}_{n'}\right)}{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(A)}_{n'}\,\hat{\rho}\right)}.$$

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

$$w(a_{k'} \mid a_{n'}) = \delta_{k'\,n'} \frac{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(A)}_{n'}\,\hat{\rho}\,\hat{P}^{(A)}_{n'}\right)}{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(A)}_{n'}\,\hat{\rho}\right)} = \delta_{k'\,n'} \frac{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(A)}_{n'}\,\hat{\rho}\right)}{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(A)}_{n'}\,\hat{\rho}\right)} = \delta_{k'\,n'}.$$

Этот тривиальный математический факт часто облекают в форму парадоксального суждения.

Введем очень важное определение: переход от матрицы плотности $\hat{\rho}$ к матрице плотности $\hat{\rho}^{(A)}_{n'}$ 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, обрабатывающим сигналы макроприбора? А, может быть, в мозгу у наблюдателя, который воспринимает и интерпретирует данные компьютера?

В последнем случае человек становится одним из главнейших 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 $\hat{\rho}^{(A)}_{n'}$. 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 (втайне 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!

Условная и совместная вероятности в классической и квантовой теориях. Теорема Нельсона

Вспомним, что в классической (колмогоровской) теории вероятностей условная вероятность $w(b_{k'} \mid a_{n'})$ ОПРЕДЕЛЯЕТСЯ при помощи понятия совместной вероятности $w(b_{k'}, a_{n'})$ следующим образом:

$$w(b_{k'} \mid a_{n'}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{w(b_{k'}, a_{n'})}{w(a_{n'})},$$

где $w(a_{n'}) \neq 0$ — вероятность измерения значения $a_{n'}$ спектра классической наблюдаемой A.

Сравним это классическое определение условной вероятности с сугубо квантовой формулой фон Неймана. Как было показано в параграфе "Связь fidelity и вероятности измерения значения $a_{n'}$", вероятность измерения значения $a_{n'}$ спектра наблюдаемой A равна

$$w(a_{n'}) \equiv \mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(A)}_{n'}\,\hat{\rho}\right).$$

Тогда совместной вероятности хотелось бы сопоставить следующее выражение:

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

Вопрос: всегда ли такое сопоставление является возможным?

Ответ: нет, не всегда. Совместная вероятность $w(b_{k'}, a_{n'})$ в квантовом случае корректно определена тогда и только тогда, когда $\left[\hat{A},\ \hat{B}\right] = 0$, то есть когда наблюдаемые A и B **совместно измеримы** (это так называемая **теорема Нельсона**, **E. Nelson, "Dinamical Theories of Brownian Motion", "PUP", Princeton, 1967**).

Действительно, если совместная вероятность $w(b_{k'}, a_{n'})$ правильно определена, то должно выполняться условие симметрии

$$w(b_{k'}, a_{n'}) \;=\; w(a_{n'}, b_{k'}),$$

из которого немедленно следует равенство

$$\mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(B)}_{k'}\hat{P}^{(A)}_{n'}\,\hat{\rho}\,\hat{P}^{(A)}_{n'}\hat{P}^{(B)}_{k'}\right) \;=\; \mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(A)}_{n'}\hat{P}^{(B)}_{k'}\,\hat{\rho}\,\hat{P}^{(B)}_{k'}\hat{P}^{(A)}_{n'}\right).$$

Но это равенство справедливо только в том случае, когда для любых индексов n' и k' выполняется условие $\left[\hat{P}^{(A)}_{n'}, \hat{P}^{(B)}_{k'}\right] = 0$. Иными словами, только если $\langle\, a_{n'} \mid\ b_{k'}\,\rangle = \delta_{n'k'}$. Из последнего равенства очевидно, что любые вектора $|\, a_{k'}\,\rangle$ и $|\, b_{k'}\,\rangle$ должны принадлежать к общему базису, то есть к общей системе собственных векторов операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$. Таким образом, операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ имеют общую систему собственных векторов, то есть коммутируют. В одну сторону утверждение доказано. В обратную сторону доказательство очевидно.

Итог: **в классической теории** условная и совместная вероятности измерения различных характеристик физической системы всегда являются хорошо определенными величинами, которые лежат в интервале $[0, 1]$.

В рамках нерелятивистской **квантовой механики** условная вероятность всегда хорошо определена и изменяется в пределах $[0, 1]$, в то время как совместная вероятность может не существовать, быть отрицательной или превосходить единицу.

Совместная вероятность в квантовом подходе хорошо определена только тогда, когда операторы входящих в эту вероятность наблюдаемых величин коммутируют друг с другом, то есть когда все наблюдаемые можно одновременно измерить.

Пользуясь различным поведением совместных вероятностей в классической и квантовой парадигмах можно предложить тесты по проверке несводимости квантовой теории к "разумной" классической теории. Некоторые из таких тестов будут рассмотрены в главах **"Неравенства Белла и корреляции в квантовой теории"** и **"Принцип макроскопического реализма и неравенства Леггетта — Гарга"**.

Сходства и различия условной вероятности в классическом и квантовом случаях

Пусть имеется макроскопический прибор, который измеряет вероятность появления не одного значения $x_{\ell'}$ спектра наблюдаемой X, а сразу нескольких различных значений $x_{\ell'}$, ..., $x_{\ell''}$. Вероятность такого измерения будем обозначать как

$$w\left(x_{\ell'} \oplus \ldots \oplus x_{\ell''};\ \ldots\right) \equiv w\left(\bigcup_{\ell} x_{\ell};\ \ldots\right).$$

Символ $\oplus$ введен для того, чтобы подчеркнуть, что сами значения спектра при этом НЕ суммируются друг с другом. В теории множеств говорят об объединении событий измерения значений спектра $x_{\ell'}$, ..., $x_{\ell''}$ и используют для этого знак операции объединения $\bigcup\limits_{\ell}$. Естественно предположить, что события $x_{\ell'}$ и $x_{\ell''}$ являются НЕЗАВИСИМЫМИ, то есть $x_{\ell'} \cap x_{\ell''} = \varnothing$.

Разберемся, как ведет себя классическая условная вероятность относительно операций $\bigcup\limits_{k} b_k$ и $\bigcup\limits_{n} a_n$ для наблюдаемых A и B.

Для классической условной вероятности $w\left(\bigcup\limits_k b_k \,\middle|\, a_{n'}\right)$ имеем:

$$w\left(\bigcup_k b_k \,\middle|\, a_{n'}\right) = \frac{w\left(\bigcup\limits_k b_k,\ a_{n'}\right)}{w\left(a_{n'}\right)} = \frac{w\left(\bigcup\limits_k (b_k,\ a_{n'})\right)}{w\left(a_{n'}\right)} =$$

$$= \frac{\sum\limits_k w\left(b_k,\ a_{n'}\right)}{w\left(a_{n'}\right)} = \sum_k \frac{w\left(b_k,\ a_{n'}\right)}{w\left(a_{n'}\right)} = \sum_k w\left(b_k \mid a_{n'}\right).$$

Таким образом классическая условная вероятность для независимых событий аддитивна по второму аргументу.

Исследуем поведение вероятности по первому аргументу. Снова предполагаем независимость событий, т. е. $a_{n'} \cap a_{n''} = \varnothing$. Тогда:

$$w\left(b_{k'} \,\middle|\, \bigcup_n a_n\right) = \frac{w\left(b_{k'},\ \bigcup\limits_n a_n\right)}{w\left(\bigcup\limits_n a_n\right)} = \frac{w\left(\bigcup\limits_n (b_{k'},\ a_n)\right)}{w\left(\bigcup\limits_n a_n\right)} =$$

$$= \frac{\sum\limits_n w\left(b_{k'},\ a_n\right)}{w\left(\bigcup\limits_{\tilde{n}} a_{\tilde{n}}\right)} = \sum_n \frac{w\left(a_n\right)}{w\left(\bigcup\limits_{\tilde{n}} a_{\tilde{n}}\right)} \frac{w\left(b_{k'},\ a_n\right)}{w\left(a_n\right)} = \sum_n \frac{w\left(a_n\right)}{w\left(\bigcup\limits_{\tilde{n}} a_{\tilde{n}}\right)} w\left(b_{k'} \mid a_n\right).$$

Следовательно, классическая условная вероятность для независимых событий аддитивна и по первому аргументу с весовыми множителями $w\left(a_n\right)/w\left(\bigcup\limits_{\tilde{n}} a_{\tilde{n}}\right)$.

Теперь исследуем поведение квантовой условной вероятности фон Неймана для двух аналогичных случаев.

Прежде всего необходимо определить проектор для объединенного измерения $\hat{P}^{(B)}\left(\bigcup\limits_{k} b_k\right)$. Под таким измерением мы будем понимать ситуацию, когда макроприбор с равной вероятностью (обобщение на неравные вероятности тривиально) может измерить любое значение $b_{k'}$ из набора $\{b_k\}$, но нам НЕ известно, какое состояние было при этом измерено. Например, подобная ситуация возникает тогда, когда некоторый уровень энергии системы вырожден по квантовому числу b_k, а макроприбор имеет ограниченную чувствительность.

В теории операторной меры для независимых событий, удовлетворяющих условию $b_{k'} \cap b_{k''} = \varnothing$, принимается интуитивно ясное определение проектора на множество как суммы проекторов на каждый элемент данного множества, то есть

$$\hat{P}^{(B)}\left(\bigcup_k b_k\right) \equiv \sum_k \hat{P}_k^{(B)}, \quad \textbf{если} \quad b_{k'} \cap b_{k''} = \varnothing.$$

Тогда при помощи формулы фон Неймана для второго аргумента условной вероятности получаем:

$$w\left(\bigcup_k b_k \,\middle|\, a_{n'}\right) = \frac{\mathbf{Tr}\left(\left(\sum_k \hat{P}_k^{(B)}\right)\hat{P}_{n'}^{(A)}\hat{\rho}\hat{P}_{n'}^{(A)}\right)}{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_{n'}^{(A)}\hat{\rho}\right)} = \frac{\sum_k \mathbf{Tr}\left(\hat{P}_k^{(B)}\hat{P}_{n'}^{(A)}\hat{\rho}\hat{P}_{n'}^{(A)}\right)}{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_{n'}^{(A)}\hat{\rho}\right)} =$$

$$= \sum_k \frac{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_k^{(B)}\hat{P}_{n'}^{(A)}\hat{\rho}\hat{P}_{n'}^{(A)}\right)}{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_{n'}^{(A)}\hat{\rho}\right)} = \sum_k w\left(b_k \,\middle|\, a_{n'}\right).$$

Таким образом, в силу линейности операции взятия следа квантовая условная вероятность аддитивна по второму аргументу, точно так же как и классическая условная вероятность.

Рассмотрим, как ведет себя формула фон Неймана по первому аргументу.

$$w\left(b_{k'} \,\middle|\, \bigcup_n a_n\right) = \frac{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_{k'}^{(B)}\left(\sum_n \hat{P}_n^{(A)}\right)\hat{\rho}\left(\sum_n \hat{P}_n^{(A)}\right)\right)}{w\left(\bigcup_n a_n\right)},$$

где $w\left(\bigcup_n a_n\right) = \mathbf{Tr}\left(\left(\sum_n \hat{P}_n^{(A)}\right)\hat{\rho}\left(\sum_n \hat{P}_n^{(A)}\right)\right)$. Выражение для вероятности $w\left(b_{k'}\,\middle|\,\bigcup_n a_n\right)$ содержит как слагаемые вида

$$\frac{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_{k'}^{(B)}\,P_{n'}^{(A)}\,\hat{\rho}\,P_{n'}^{(A)}\right)}{w\left(\bigcup_n a_n\right)} = \frac{w(a_{n'})}{w\left(\bigcup_n a_n\right)}\,w(b_{k'}\mid a_{n'}),$$

которые совпадают со слагаемыми, входящими в выражение для классической условной вероятности, так и интерференционные слагаемые

$$\frac{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_{k'}^{(B)}\,P_{n'}^{(A)}\,\hat{\rho}\,P_{n''}^{(A)}\right)}{w\left(\bigcup_n a_n\right)}, \quad \text{где} \quad n' \neq n''.$$

Поэтому в квантовом случае

$$w\left(b_{k'}\,\middle|\,\bigcup_n a_n\right) \neq \sum_n \frac{w\left(a_n\right)}{w\left(\bigcup_{\tilde{n}} a_{\tilde{n}}\right)}\,w\left(b_{k'}\mid a_n\right).$$

Таким образом квантовая условная вероятность **НЕ аддитивна по первому аргументу**. В этом заключается ее существенное **отличие от классической** условной вероятности.

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 $a_{n'}$ из спектра $\{a_n\}$ этой наблюдаемой, 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

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

Вопрос: как обобщить проекционный постулат Борна на смешанные состояния?

Ответ: сформулируем обобщение постулата М. Борна следующим образом (**проекционный постулат Дирака-фон Неймана**):

Постулат N4': Пусть **ДО** измерения микросистема находилась в смешанном состоянии $\hat{\rho}$. Если измерение наблюдаемой A дает с равной вероятностью любое значение $a_{k'}$ из субнабора собственных значений $\{a_k\} \subset \{a_n\}$, то следует полагать, что сразу после измерения квантовая система перешла в состояние (**правило Людерса**)

$$\hat{\rho}' = \frac{\left(\sum_k \hat{P}_k^{(A)}\right) \hat{\rho} \left(\sum_k \hat{P}_k^{(A)}\right)}{\mathbf{Tr}\left(\left(\sum_k \hat{P}_k^{(A)}\right) \hat{\rho}\right)},$$

где $\hat{P}_k^{(A)}$ – проектор на собственный вектор $|\, a_k \,\rangle$ оператора $\hat{A}$, отвечающий одному из собственных значений a_k.
Вероятность измерить значение $a_{n'}$ в состоянии $\hat{\rho}$ задается при помощи **"fidelity"**:

$$w_{n'} \equiv w(a_{n'} \,|\, \rho) = \mathbf{Tr}\left(\hat{P}_{n'}^{(A)} \hat{\rho}\right).$$

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

Селективные и неселективные измерения

Измерение, которое описывается при помощи правила Людерса или проекционного постулата М. Борна, называется селективным измерением. В подобном измерении производится отбор (селекция) конечного состояния по измеренному значению $a_{n'}$ спектра наблюдаемой A.

Часто, особенно для открытых квантовых систем, реализуется иной алгоритм отбора. У ансамбля одинаково приготовленных квантовых систем, каждая из которых находится в состоянии $\hat{\rho}$, измеряется значение наблюдаемой A. И хотя результат каждого измерения известен, по результатам измерений НЕ производится абсолютно никакого отбора получившихся конечных состояний. Такое измерение называется неселективным.

Найдем матрицу плотности $\hat{\rho}'$ квантового ансамбля после проведения неселективного измерения:

$$\hat{\rho}' = \sum_n w_n \, \hat{\rho}_n^{(A)} = \sum_n w_n \, \frac{\hat{P}_n^{(A)} \, \hat{\rho} \, \hat{P}_n^{(A)}}{w_n} = \sum_n \hat{P}_n^{(A)} \, \hat{\rho} \, \hat{P}_n^{(A)}.$$

Формула для полной вероятности в классической теории вероятностей и квантовая теория

Заметим, что формула для матрицы плотности после неселективного измерения противоречит формуле для полной вероятности в классической теории вероятностей. Действительно, наблюдения значения a_n спектра наблюдаемой A образуют полный набор попарно независимых событий. Тогда в классической теории вероятности справедлива формула

$$w(b) = \sum_n w(b \,|\, a_n)\, w(a_n).$$

Что будет, если в эту формулу подставить выражения для квантовых вероятностей? В принятых нами обозначениях $w(a_n) = w_n$, $w(b) = \mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(B)}\,\hat{\rho}\right)$ и

$$w(b \,|\, a_n) = \mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(B)}\,\hat{\rho}_n^{(A)}\right) = \frac{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(B)}\,\hat{P}_n^{(A)}\,\hat{\rho}\,\hat{P}_n^{(A)}\right)}{w_n}.$$

Это приводит к соотношению

$$\mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(B)}\,\hat{\rho}\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(B)} \sum_n \left(\hat{P}_n^{(A)}\,\hat{\rho}\,\hat{P}_n^{(A)}\right)\right).$$

Из него следует формула

$$\hat{\rho} = \sum_n w_n \, \hat{\rho}_n^{(A)} = \sum_n \hat{P}_n^{(A)} \, \hat{\rho} \, \hat{P}_n^{(A)}.$$

Однако в квантовой теории последнее равенство справедливо тогда и только тогда, когда для любого n выполнено: $\left[\hat{\rho},\, \hat{P}_n^{(A)}\right] = 0$.

Это, в свою очередь, ведет к выполнению условия $\left[\hat{\rho},\, \hat{A}\right] = 0$.

Таким образом, предположив справедливость формулы для полной вероятности, мы получили, что в процессе измерения некоторой наблюдаемой состояние физической системы не меняется. Подобное поведение характерно для классических, а не для квантовых систем. Данный пример лишний раз демонстрирует генетическую связь колмогоровской теории вероятностей с классической физикой и непригодность применения данной теории в квантовом случае.

Именно по этой причине о квантовой механике часто говорят как об одном из характерных примеров неколмогоровских теорий вероятности. Но с этим согласны не все.

Как быть, если макроприбор не может измерить весь спектр наблюдаемой?

Предположим, что макроприбор может измерять не любое значение a_n спектра наблюдаемой A, а только некоторое подмножество значений $\{a_i\}$ из полного спектра $\{a_n\}$. Вопрос: Как в этом случае выглядит формула для вероятности $w_{i'}$ измерения значения $a_{i'} \in \{a_i\}$?

Прежде всего очевидно, что $w_{i'} \neq w(a_{i'} \mid \rho) = \mathbf{Tr}\left(\hat{P}_{i'}^{(A)}\,\hat{\rho}\right)$. Немного поразмыслив можно понять, что

$$w_{i'} = w\left(a_{i'} \,\middle|\, \bigcup_i a_i \,\middle|\, \rho\right) = \frac{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_{i'}^{(A)}\left(\sum_i \hat{P}_i^{(A)}\right)\hat{\rho}\left(\sum_i \hat{P}_i^{(A)}\right)\right)}{\mathbf{Tr}\left(\left(\sum_i \hat{P}_i^{(A)}\right)\hat{\rho}\left(\sum_i \hat{P}_i^{(A)}\right)\right)}.$$

Используя свойство ортогональности проекторов, немедленно получаем

$$w_{i'} = \frac{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_{i'}^{(A)}\,\hat{\rho}\right)}{\sum_i \mathbf{Tr}\left(\hat{P}_i^{(A)}\,\hat{\rho}\right)}.$$

Заметим, что данную формулу также можно найти из колмогоровской теории вероятностей.

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:

$$\langle A \rangle_\rho = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{A}\right).$$

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, $\hat{\rho}^2_{Q_\ell} = \hat{\rho}_{Q_\ell}$.

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 сепарабельном виде:

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

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

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

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

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

и аналогично

$$\hat{\rho}_{Q_\ell}\hat{\rho}_{\ell'}\hat{\rho}_{Q_\ell} = \delta_{\ell\,\ell'}\hat{\rho}_\ell \;\;\Rightarrow\;\; \hat{\rho}_{Q_\ell}\hat{\rho}^{(out)}\hat{\rho}_{Q_\ell} = W_\ell\,\hat{\rho}_\ell.$$

Из приведенных выше правил имеются простые следствия:

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

и

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

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

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

А вероятность макроприбору находиться в состоянии D_ℓ есть:

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

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 механизма такого запутывания.

Нелокальность нерелятивистской квантовой механики на микроскопическом уровне

В нерелятивистской квантовой механике (НКМ) понятия локальности и нелокальности возникают в двух разных случаях: во-первых, когда необходимо описать изменения состояния микросистем при их взаимодействии с макроприборами (локальность/нелокальность на мИкроуровне); во-вторых, когда интересуются изменениями состояния макроприборов, производящих измерения (локальность/нелокальность на мАкроуровне).

НЕлокальность НКМ НА МИКРОУРОВНЕ гарантирована математическим формализмом теории, который устроен так, что любое измеНение в подсистеме A приводит к мгновенному изменению в подсистеме B, если эти подсистемы первоначально 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

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

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 Неймана матрица плотности подсистемы A будет иметь вид:

$$\hat{\rho}^{(A)} = \mathbf{Tr}_B \left(\frac{\left(\hat{1}^{(A)} \otimes \hat{P}_+^{(B)}\right) \hat{\rho} \left(\hat{1}^{(A)} \otimes \hat{P}_+^{(B)}\right)}{\mathbf{Tr}\left(\left(\hat{1}^{(A)} \otimes \hat{P}_+^{(B)}\right) \hat{\rho}\right)} \right) = \hat{P}_-^{(A)},$$

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:

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

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

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

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.

Локальность нерелятивистской квантовой механики на макроскопическом уровне и теорема Эберхарда

Однако мы знаем, что результат любого измеНения квантовой системы должен быть зарегистрирован макроскопическим прибором. Только при помощи измеРения микросистемы макроприбором наблюдатель может узнать о произошедшем измеНении состояния квантовой системы. Поэтому возникает естественный вопрос: распространяется ли нелокальность НКМ, которая имеет место для микросистем, на результаты измерения при помощи 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 утверждает, что никакие изменения состояния макроприбора, который связан только с измерениями в подсистеме "B", не влияют на результат измерения любых наблюдаемых, которые связаны только с подсистемой "A", если между макроприборами отсутствует классический канал обмена информацией.

Предположим, что в подсистеме "A" имеется наблюдаемая F_A с дискретным невырожденным спектром $\{f_i^{(A)}\}$ (для простоты), значения которой измеряются при помощи макроприбора D_A. Мы не интересуемся состояниями подсистемы "A" и макроприбора D_A после измерения, а только самим фактом измерения некоторого значения $f_{i'}^{(A)}$ спектра наблюдаемой F_A при помощи макроприбора D_A. Для описания подобного измерения в рамках квантовой теории можно воспользоваться POVM–элементом $\hat{E}_{i'}^{D_A}$ (см. параграф "Понятие о POVM–элементах"). Рассмотрим подсистему "B". Введем наблюдаемую G_B с дискретным невырожденным спектром $\{g_j^{(B)}\}$ и макроприбор $\tilde{D}_B$. Квантовомеханическому описанию измерения значения $g_{j'}^{(B)}$ в подсистеме "B" соответствует POVM–элемент $\hat{E}_{j'}^{\tilde{D}_B}$.

Теперь заметим, что для теоремы Эберхарда можно дать эквивалентную формулировку: НКМ запрещает нелокальные корреляции между состояниями макроприборов D_A и $\tilde{D}_B$. В терминах условных вероятностей это утверждение можно записать следующим образом:

$$\sum_j w\left(f_{i'}^{(A)}, g_j^{(B)} \middle| D_A, \tilde{D}_B\right) = w\left(f_{i'}^{(A)} \middle| D_A\right)$$

и

$$\sum_i w\left(f_i^{(A)}, g_{j'}^{(B)} \middle| D_A, \tilde{D}_B\right) = w\left(g_{j'}^{(B)} \middle| \tilde{D}_B\right).$$

В более общем контексте изучения корреляций данное условие носит название "No-signaling Condition" (NS–условия).

Особенностью NS–условий является то, что в первом из них после суммирования по j пропадает зависимость не только от результата измерения наблюдаемой G_B подсистемы "B" (что естественно и ожидаемо), но и от состояния макроприбора $\tilde{D}_B$, который производит измерения в подсистеме "B". Во втором условии в процессе суммирования по i уходит зависимость не только от значения наблюдаемой F_A после измерения, но и от состояния макроприбора D_A!

Если бы локальность на **макроуровне** была нарушена, то есть имели бы место нелокальные корреляции между состояниями макроприборов D_A и $\tilde{D}_B$, которые должны описываться условными вероятностями вида $w\left(f_{i'}^{(A)} \middle| D_A,\, \tilde{D}_B\right)$, то, изменяя, например, состояние макроприбора $\tilde{D}_B$, 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 $c \to \infty$. Более того, такой результат был бы ожидаем. Тем интереснее, что именно на **макроуровне имеет место локальность НКМ**!

Докажем теорему Эберхарда. Обозначим пространство состояний подсистемы "A" через $\mathcal{H}_A$, а пространство состояний подсистемы "B" – через $\mathcal{H}_B$. Тогда пространство состояний всей системы будет $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$. В гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$ операторы наблюдаемых F_A и G_B имеют вид $\hat{F}_A \otimes \hat{1}_B$ и $\hat{1}_A \otimes \hat{G}_B$, где $\hat{1}_A$ и $\hat{1}_B$ – единичные операторы в пространствах $\mathcal{H}_A$ и $\mathcal{H}_B$ соответственно. Легко видеть, что

$$\left[\hat{F}_A \otimes \hat{1}_B,\, \hat{1}_A \otimes \hat{G}_B\right] = 0.$$

Поэтому пару величин $f_{i'}^{(A)}$ и $g_{j'}^{(B)}$ можно измерять совместно.

POVM–элементы $\hat{E}_i^{D_A}$ и $\hat{E}_j^{\tilde{D}_B}$ в пространстве $\mathcal{H}$ также можно доопределить как $\hat{E}_i^{D_A} \otimes \hat{1}_B$ и $\hat{1}_A \otimes \hat{E}_j^{\tilde{D}_B}$. Из этих выражений следует, что

$$\left[\hat{E}_i^{D_A} \otimes \hat{1}_B,\, \hat{1}_A \otimes \hat{E}_j^{\tilde{D}_B}\right] = 0.$$

Поэтому можно говорить о существовании совместных вероятностей вида $w\left(f_{i'}^{(A)},\, g_{j'}^{(B)} \middle| D_A,\, \tilde{D}_B\right)$, которые вычисляются по формулам

$$w\left(f_{i'}^{(A)},\, g_{j'}^{(B)} \middle| D_A,\, \tilde{D}_B\right) = \mathbf{Tr}\left(\left(\hat{E}_{i'}^{D_A} \otimes \hat{E}_{j'}^{\tilde{D}_B}\right)\hat{\rho}\right).$$

Если каждое отдельное измерение наблюдаемой G_B носит случайный характер, то при измерении какого-то фиксированного значения $f_{i'}^{(A)}$ спектра наблюдаемой F_A наблюдатель в подсистеме "A" не может знать, в каком состоянии находится подсистема "B". Следовательно необходимо усреднить по всем возможным значениям $g_j^{(B)}$ спектра наблюдаемой G_B. Тогда

$$w\left(f_{i'}^{(A)}\,\middle|\,D_A,\,\tilde{D}_B\right) = \sum_j w\left(f_{i'}^{(A)},\,g_j^{(B)}\,\middle|\,D_A,\,\tilde{D}_B\right) =$$

$$= \sum_j \mathbf{Tr}\left(\left(\hat{E}_{i'}^{D_A}\otimes\hat{E}_j^{\tilde{D}_B}\right)\hat{\rho}\right) = \mathbf{Tr}\left(\left(\hat{E}_{i'}^{D_A}\otimes\left(\sum_j\hat{E}_j^{\tilde{D}_B}\right)\right)\hat{\rho}\right) =$$

$$= \mathbf{Tr}\left(\left(\hat{E}_{i'}^{D_A}\otimes\hat{1}_B\right)\hat{\rho}\right) = w\left(f_{i'}^{(A)}\,\middle|\,D_A\right),$$

где в предпоследнем равенстве мы воспользовались **неортогональным разложением единицы** для POVM–элементов подсистемы "B". Из полученной формулы видно, что $w\left(f_{i'}^{(A)}\,\middle|\,D_A,\,\tilde{D}_B\right)$ **НЕ ЗАВИСИТ** от состояния макроприбора $\tilde{D}_B$. Теорема доказана.

Таким образом, из доказательства теоремы Эберхарда следует, что локальность нерелятивистской квантовой механики на макроуровне обусловлена **принципиальной случайностью** результата каждого отдельного измерения наблюдаемой.

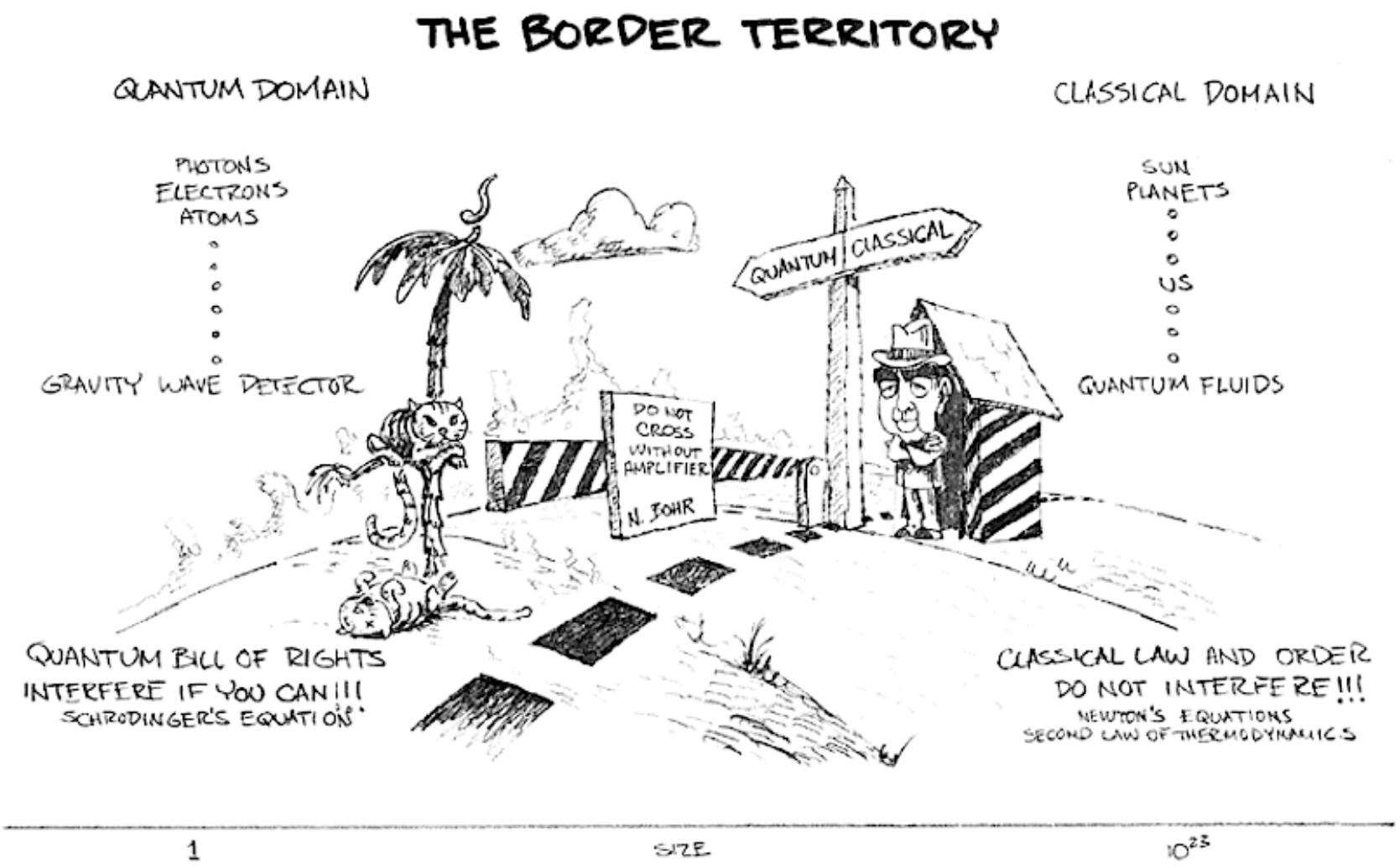
Теорема Эберхарда и Копенгагенская интерпретация квантовой механики

Одно из главных возражений против Копенгагенской интерпретации НКМ заключается в том, что не существует строгого критерия деления мира на квантовые системы и классические приборы. Один атом — явно микрочастица из квантового мира. Сотня атомов — возможно, все еще микросистема. А молекула ДНК относится к квантовому миру или уже к миру классических объектов?

И тут может помочь теорема Эберхарда. Согласно этой теореме, те физические системы, при помощи которых НЕвозможно создать запутанные состояния и связанную с ними нелокальность, должны быть отнесены к классическому миру. Те же системы, при помощи которых можно создать эффект нелокальности, обязательно должны рассматриваться как квантовые. При таком определении размеры физических систем отступают на второй план.

В параграфе "Граница между мирами" будет предложено физическое (а не формально математическое) рассуждение, почему мир можно разделить на микро (квантовый) и макро (классический). Более того, граница между этими мирами будет оценена численно! Таким образом, одно из основных возражений против Копенгагенской интерпретации НКМ практически снято.

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



Локальность НКМ на макроуровне и теорема о невозможности клонирования

Отметим, что помимо теоремы Эберхарда на страже локальности НКМ на макроуровне стоит теорема о невозможности клонирования произвольного (чистого или смешанного) состояния.

Действительно, рассмотрим следующую ситуацию. Аленушка и Братециванушка договорились и выбрали в пространстве фиксированные оси "x" и "z". Кроме того они решили, что если Аленушка в результате измерения получит ЛЮБУЮ проекцию спина фермиона $s_z^{(A)}$, то это будет означать "1". Если же при измерении будет найдена ЛЮБАЯ проекция $s_x^{(A)}$, то это означает "0". То есть обеспечена потенциальная возможность использовать двоичный код или азбуку Морзе для передачи информации! Затем Братециванушка улетел к Проксиме Центавра (примем за ось "y" направление между Землей и Проксимой). Пусть на половине пути от Земли к Проксиме Центавра имеется источник частиц, который рождает два фермиона в состоянии $\left|\Psi^-\right\rangle$. Частицы разлетаются в разные стороны вдоль оси "y" с одинаковой по модулю скоростью. Пролетая мимо Братециванушка активирует источник. Таким образом, когда один из фермионов от источника прилетает на Проксиму, то соответствующий ему второй фермион достигает Земли.

Пусть Братециванушка хочет передать Аленушке информацию о своей успешной высадке в системе Проксимы Центавра. Предположим, что для этого ему надо послать Аленушке цифру "1".

Чтобы это сделать, Братециванушка измеряет спин своего фермиона вдоль оси "z". Предположим, он получил значение проекции спина $s_z^{(B)} = -1/2$. Тогда он знает, что в то же самое время Аленушка стала обладательницей фермиона с $s_z^{(A)} = +1/2$. Однако, в полном согласии с теоремой Эберхарда, Аленушка ничего не знает не только о величине самой проекции, но даже и о том, на какую ось эта проекция была сделана!

Теперь предположим, что у Аленушки имеется аппарат для клонирования неизвестного чистого состояния. Тогда она может сделать достаточное число копий своего неизвестно состояния $\left| s_?^{(A)} \right\rangle$ и разделить эти копии на две группы. Над первой группой выполняется измерение проекции спина вдоль оси "x". Для второй группы — аналогичное измерение вдоль оси "z".

Вопрос: какой результат получит Аленушка?

При измерении проекции спина на ось "x" у Аленушки с вероятностью $1/2$ будет появляться проекция $s_x^{(A)} = +1/2$ и с такой же вероятностью – проекция $s_x^{(A)} = -1/2$. Измерение же проекции спина на ось "z" всегда будет давать значение $s_z^{(A)} = +1/2$.

Зная законы квантовой механики, Аленушка без труда может заключить, что Братециванушка произвел измерение значения спина вдоль оси "z", то есть передал ей код "1", а вместе с ним и информацию о благополучной посадке, которая достигла Земли быстрее скорости света!

Таким образом, одной теоремы Эберхарда недостаточно, чтобы обеспечить локальность НКМ на макроуровне. Необходимо сочетать эту теорему с теоремой о невозможности клонирования произвольного чистого состояния.

Интересный вопрос: если не требовать от Аленушки точного клонирования, а удовлетвориться приближенным копированием (см. параграф "Оптимальное копирование чистого состояния"), то можно ли в этом случае попытаться наладить "нечеткую сверхсветовую коммуникацию", которой при соблюдении определенных правил будет вполне достаточно для передачи осмысленной информации?

Еще один интересный вопрос: Можно ли переложить процедуру клонирования на плечи Братцаиванушки?

На первый взгляд кажется, что можно. Пусть до отлета Аленушка и Братециванушка договорятся, что Братециванушка делает не одно, а миллион измерений вдоль оси "z", чтобы передать значение "1" Аленушке. Тогда Аленушка может разделить первый миллион своих событий на две группы. В одной из них она может измерить проекцию спина вдоль оси "x", а в другой – проекцию спина вдоль оси "z". И кажется, что проблема решена. Ведь в первом наборе с вероятностью $1/2$ будет появляться проекция $s_x^{(A)} = +1/2$ и с такой же вероятностью – проекция $s_x^{(A)} = -1/2$.

Но во втором наборе нас ждет сюрприз. В этом наборе проекция $s_z^{(A)} = +1/2$ будет появляться с вероятностью $1/2$. И с той же вероятностью будет возникать проекция $s_z^{(A)} = -1/2$, поскольку измерения величины проекции спина $s_z^{(B)}$ Братцемиванушкой носят случайный характер! Если Братециванушка хочет передать Аленушке определенную проекцию спина миллион раз подряд, то Братцуиванушке потребуется придумать, как обойти абсолютную случайность каждого отдельного измерения.

Приведенная в настоящем параграфе попытка перенесения квантовомеханической нелокальности на макроскопические объекты впервые была предпринята в работе Ника Герберта (N. Herbert, "FLASH – A superluminal communicator based upon a new kind of quantum measurement", Found. Phys. 12, 1171 (1982)). Но практически сразу появились два опровержения: W. K. Wootters and W. H. Zurek, "A single quantum cannot be cloned", Nature 299, 802 (1982) и D. Dieks, "Communication by EPR devices", Phys. Lett. A bf 92, 271 (1982). В этих работах доказана теорема о невозможности клонирования произвольного чистого состояния, которая легла в основу квантовой криптографии.

По информации на 2019 год проф. Н. Герберт вышел на пенсию, увлекается восточной философией и ведет блог https://quantumtantra.blogspot.com.

Локальность НКМ на макроуровне и попытка обхода теоремы о невозможности клонирования

Вернемся к совместному эксперименту Аленушки и Братцаиванушки из параграфа "Локальность НКМ на макроуровне и теорема о невозможности клонирования". Пусть снова Братециванушка измеряет проекцию своего спина вдоль оси "z" и находит значение $s_z^{(B)} = -1/2$. Тогда сразу после измерения Братцаиванушки происходит редукция состояния $\left|\psi^-\right\rangle$ к состоянию $\left|+^{(A)}\right\rangle \otimes \left|-^{(B)}\right\rangle$. То есть у Аленушки на руках мгновенно появляется состояние $\left|+^{(A)}\right\rangle$.

Проблема в том, что Аленушка не знает, какое состояние появилось у нее в результате измерения Братцаиванушки. Чтобы найти поляризацию полученного неизвестного состояния $\left|?^{(A)}\right\rangle$, Аленушке необходимо приготовить ансамбль одинаковых состояний. Однако теорема о невозможности клонирования произвольного чистого состояния запрещает подобную процедуру.

Чтобы обойти данную теорему, Аленушка предполагает действовать оператором $\hat{U}$ из параграфа "Клонирование известного состояния" на любое полученное ей неизвестное состояние $\left|?^{(A)}\right\rangle$.

Напомним, что оператор $\hat{U}$ работает следующим образом:

$$\hat{U}\Big(|\pm\rangle\otimes|0\rangle\Big) = |\pm\rangle\otimes|\pm\rangle,$$

где $|0\rangle \equiv |+_x\rangle$ – **известное** фиксированное вспомогательное состояние, которое Аленушка всегда использует при клонировании. То есть оператор $\hat{U}$ специально приспособлен для того, чтобы клонировать состояния $|\pm\rangle$.

Аленушке повезло. У нее на руках как раз оказалось состояние $\left|+^{(A)}\right\rangle$, хотя сама Аленушка и не догадывается об этом. Поэтому после применения оператора $\hat{U}$ у Аленушки появились два неразличимых состояния $|+\rangle$. Любое из них, или даже оба, можно снова подвергнуть действию оператора $\hat{U}$. И так далее. В результате Аленушка приготавливает ансамбль одинаковых состояний $|+\rangle$. При помощи этого ансамбля Аленушка может измерить среднюю проекцию спина на ось "z". Согласно правилам квантовой механики Аленушка найдет, что $\langle S_z\rangle = +1/2$. Из этого она, *на первый и очень наивный взгляд*, может заключить, что ее состояния поляризованы вдоль оси "z", а, значит, и Братециванушка тоже произвел свое измерение вдоль оси "z".

Если Братециванушка измеряет проекцию спина своей частицы и получает значение $s_z^{(B)} = +1/2$, то при помощи аналогичных рассуждений можно заключить, что Аленушка измерит $\langle S_z\rangle = -1/2$.

А что будет, если Братециванушка выполнит измерение спина своей частицы вдоль оси "x"? Для определенности предположим, что измерение дало значение $s_x^{(B)} = -1/2$. Тогда состояние $\left|\,\Psi^-\,\right\rangle$ должно коллапсировать к состоянию $\left|\,+_x^{(A)}\,\right\rangle \otimes \left|\,-_x^{(B)}\,\right\rangle$. То есть у Аленушки мгновенно появится состояние $\left|\,+_x^{(A)}\,\right\rangle$, которое с ее точки зрения выглядит как $\left|\,?^{(A)}\,\right\rangle$. К этому состоянию Аленушка применяет линейный оператор $\hat{U}$. Поскольку очевидно, что

$$\hat{U}\Big(\,|\pm\rangle_x \otimes |0\rangle\,\Big) \neq |\pm_x\rangle \otimes |\pm_x\rangle,$$

то после многократного применения оператора $\hat{U}$ Аленушка будет иметь какой–то набор состояний, явно отличающийся от ансамбля состояний $\{|+\rangle\}$. Поэтому можно ожидать, что для подобного набора $\langle\, S_z\,\rangle \neq \pm 1/2$.

Таким образом Аленушка, используя вышеуказанную процедуру, *на первый взгляд*, без дополнительной коммуникации с Братцемиванушкой по классическому каналу связи, в состоянии понять, вдоль какой оси произвел измерение своего спина Братециванушка. А это открывает потенциальную возможность создания двоичного кода, который можно передавать от одного макроскопического наблюдателя к другому *как бы* быстрее скорости света.

К сожалению, не все столь просто. Ниже будет показано, что сверхсветовой коммуникации при описанной выше процедуре не происходит.

Чтобы это понять, детально разберемся, что получается в результате выполнения операции $\hat{U}\left(\left|+_x^{(A)}\right\rangle \otimes |0\rangle\right)$? Поскольку

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

то в силу линейности оператора $\hat{U}$ можно написать:

$$\hat{U}\quad\left(\left|+_x^{(A)}\right\rangle \otimes |0\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\hat{U}\left(\left|+^{(A)}\right\rangle \otimes |0\rangle\right) + \hat{U}\left(\left|-^{(A)}\right\rangle \otimes |0\rangle\right)\right] =$$

$$= \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|+^{(1)}\right\rangle \otimes \left|+^{(2)}\right\rangle + \left|-^{(1)}\right\rangle \otimes \left|-^{(2)}\right\rangle\right) = |\Phi^+\rangle,$$

где $|\Phi^+\rangle$ – одно из состояний Белла (см. параграф "Состояния Белла (the Bell states)").

На следующем шаге применим оператор $\hat{U}$ к одной из частиц в состоянии $|\Phi^+\rangle$. Пусть для определенности это будет частица "2". Тогда

$$\left(\hat{1}^{(1)} \otimes \hat{U}^{(2)}\right)\left(|\Phi^+\rangle \otimes |0\rangle\right) =$$

$$= \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left(\hat{1}^{(1)}\left|+^{(1)}\right\rangle\right) \otimes \hat{U}\left(\left|+^{(2)}\right\rangle \otimes |0\rangle\right) +\right.$$

$$\left. + \quad \left(\hat{1}^{(1)}\left|-^{(1)}\right\rangle\right) \otimes \hat{U}\left(\left|-^{(2)}\right\rangle \otimes |0\rangle\right)\right] =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| +^{(1)} \right\rangle \otimes \left| +^{(2)} \right\rangle \otimes \left| +^{(3)} \right\rangle + \left| -^{(1)} \right\rangle \otimes \left| -^{(2)} \right\rangle \otimes \left| -^{(3)} \right\rangle \right).$$

Дальнейшее последовательное применение оператора $\hat{U}$ к одной или нескольким частицам подобной системы приведет к тому, что Аленушка станет обладательницей состояния Гринберга–Хорна–Цайлингера

$$\left| \Phi^{+}_{(n)} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| +^{(1)} \right\rangle \otimes \ldots \otimes \left| +^{(n)} \right\rangle + \left| -^{(1)} \right\rangle \otimes \ldots \otimes \left| -^{(n)} \right\rangle \right).$$

Теперь если Аленушка выполнит измерение спина ЛЮБОЙ ℓ–той частицы состояния $\left| \Phi^{+}_{(n)} \right\rangle$ вдоль оси "z" и, например, получит, что $s_z^{(\ell)} = +1/2$, то после подобного измерения состояние $\left| \Phi^{+}_{(n)} \right\rangle$ коллапсирует к состоянию $\left| +^{(1)} \right\rangle \otimes \ldots \otimes \left| +^{(n)} \right\rangle$. То есть после первого же измерения проекции спина на ось "z" Аленушка будет иметь ансамбль фермионов $\{ | + \rangle \}$. Среднее значение спина вдоль оси "z" по такому ансамблю очевидно равно $\langle S_z \rangle = +1/2$. Откуда следует, что Аленушка при помощи своего локального измерения НЕ может отличить, измерил ли Братециванушка $s_z^{(B)} = -1/2$ или $s_x^{(B)} = -1/2$. А это, увы, сводит на нет очередную попытку создания сверхсветового телеграфа.

Правило Людерса и локальность на макроуровне

Можно попытаться иначе объяснить причину, почему с помощью НКМ нельзя передать сообщение быстрее скорости света между двумя макроскопическими наблюдателями, хотя на микроуровне корреляции между двумя квантовыми подсистемами, находящимися в запутанном состоянии, происходят мгновенно?

Предположим, что во всей Вселенной имеются только два макроскопических прибора. Прибор "P" (от слова "preparation") приготовляет микросистему, а прибор "M" (от слова "measurement") измеряет значение спектра наблюдаемой A рассматриваемой микросистемы.

Пусть макроприбор "P" приготовил микросистему в состоянии $\hat{\rho}$. В самом общем случае можем написать, что

$$\hat{\rho} = \sum_{\ell} W_{\ell}(P, M)\, \hat{\rho}_{\ell},$$

где $\hat{\rho}_{\ell} = |\psi_{\ell}\rangle\langle\psi_{\ell}|$ – матрицы плотности чистых состояний. Зависимость W_{ℓ} от P означает, что прибор "P" может приготовлять микросистему в одном и том же состоянии $\hat{\rho}$ несколькими способами.

Чтобы понять, откуда берутся различные способы приготовления одного и того же квантового состояния, нужно обратиться к параграфу
"Неоднозначность разложения матрицы плотности смешанного состояния на чистые".

На что могут влиять эти способы? Конечно же, на состояние макроприбора "M" перед измерением!

В записи $W_\ell(P, M)$ также содержится утверждение, что вероятности W_ℓ зависят не только от конкретной процедуры P приготовления квантового состояния $\hat{\rho}$, но и ГИПОТЕТИЧЕСКИ они могут зависеть от процедуры измерения M. При построении квантовой механики зависимость от процедуры измерения M исключается на основании принципа причинности. То есть считается, что

$$W_\ell(P, M) = W_\ell(P).$$

Применим правило Людерса к матрице плотности $\hat{\rho}_\ell$ одного из чистых состояний $|\psi_\ell\rangle$. Тогда

$$\hat{\rho}'_{\ell\,n} = \frac{\hat{P}_n^{(A)}\,\hat{\rho}_\ell\,\hat{P}_n^{(A)}}{w_{\ell\,,n}(M)}.$$

В такой записи вероятность измерения значения a_n спектра наблюдаемой A, когда микросистема находится в состоянии $\hat{\rho}_\ell$, зависит только от процедуры измерения M, поскольку процедура приготовления P микросистемы влияет лишь на индекс ℓ, а проекционные операторы $\hat{P}_n^{(A)}$ зависят только от выбора конкретной процедуры измерения M.

Если правило Людерса согласовано, то

$$\hat{\rho}'_n \sim \hat{P}_n^{(A)}\,\hat{\rho}\,\hat{P}_n^{(A)} = \hat{P}_n^{(A)} \left\langle \sum_\ell W_\ell(P)\,\hat{\rho}_\ell \right\rangle_P \hat{P}_n^{(A)}$$

и одновременно

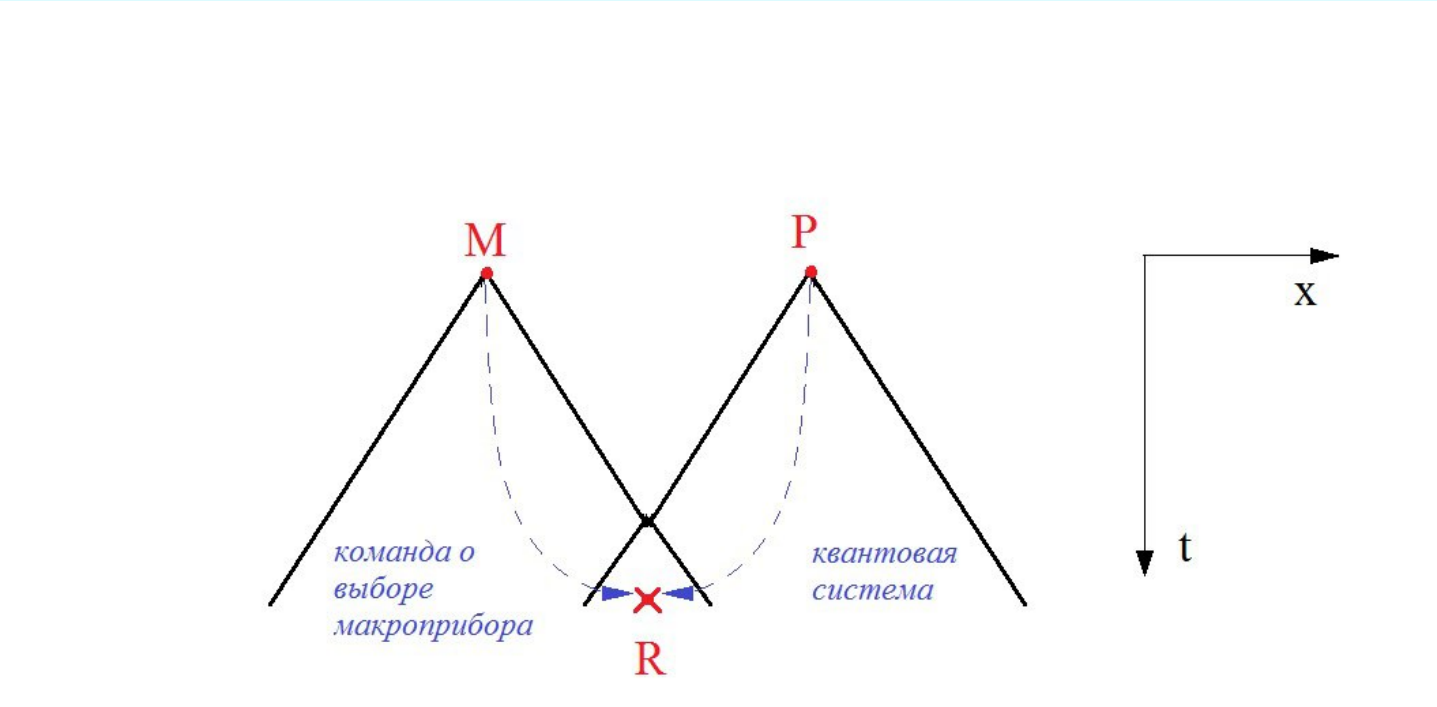
$$\hat{\rho}'_n \sim \left\langle \sum_\ell W_{\ell,\,n}(M\,|\,P)\,\hat{\rho}'_{\ell\,n} \right\rangle_P = \hat{P}_n^{(A)} \left\langle \sum_\ell \frac{W_{\ell,\,n}(M\,|\,P)}{w_{\ell,\,n}(M)}\,\hat{\rho}_\ell \right\rangle_P \hat{P}_n^{(A)},$$

где $\langle \ldots \rangle_P$ означает усреднение по всем возможным процедурам приготовления P.

Сравнение обеих формул показывает, что вероятность $W_{\ell,\,n}(M\,|\,P)$ должна быть записана в факторизованном виде

$$W_{\ell,\,n}(M\,|\,P) \;=\; W_{\ell}(P)\;w_{\ell,\,n}(M),$$

откуда следует, что приготовление и измерение – независимые процессы. Это возможно, только если макроприборы "P" и "M" существуют локально, например, как показано на рисунке, где макроприборы "P" и "M" разделены **пространственноподобным** интервалом.



На рисунке реализована чуть более сложная ситуация, чем та, которая обсуждалась выше. Макроприбор "P" посылает приготовленную микросистему исследователю "R" (от слова "researcher"), в то время как макроприбор "M" посылает для "R" команду, какую наблюдаемую в приготовленной микросистеме следует измерять. В такой конфигурации гарантированно

$$W_{\ell,\,n}(M\,|\,P) \;=\; W_\ell(P)\;w_{\ell,\,n}(M).$$

Из приведенного выше рассуждения следует, что локальность на макроуровне НЕЯВНО заложена в правило Людерса, которое, в свою очередь, является ключевым инструментом для доказательства теоремы Эберхарда и, вообще, при переходе от соотношений между наблюдаемыми в микромире к зависимостям между результатами измерений этих наблюдаемых в макромире. Поэтому можно утверждать, что в процедуру измерения НКМ заложена локальность на макроуровне.

В заключение отметим, что представленные в данном параграфе рассуждения являются дискуссионными и, возможно, нуждаются в корректировке.

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:

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

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

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

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

$$1 = e^{-i\varphi}e^{i\varphi} = |\mathcal{A}|^2\left\langle\,\psi_1\,\middle|\,\hat{P}_\varphi\,\middle|\,\psi_2\,\right\rangle\left\langle\,\psi_2\,\middle|\,\hat{P}_\varphi\,\middle|\,\psi_1\,\right\rangle =$$
$$= |\mathcal{A}|^2\left\langle\,\psi_1\,\middle|\,\hat{P}_\varphi\hat{\rho}_2\hat{P}_\varphi\,\middle|\,\psi_1\,\right\rangle = |\mathcal{A}|^2\,\mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}_1\hat{P}_\varphi\hat{\rho}_2\hat{P}_\varphi\right)$$

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

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

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 $\hat{P}_\varphi$ на сумму всех возможных проекторов $\sum\limits_k \hat{P}_{\varphi_k}$. Тогда формула для матрицы плотности суперпозиции состояний модифицируется следующим образом:

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

Если усреднение происходит по всем возможным фазам, то $\sum\limits_k \hat{P}_{\varphi_k} = \hat{1}_\varphi$. В силу ортогональности состояний $|\,\psi_1\,\rangle$ и $|\,\psi_2\,\rangle$:

$$\hat{\rho}_2\left(\sum_k \hat{P}_{\varphi_k}\right)\hat{\rho}_1 = \hat{\rho}_2\hat{1}_\varphi\hat{\rho}_1 = \hat{\rho}_2\hat{\rho}_1 = |\,\psi_2\,\rangle\langle\,\psi_2\,|\;\;\psi_1\,\rangle\langle\,\psi_1\,| = 0.$$

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.

На рисунке показан известный интернет–мем с "тарелками Шредингера". Подсчитать, сколько физических ошибок содержится в так называемом "научном объяснении" к мему? На мой взгляд, минимум три грубых.

Принцип суперпозиции на языке матрицы плотности

В книге "Принципы квантовой механики" один из создателей квантовой теории П. Дирак прямо утверждает, что именно принцип суперпозиции отличает квантовую физику от классической. С Дираком были согласны почти все физики из тех, кто создавал квантовую механику в первой половине XX в. Иное мнение по этому вопросу имел, наверное, только Дж. фон Нейман.

В разделе "Постулаты квантовой механики" дана формулировка принципа суперпозиции для чистых состояний (Постулат N3) и представлены аргументы, почему автор данного курса не разделяет мнение П. Дирака относительно роли принципа суперпозиции. В этом параграфе мы конкретизируем один из этих аргументов.

П. Дирак утверждал, что "Physical law should have mathematical beauty" ("(Фундаментальные) физические законы должны быть математически красивы"). С этим высказыванием, уверен, согласится любой физик–теоретик. Вся история физики также подтверждает справедливость утверждения Дирака. Характерным примером тут может служить история создания Специальной теории относительности.

На языке векторов состояния принцип суперпозиции полностью соответствует нашему понятию о математической красоте физических законов. Однако в терминах матриц плотности (или проекционных операторов) формулировка принципа, эквивалентного принципу суперпозиции, становится не столь простой и элегантной.

Постулат N3': **Пусть микросистема, находящая в чистом состоянии, описывается матрицей плотности $\hat{\rho} = \hat{\rho}^2$. Предположим, что в результате измерения микросистема может переходить в состояние из полного набора макроскопически различных чистых состояний. Каждому такому состоянию поставим в соответствие матрицу плотности $\hat{\rho}_i = \hat{\rho}_i^2$. Тогда матрицу $\hat{\rho}$ можно записать в виде:**

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

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

Декогеренция и запутанные состояния

Из формального определения запутанного состояния (см. параграф "Запутанные состояния") ясно, что понятие запутанности является результатом объединения концепции прямого произведения гильбертовых пространств и принципа суперпозиции.

Поскольку при построении суперпозиции состояний основную роль играет относительная фаза между различными состояниями, то процесс декогеренции разрушает запутанность. Из этого следует, что в макроскопическом мире запутанных состояний быть не должно (кроме исключений, связанных с многочастичными запутанными состояниями, единственными примерами которых являются сверхпроводимость и сверхтекучесть).

Очевидно, что для возникновения запутанности одного принципа суперпозиции недостаточно. Необходимо иметь две и более квантовые системы, которые в какой-то момент времени должны провзаимодействовать друг с другом или, по крайней мере, иметь "общую причину" (см. параграф "Как создать запутанное состояние?").

Часть 4

ЭВОЛЮЦИЯ КВАНТОВОЙ СИСТЕМЫ ВО ВРЕМЕНИ

С точки зрения квантовой механики не труд сделал из обезьяны человека, а оператор эволюции

физтехи шутят на N+1

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

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

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

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

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

Оператор эволюции обладает следующими свойствами:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Теперь мы можем найти, какому дифференциальному уравнению удовлетворяет матрица плотности

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

смешанного состояния в представлении Шредингера. Имеем:

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

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

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

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

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

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

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

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:

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

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

Теорема "о сохранении чистоты"

Теорема: квантовое уравнение Лиувилля (уравнения фон Неймана) переводит чистые состояния только в чистые, а смешанные – только в смешанные.

Докажем теорему. В параграфе "Матрица плотности смешанного состояния" был введен параметр чистоты

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

Если $\mu = 1$, то квантовое состояние чистое, если $0 \le \mu < 1$, то – смешанное. Учитывая унитарную эволюцию матрицы плотности, которая следует из квантового уравнения Лиувилля, в представлении Шредингера получаем:

$$\begin{aligned}
\mu(t) &= \mathbf{Tr}\,\hat{\rho}^{(S)\,2}(t) = \mathbf{Tr}\left(\hat{U}(t,\,t_0)\,\hat{\rho}_0^{(S)}\,\hat{U}^{\dagger}(t,\,t_0)\,\hat{U}(t,\,t_0)\,\hat{\rho}_0^{(S)}\,\hat{U}^{\dagger}(t,\,t_0)\right) = \\
&= \mathbf{Tr}\left(\hat{U}^{\dagger}(t,\,t_0)\,\hat{U}(t,\,t_0)\,\hat{\rho}_0^{(S)}\,\hat{U}^{\dagger}(t,\,t_0)\,\hat{U}(t,\,t_0)\,\hat{\rho}_0^{(S)}\right) = \\
&= \mathbf{Tr}\left(\hat{1}\,\hat{\rho}_0^{(S)}\hat{1}\,\hat{\rho}_0^{(S)}\right) = \mathbf{Tr}\,\hat{\rho}_0^{(S)\,2} = \mu(t_0).
\end{aligned}$$

Поскольку свойства следа не зависят от представления, а параметр чистоты в представлении Шредингера не меняется со временем, то параметр чистоты сохраняет свою величину вне зависимости от представления, что и доказывает теорему.

Решение квантового уравнения Лиувилля

Будем искать решение квантового уравнения Лиувилля (уравнения фон Неймана)

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

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

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

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

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

между членами ряда $\hat{\rho}^{(S,\,k)}(t)$ **и** $\hat{\rho}^{(S,\,k-1)}(t)$**. Дополнительно необходимо определить, что** $\hat{\rho}^{(S,\,-1)}(t) = 0$**.**

Используем рекуррентное соотношение пошагово.

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

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

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

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

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

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

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

получается следующее решение:

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

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

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

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

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

Тогда среднее значение любой наблюдаемой A можно вычислить по формуле:

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

При переходе к последнему равенству мы воспользовались известным операторным тождеством:

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

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

Важный частный случай

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

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

Тогда коммутатор

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

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

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

С учетом этого можно написать, что:

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

Воспользуемся формулой

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

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

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

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

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

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

Уравнение Блоха

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

В стандартных курсах квантовой механики показано, что гамильтониан электрона во внешнем постоянном и однородном магнитном поле $\vec{\mathcal{H}}$ имеет вид:

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

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

Для дальнейших вычислений введем ларморовскую частоту

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

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

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

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

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

удовлетворяет следующему уравнению фон Неймана

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

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

Расписываем правую часть уравнения фон Неймана:

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

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

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

Тогда уравнение фон Неймана приобретает вид:

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

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

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

уравнение Блоха в векторной форме без затухания.

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

Квантовое уравнение Лиувилля (уравнение фон Неймана) в координатном представлении

При проведении практических вычислений часто бывает удобно записать уравнение

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

в координатном представлении. Для одномерного случая:

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

Определим ядро матрицы плотности в координатном представлении как:

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

В стандартных курсах квантовой механики выводят, что ядро оператора Гамильтона $\hat{H}$ в координатном представлении имеет вид:

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

Тогда:

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

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

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

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

Для второго матричного элемента при помощи формулы

$$\int d\tilde{x}\, f(\tilde{x})\, \frac{\partial^n}{\partial\, \tilde{x}^n}\, \delta(\tilde{x}-x) = (-1)^n\, \frac{\partial^n f(x)}{\partial\, x^n}$$

находим:

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

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

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

Обобщение на трехмерный случай напишите самостоятельно.

Матрица плотности свободной частицы

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

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

Данное дифференциальное уравнение допускает разделение переменных в виде:

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

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

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

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

где матрица плотности в координатном представлении

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

Подставим эту матрицу плотности в уравнение фон Неймана:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Свойство в) для матрицы плотности соблюдено, поскольку:

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

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:

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

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

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

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

Обобщение возможно продолжить, если вспомнить про операторы измерения (см. параграф "Операторы измерения")

$$\hat{M}^{(A)}_{n'} \equiv \hat{M}^{(A)}_{n'}(t_2,\, t_1 + \Delta t) = \hat{U}(t_2,\, t_1 + \Delta t)\, \hat{P}^{(A)}_{n'} \quad \text{и} \quad \hat{M}^{(B)}_{k'} \equiv \hat{P}^{(B)}_{k'}.$$

Тогда можно следующим образом обобщить правило Людерса

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

и формулу фон Неймана

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

При вычислениях мы воспользовались унитарностью оператора эволюции и свойствами проекторов $\hat{P}^\dagger = \hat{P}$ и $\hat{P}^2 = \hat{P}$. Тогда

$$\hat{M}^{(A)\,\dagger}_{n'} \hat{M}^{(A)}_{n'} = \hat{P}^{(A)}_{n'},$$

откуда сразу следует очевидное обобщение для вероятности

$$w(a_{n'}, t_1) = \lim_{\Delta t \to 0} \mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(A)}_{n'}\, \hat{\rho}(t_1 - \Delta t)\right) = \lim_{\Delta t \to 0} \mathbf{Tr}\left(\hat{M}^{(A)\,\dagger}_{n'} \hat{M}^{(A)}_{n'}\, \hat{\rho}(t_1 - \Delta t)\right).$$

Обобщенные правило Людерса и формула фон Неймана

Для наглядности сравним между собой результаты параграфов "Условная матрица плотности и формула фон Неймана", "Операторы измерения" и "Обобщенная формула фон Неймана".

Правило Людерса для условной матрицы плотности имеет вид

$$\hat{\rho}_{n'}^{(A)} = \frac{\hat{P}_{n'}^{(A)}\,\hat{\rho}\,\hat{P}_{n'}^{(A)}}{w_{n'}},$$

где вероятность измерения значения $a_{n'}$ из спектра наблюдаемой A есть $w_{n'} = \mathbf{Tr}\left(\hat{P}_{n'}^{(A)}\,\hat{\rho}\right)$ и $\sum\limits_n \hat{P}_n^{(A)} = \hat{1}$.

Обобщенное правило Людерса записывается как

$$\hat{\rho}_{\alpha'} = \frac{\hat{M}_{\alpha'}\,\hat{\rho}\,\hat{M}_{\alpha'}^{\dagger}}{w_{\alpha'}},$$

где вероятность результата измерения, которое описывается при помощи оператора измерения $\hat{M}_{\alpha'}$, есть $w_{\alpha'} = \mathbf{Tr}\left(\hat{M}_{\alpha'}^{\dagger}\hat{M}_{\alpha'}\,\hat{\rho}\right)$, и операторы $\hat{M}_{\alpha}$ удовлетворяют условию полноты $\sum\limits_{\alpha} \hat{M}_{\alpha}^{\dagger}\,\hat{M}_{\alpha} = \hat{1}$.

Формула фон Неймана позволяет найти вероятность измерения значения $b_{k'}$ спектра наблюдаемой B при условии, что до этого было измерено значение $a_{n'}$ спектра наблюдаемой A:

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

Обобщенная формула фон Неймана задает вероятность исхода измерения $\hat{N}_{\beta'}$ при условии, что до этого было проведено измерение $\hat{M}_{\alpha'}$:

$$w\left(\beta' \mid \alpha'\right) = \frac{\mathbf{Tr}\left(\hat{N}_{\beta'} \hat{M}_{\alpha'} \hat{\rho} \hat{M}_{\alpha'}^{\dagger} \hat{N}_{\beta'}^{\dagger}\right)}{w_{\alpha'}} = \frac{\mathbf{Tr}\left(\hat{N}_{\beta'} \hat{M}_{\alpha'} \hat{\rho} \hat{M}_{\alpha'}^{\dagger} \hat{N}_{\beta'}^{\dagger}\right)}{\mathbf{Tr}\left(\hat{M}_{\alpha'}^{\dagger} \hat{M}_{\alpha'} \hat{\rho}\right)}$$

и выполняется условие полноты $\sum\limits_{\beta} \hat{N}_{\beta}^{\dagger} \hat{N}_{\beta} = \hat{1}$ для набора операторов измерения $\{\hat{N}_{\beta}\}$. Заметим, что операторы измерений могут иметь совершенно различный вид, а не только тот, который был явным образом использован для них в параграфе "Обобщенная формула фон Неймана".

Обобщение формулы фон Неймана можно продолжить. Пусть, например, измерение $\{\beta\}$ задается набором POVM–элементов $\{\hat{E}_\beta\}$ (см. параграф "Понятие о POVM–элементах"). Тогда

$$w\left(\beta' \,|\, \alpha' |\, \rho\right) = w\left(\beta' \,|\, \alpha'\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{E}_{\beta'}\, \hat{\rho}_{\alpha'}\right) = \frac{\mathbf{Tr}\left(\hat{E}_{\beta'}\, \hat{M}_{\alpha'}\, \hat{\rho}\, \hat{M}^{\dagger}_{\alpha'}\right)}{\mathbf{Tr}\left(\hat{M}^{\dagger}_{\alpha'} \hat{M}_{\alpha'}\, \hat{\rho}\right)}.$$

Еще можно поставить следующий вопрос: какова вероятность после измерения при помощи оператора $\hat{M}_{\alpha'}$ найти систему в состоянии, описываемом матрицей плотности $\hat{\sigma}$, если до измерения система находилась в состоянии $\hat{\rho}$? Очевидно, что ответ таков:

$$w\left(\sigma \,|\, \alpha' \,|\, \rho\right) \equiv w\left(\sigma \,|\, \alpha'\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{\sigma}\, \hat{\rho}_{\alpha'}\right) = \frac{\mathbf{Tr}\left(\hat{\sigma}\, \hat{M}_{\alpha'}\, \hat{\rho}\, \hat{M}^{\dagger}_{\alpha'}\right)}{\mathbf{Tr}\left(\hat{M}^{\dagger}_{\alpha'} \hat{M}_{\alpha'}\, \hat{\rho}\right)}.$$

Приведенные выше примеры показывают, что существует еще огромное количество разумных обобщений формулы фон Неймана, для получения которых главное – понять основную идею построения базовой формулы.

Теорема Байеса с точки зрения обобщенного правила Людерса

В параграфе "Условная и совместная вероятности в классической и квантовой теориях" показано, что формула фон Неймана для условной вероятности хорошо определена даже в том случае, когда понятие совместной вероятности не имеет смысла. А в параграфе "Формула для полной вероятности в классической теории вероятностей и квантовая теория" продемонстрировано, что выражение для матрицы плотности после неселективного измерения противоречит формуле для полной вероятности из классической теории вероятностей.

Ниже мы покажем, что обобщенное правило Людерса приводит к теореме Байеса только тогда, когда для любых α' и α'' операторы измерения коммутируют друг с другом и матрицей плотности $\hat{\rho}$ начального состояния (классика и квазиклассика).

Пусть $\hat{\rho}\,|\,\rho_\ell\,\rangle = \rho_\ell\,|\,\rho_\ell\,\rangle$. По смыслу собственное значение ρ_ℓ матрицы плотности $\hat{\rho}$ – это вероятность измерения ℓ–ого состояния. Тогда можем переобозначить ρ_ℓ через $W(\ell)$, а $|\,\rho_\ell\,\rangle$ – через $|\,\ell\,\rangle$ и написать

$$\hat{\rho} = \sum_\ell W(\ell)\,|\,\ell\,\rangle\,\langle\,\ell\,|.$$

Теперь предположим, что в базисе $\{|\,\ell\,\rangle\}$ операторы измерения $\hat{M}_\alpha$ также диагональны, то есть

$$\hat{M}_\alpha = \sum_\ell M(\alpha\,|\,\ell)\,|\,\ell\,\rangle\,\langle\,\ell\,|.$$

Из этой записи немедленно следует, что для любых α, α' и α'' имеют место коммутаторы $\left[\hat{M}_\alpha,\,\hat{\rho}\right] = 0$ и $\left[\hat{M}_{\alpha'},\,\hat{M}_{\alpha''}\right] = 0$.

Теперь обратимся к обобщенному правилу Людерса

$$\hat{\rho}_{\alpha'} = \frac{\hat{M}_{\alpha'}\,\hat{\rho}\,\hat{M}^\dagger_{\alpha'}}{w_{\alpha'}} = \frac{\hat{M}_{\alpha'}\,\hat{\rho}\,\hat{M}^\dagger_{\alpha'}}{W(\alpha')} = \sum_\ell \frac{|M(\alpha'\,|\,\ell)|^2\;W(\ell)}{W(\alpha')}\;|\,\ell\,\rangle\,\langle\,\ell\,|.$$

Из правила Людерса следует, что матрица плотности $\hat{\rho}_{\alpha'}$ также диагональна в базисе $\{\ell\}$, то есть может быть написана в виде

$$\hat{\rho}_{\alpha'} = \sum_\ell W(\ell\,|\,\alpha')\;|\,\ell\,\rangle\,\langle\,\ell\,|.$$

Действительно, $W(\ell\,|\,\alpha')$ имеет смысл условной вероятности возникновения проектора на чистое состояние $|\,\ell\,\rangle$, когда квантовая система описывается матрицей плотности $\hat{\rho}_{\alpha'}$.

В силу выражения для вероятности $W(\alpha)$ (см. параграф "Операторы измерения") имеем

$$W(\alpha) = w_\alpha = \mathbf{Tr}\left(\hat{M}_\alpha^\dagger \hat{M}_\alpha \hat{\rho}\right) = \sum_\ell |M(\alpha\,|\,\ell)|^2\, W(\ell),$$

поэтому величину $|M(\alpha\,|\,\ell)|^2$ можно отождествить с условной вероятностью $W(\alpha\,|\,\ell)$, поскольку в классической теории вероятностей $W(\alpha) = \sum\limits_\ell W(\alpha\,|\,\ell)\, W(\ell)$.

Таким образом, приравнивая коэффициенты при одинаковых проекторах $|\,\ell\,\rangle\langle\,\ell\,|$ в обобщенном правиле Людерса, воспроизводим теорему Байеса классической теории вероятностей

$$W(\ell\,|\,\alpha') = \frac{W(\alpha'\,|\,\ell)\, W(\ell)}{W(\alpha')}.$$

Если же операторы измерения НЕ коммутируют между собой и с матрицей плотности $\hat{\rho}$, то терема Байеса, вообще говоря, НЕ воспроизводится.

Теория приблизительных измерений

Обобщенное правило Людерса (см. параграф "Обобщенные правило Людерса и формула фон Неймана") можно применить для построения теории приблизительных измерений.

Вопрос: что это за теория? Пусть наблюдаемая A обладает (для простоты) дискретным невырожденным спектром $\{a_i\}$. Если разрешение макроприбора превышает расстояние между соседними значениями спектра наблюдаемой A, то такой макроприбор может с ненулевой вероятностью показать значение $a_{i'}$ наблюдаемой A, даже если квантовая система находится в состоянии $|\, a_{i''\neq i'} \,\rangle$. Естественно, что наблюдаемой A поставлен в соответствие эрмитов оператор $\hat{A}$, для которого $\hat{A}\,|\, a_i \,\rangle = a_i \,|\, a_i \,\rangle$. Собственные вектора $|\, a_i \,\rangle$ образуют ортонормированный базис в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$.

Введем условные вероятности $W(i' \,|\, i'')$ измерить некоторое значение $a_{i'}$, когда микросистема находится в состоянии $|\, a_{i''} \,\rangle$. Поскольку макроприбор всегда выдает какой-то результат, то эти вероятности подчиняются условию нормировки

$$\sum_{i'} W(i' \,|\, i'') = 1.$$

Полная вероятность $W_{i'}$ измерить макроприбором с плохим разрешением значение $a_{i'}$ спектра наблюдаемой A, когда микросистема находится в состоянии $\hat{\rho}$, вычисляется по теореме Байеса

$$W_{i'} = \sum_{i''} W(i' \,|\, i'')\, w_{i''},$$

где $w_i = \mathbf{Tr}\left(\hat{P}_i\, \hat{\rho}\right)$ – вероятность измерить значение a_i макроприбором с высоким разрешением и $\hat{P}_i = |\, a_i \,\rangle \langle\, a_i \,|$ – проекторы на чистые состояния $|\, a_i \,\rangle$, которые удовлетворяют условию $\sum\limits_i \hat{P}_i = \hat{1}$. Тогда $W_{i'}$ можно представить как

$$\begin{aligned} \mathbf{Tr}\left(\hat{M}^{\dagger}_{i'}\, \hat{M}_{i'}\, \hat{\rho}\right) &= W_{i'} = \sum_{i''} W(i' \,|\, i'')\, \mathbf{Tr}\left(\hat{P}_{i''}\, \hat{\rho}\right) = \\ &= \mathbf{Tr}\left(\left(\sum_{i''} W(i' \,|\, i'')\, \hat{P}_{i''}\right) \hat{\rho}\right), \end{aligned}$$

где $\hat{M}_i$ – оператор i–ого приблизительного измерения.

Сравнивая между собой правую и левую части равенства и учитывая ортогональность проекторов $\hat{P}_i$, получаем, что

$$\hat{M}_{i'} = \sum_{i''} \sqrt{W(i' \,|\, i'')}\, \hat{P}_{i''},$$

а матрица плотности системы после приблизительного измерения

$$\hat{\rho}_{i'} = \frac{\hat{M}_{i'}\, \hat{\rho}\, \hat{M}^{\dagger}_{i'}}{W_{i'}} = \frac{\sum\limits_{i''} W(i' \,|\, i'')\, \hat{P}_{i''}\, \hat{\rho}\, \hat{P}_{i''}}{\sum\limits_{i''} W(i' \,|\, i'')\, \mathbf{Tr}\left(\hat{P}_{i''}\, \hat{\rho}\right)}.$$

Нормировка:

$$\begin{aligned}
\sum_{i'} \hat{M}^{\dagger}_{i'} \hat{M}_{i'} &= \sum_{i'} \sum_{i''} \sum_{i'''} \sqrt{W(i' \,|\, i'')}\, \sqrt{W(i' \,|\, i''')}\, \hat{P}_{i''}\, \hat{P}_{i'''} = \\
&= \sum_{i'} \sum_{i''} W(i' \,|\, i'')\, \hat{P}_{i''} = \sum_{i''} \hat{P}_{i''} \sum_{i'} W(i' \,|\, i'') = \sum_{i''} \hat{P}_{i''} = \hat{1}.
\end{aligned}$$

Из этого условия сразу следует, что $\sum\limits_{i'} W_{i'} = 1$.

Теория приблизительных измерений была предложена профессорами МГУ им. М.В. Ломоносова **В.Б. Брагинским** и **Ф.Я. Халили** (см. книгу **V.B. Braginsky, F.Ya. Khalili, "Quantum Measurement", CUP, Cambridge, 1992**).

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 преодолеет и это расстояние, черепаха будет опережать его на 1 мм. И так далее. Таким образом, черепаха, пусть на микроскопическое расстояние, но всегда будет впереди Ахилла!

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$w(t) = \lim_{N\to\infty}\left(1 - \frac{\Delta t^2}{\hbar^2}\,\sigma_H\right)^N = \lim_{N\to\infty}\left(1 - \frac{\sigma_H}{\hbar^2}\,\frac{t^2}{N^2}\right)^N =$$
$$= \lim_{N\to\infty}\left(1 - \frac{\gamma\, t^2/N}{N}\right)^N = \lim_{N\to\infty} e^{-\gamma\, t^2/N} = \lim_{\Delta t\to 0} e^{-\gamma\, t\,\Delta t} = 1,$$

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

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

Действительно, пусть нетерпеливая хозяйка хочет вскипятить чайник. Она ставит чайник на плиту, а затем начинает часто-часто открывать крышку чайника и заглядывать 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.

История открытия квантового парадокса Зенона

Впервые этот парадокс был предсказан в работе сотрудника ленинградского отделения Математического института им. В. А. Стеклова АН СССР Л. А. Халфина (1932—1998 гг.) "К квантовой теории нестабильных элементарных частиц", Докл. АН СССР, т. 141, стр. 599 (1961).

Спустя семь лет было дано улучшенное доказательство с минимально необходимым предположением о конечности первого момента плотности распределения энергии нестабильного состояния (см. Л. А. Халфин, "Об условиях допустимости распределений масс нестабильных частиц", Докл. АН СССР, т. 181, стр. 584 (1968)). Как первый, так и второй вариант доказательства базировались на теореме Фока–Крылова.

Еще через ДЕСЯТЬ лет в 1977 году Мисра и Сударшан независимо переоткрыли эффект Халфина (см. B. Misra, E. C. G. Sudarshan, "The Zeno's paradox in quantum theory", Journal of Mathematical Physics 18, pp. 756—763 (1977)) и назвали его "квантовым парадоксом Зенона".

Квантовый парадокс Зенона впервые экспериментально наблюдался в переходах между атомными уровнями в 1989 году: R. Pool, "A test of how observation affects a quantum system verifies theoretical predictions and proves the truth of an old maxim", Science 246, p. 888 (1989).

Совместные истории (Consistent Histories)

Опр.: история – это упорядоченный во времени набор состояний или событий, который характеризует эволюцию квантовой системы.

Например, в момент времени t_0 состояние системы описывается матрицей плотности $\hat{\rho}$. В момент времени $t_1 > t_0$ импульс квантовой системы лежит в диапазоне от $p_{1\,min}$ до $p_{1\,max}$. А в момент времени $t_2 > t_1$ координата квантовой системы находится в области $[x_{2\,min},\, x_{2\,max}]$ и т.д.

Идея совместных историй была предложена Робертом Гриффицом (R. Griffiths) в 1984 году.

Каждой истории h ставится в соответствие вероятность истории $w(h)$. Эта вероятность должна удовлетворять ряду интуитивно понятных правил:

1) каждому событию, которое реализуется в момент времени t_i, ставится в соответствие проектор $\hat{P}_i(t_i) \equiv \hat{P}_i$ на множество свойств этого состояния. Эти свойства характеризуются, например, наблюдаемыми A и B. Заметим, что наблюдаемые должны быть совместно измеримы, то есть $[\hat{A},\, \hat{B}] = 0$.

2) вероятность $w(h)$ каждой истории h зависит только от последовательности событий, то есть только от $\hat{\rho}$ и набора $\{\hat{P}_i\}$.

3) в простейшем случае, когда история состоит из $\hat{\rho}$ и $\hat{P}_1$, вероятность истории вычисляется при помощи проекционного постулата Дирака–фон Неймана (см. параграф **"Проекционный постулат М. Борна и проекционный постулат Дирака–фон Неймана"**):

$$w(h) = \mathbf{Tr}\left(\hat{P}_1\,\hat{\rho}\right).$$

4) если $\hat{P}_{i+1} \equiv \hat{P}_i$, то $w(h)$ такая же, как будто в историю входит только один проектор $\hat{P}_i$.

5) если два события в соседние моменты времени t_i и t_{i+1} противоречат друг другу, то есть если $\hat{P}_i\hat{P}_{i+1} = 0$, то для такой истории $w(h) = 0$.

6) Если имеются два независимых события в один и тот же момент времени t_i, то есть если $\hat{P}_i'\hat{P}_i'' = 0$, то вероятность истории удовлетворяет **условию аддитивности** $w(h' + h'') = w(h') + w(h'')$.

Свойства **1)** – **6)** ведут к следующему выражению для $w(h)$:

$$w(h) = \mathbf{Tr}\left(\hat{P}_n\,\hat{P}_{n-1}\,\ldots\,\hat{P}_1\,\hat{\rho}\,\hat{P}_1\,\ldots\,\hat{P}_{n-1}\right).$$

Свойство аддитивности историй 6) ведет к условию совместимости Гриффица (поэтому истории называются совместными). Поясним это условие на простом примере. Пусть имеется история h, которой соответствует вероятность

$$w(h) = \mathbf{Tr}\left(\hat{P}_2\,\hat{P}_1\,\hat{\rho}\,\hat{P}_1\right).$$

И пусть $\hat{P}_1 = \hat{P}_1' + \hat{P}_1''$, где $\hat{P}_1'\,\hat{P}_1'' = 0$. Это позволяет ввести еще две истории h' и h'', которым соответствуют вероятности

$$w(h') = \mathbf{Tr}\left(\hat{P}_2\,\hat{P}_1'\,\hat{\rho}\,\hat{P}_1'\right) \quad \text{и} \quad w(h'') = \mathbf{Tr}\left(\hat{P}_2\,\hat{P}_1''\,\hat{\rho}\,\hat{P}_1''\right).$$

Условие аддитивности требует, чтобы

$$w(h) = w(h') + w(h'').$$

Это приводит к выражению

$$\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_2\,\hat{P}_1'\,\hat{\rho}\,\hat{P}_1''\right) + \mathbf{Tr}\left(\hat{P}_2\,\hat{P}_1''\,\hat{\rho}\,\hat{P}_1'\right) = 0.$$

Учтя, что $\hat{P}_1'\,\hat{P}_1'' = 0$, после простых преобразований получаем условие

$$\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_2\left[\hat{P}_1',\left[\hat{\rho},\,\hat{P}_1''\right]\right]\right) = 0,$$

которое и носит название условия совместимости Гриффица.

Часть 5

НЕКОТОРЫЕ МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ПРИЛОЖЕНИЯ

"В тех случаях, когда полное математическое обоснование того или иного утверждения отсутствует, автор отмечает, что в данном вопросе изложение ведется на «физическом уровне строгости»."
Из предисловия редактора перевода к книге Л.А. Тахтаджяна "Квантовая механика для математиков".

След оператора и его свойства

Рассмотрим (для простоты – конечномерное) гильбертово пространство $\mathcal{H}$ размерности N. Выберем в этом пространстве некоторый базис $|\, n_i \,\rangle$, где $i = \{1, \ldots, N\}$. Любой оператор в этом базисе можно записать в виде матрицы $N \times N$:

$$\hat{A} \equiv \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \ldots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} & \ldots & A_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N1} & \ldots & \ldots & A_{NN} \end{pmatrix},$$

где $A_{i'i''} = \left\langle n_{i'} \middle| \hat{A} \middle| n_{i''} \right\rangle$. Тогда след оператора $\mathrm{Tr}\,\hat{A}$ можно определить как след соответствующей матрицы, то есть

$$\mathrm{Tr}\,\hat{A} = \sum_{i=1}^{N} A_{ii}.$$

В определении следа содержится свойство линейности

$$\mathrm{Tr}\left(\lambda\hat{A} + \mu\hat{B}\right) = \lambda\,\mathrm{Tr}\hat{A} + \mu\,\mathrm{Tr}\hat{B},$$

где λ и μ – произвольные комплексные числа.

С учетом определения операции транспонирования

$$\mathbf{Tr}\,\hat{A} = \mathbf{Tr}\left(\hat{A}^{\mathbf{T}}\right).$$

Это же равенство часто используют для эрмитово сопряженных операторов в виде

$$\mathbf{Tr}\,\hat{A} = \left(\mathbf{Tr}\,\hat{A}^{\dagger}\right)^{*}.$$

Важнейшим свойством следа является перестановочность

$$\mathbf{Tr}\,\left(\hat{A}\,\hat{B}\right) = \mathbf{Tr}\,\left(\hat{B}\,\hat{A}\right).$$

Докажем это свойство:

$$\mathbf{Tr}\,\left(\hat{A}\,\hat{B}\right) = \sum_{i=1}^{N}\left(\sum_{k=1}^{N} A_{ik}\,B_{ki}\right) = \sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{N} A_{ik}\,B_{ki} =$$

$$= \sum_{k=1}^{N}\sum_{i=1}^{N} B_{ki}\,A_{ik} = \sum_{k=1}^{N}\left(\sum_{i=1}^{N} B_{ki}\,A_{ik}\right) = \mathbf{Tr}\,\left(\hat{B}\,\hat{A}\right).$$

Из этого свойства следует возможность **циклической перестановки** операторов под знаком следа

$$\mathbf{Tr}\left(\hat{A}\,\hat{B}\,\ldots\,\hat{C}\,\hat{D}\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{D}\,\hat{A}\,\hat{B}\,\ldots\,\hat{C}\right),$$

при помощи которой доказывается много важных утверждений. Например, что **след оператора не зависит от** выбора конкретного **базиса**. Докажите это утверждение самостоятельно, вспомнив, что переход между двумя различными базисами задается унитарным преобразованием.

Наконец получим формулу, которая часто будет использоваться в лекциях:

$$\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_\psi \hat{A}\right) = \left\langle \psi \middle| \hat{A} \middle| \psi \right\rangle,$$

где $\hat{P}_\psi = |\,\psi\,\rangle\langle\,\psi\,|$ – проектор на состояние $|\,\psi\,\rangle$. Имеем:

$$\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_\psi \hat{A}\right) = \sum_{i=1}^{N} \langle\, n_i \,|\, \psi\,\rangle \left\langle \psi \middle| \hat{A} \middle| n_i \right\rangle = \sum_{i=1}^{N} \left\langle \psi \middle| \hat{A} \middle| n_i \right\rangle \langle\, n_i \,|\, \psi\,\rangle =$$

$$= \left\langle \psi \middle| \hat{A} \sum_{i=1}^{N} |\, n_i \,\rangle\langle\, n_i \,| \middle| \psi \right\rangle = \left\langle \psi \middle| \hat{A}\,\hat{1} \middle| \psi \right\rangle = \left\langle \psi \middle| \hat{A} \middle| \psi \right\rangle, \quad \textbf{ч.т.д.}$$

При переходе к последнему равенству использовалось свойство ортогонального разложения единицы по базису $\hat{1} = \sum_{i=1}^{N} |\, n_i \,\rangle\langle\, n_i \,|$.

Свойства следа в бесконечномерных пространствах

Необходимо специально отметить, что в бесконечномерных пространствах перестановочность и цикличность следа выполняются только для операторов, чьи собственные значения ограничены, то есть следы которых конечны. Лишь в этом случае можно менять порядок суммирования

$$\sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{N} A_{ik}\,B_{ki} = \sum_{k=1}^{N}\sum_{i=1}^{N} B_{ki}\,A_{ik}.$$

Если операторы неограниченны и их следы представляют собой расходящиеся ряды, то при изменении порядка суммирования можно получить любой результат. Рассмотрим в качестве примера два оператора

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} (-1)^1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & (-1)^2 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & (-1)^3 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \end{pmatrix} \text{ и } \hat{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \end{pmatrix}.$$

Тогда

$$\mathbf{Tr}\left(\hat{A}\,\hat{B}\right) = \sum_{n=1}^{+\infty}(-1)^n = -1+1-1+1-1+\ldots$$

Его величина полностью зависит от порядка суммирования (аналогия с рядом Гранди):

$$\sum_{n=1}^{+\infty}(-1)^n = (-1+1) + (-1+1) + \ldots = 0+0+0+\ldots = 0$$

или

$$\sum_{n=1}^{+\infty}(-1)^n = -1 + (1-1) + (1-1) + \ldots = -1+0+0+0+\ldots = -1,$$

или даже

$$\sum_{n=1}^{+\infty}(-1)^n = -1-(-1+1-1+1-\ldots) = -1 - \sum_{n=1}^{+\infty}(-1)^n \Rightarrow \sum_{n=1}^{+\infty}(-1)^n = -\frac{1}{2}.$$

Рассмотрим еще один парадокс связанный с ошибочным применением к неограниченным операторам свойства перестановочности следа. Из квантовой механики хорошо известно, что $[\hat{x},\,\hat{p}] = i\hbar\hat{1}$. Формально возьмем след от обеих частей равенства. Тогда приходим к неверному равенству $0 = i\hbar\, dim\,(\mathcal{H})$, где размерность гильбертова пространства $\mathcal{H}$: $dim\,(\mathcal{H}) \geq 1$.

Прямое или тензорное произведение

Прямым (тензорным) произведением двух матриц (или операторов)

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1L} \\ a_{21} & a_{22} & \vdots & a_{2L} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{K1} & a_{K2} & \vdots & a_{KL} \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \hat{B} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1N} \\ b_{21} & b_{22} & \vdots & b_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{M1} & b_{M2} & \vdots & b_{MN} \end{pmatrix}$$

называется матрица (оператор) вида:

$$\hat{A} \otimes \hat{B} = \begin{pmatrix} a_{11}\,\hat{B} & a_{12}\,\hat{B} & \dots & a_{1L}\,\hat{B} \\ a_{21}\,\hat{B} & a_{22}\,\hat{B} & \vdots & a_{2L}\,\hat{B} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{K1}\,\hat{B} & a_{K2}\,\hat{B} & \vdots & a_{KL}\,\hat{B} \end{pmatrix}.$$

Размерность получившейся матрицы равна $(K\,M) \times (N\,L)$**.**

Проще всего понять работу прямого произведения на примерах. Сначала рассмотрим две матрицы 2×2

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \hat{B} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}.$$

Тогда их прямое произведение будет матрица 4×4

$$\hat{A} \otimes \hat{B} = \begin{pmatrix} a_{11}\,\hat{B} & a_{12}\,\hat{B} \\ a_{21}\,\hat{B} & a_{22}\,\hat{B} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}\,b_{11} & a_{11}\,b_{12} & a_{12}\,b_{11} & a_{12}\,b_{12} \\ a_{11}\,b_{21} & a_{11}\,b_{22} & a_{12}\,b_{21} & a_{12}\,b_{22} \\ a_{21}\,b_{11} & a_{21}\,b_{12} & a_{22}\,b_{11} & a_{22}\,b_{12} \\ a_{21}\,b_{21} & a_{21}\,b_{22} & a_{22}\,b_{21} & a_{22}\,b_{22} \end{pmatrix}.$$

Далее введем базис в двумерном гильбертовом пространстве $\mathcal{H}^{(i)}$ вида

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

где $i = \{1, 2\}$. Тогда один из базисных векторов в пространстве $\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$, именно вектор $|\,2\,\rangle = \left| +^{(1)} \right\rangle \left| -^{(2)} \right\rangle$, можно записать как

$$|\,2\,\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 \times \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\\ 0 \times \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix}.$$

Наконец, последний пример: проекционный оператор на состояние $\left|+^{(i)}\right\rangle$

$$\hat{P}_{+}^{(i)} = \left|+^{(i)}\right\rangle\left\langle+^{(i)}\right| = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 \times \begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}\\ 0 \times \begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{pmatrix}.$$

Докажем важную формулу для вычисления следа

$$\mathbf{Tr}\left(\hat{A} \otimes \hat{B}\right) = \left(\mathbf{Tr}\,\hat{A}\right)\left(\mathbf{Tr}\,\hat{B}\right).$$

Идея доказательства общего случая станет очевидна, если рассмотреть прямое произведение двух матриц 2×2**. Тогда**

$$\begin{aligned}\mathbf{Tr}\left(\hat{A} \otimes \hat{B}\right) &= a_{11}\,b_{11} + a_{11}\,b_{22} + a_{22}\,b_{11} + a_{22}\,b_{22} = \\ &= (a_{11} + a_{22})\,(b_{11} + b_{22}) = \left(\mathbf{Tr}\,\hat{A}\right)\left(\mathbf{Tr}\,\hat{B}\right).\end{aligned}$$

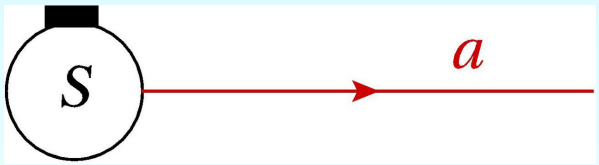
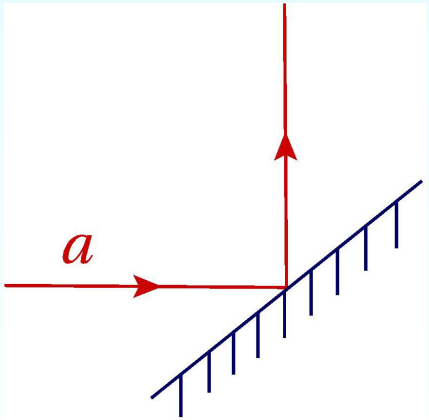
Доказательство общего случая проведите самостоятельно.

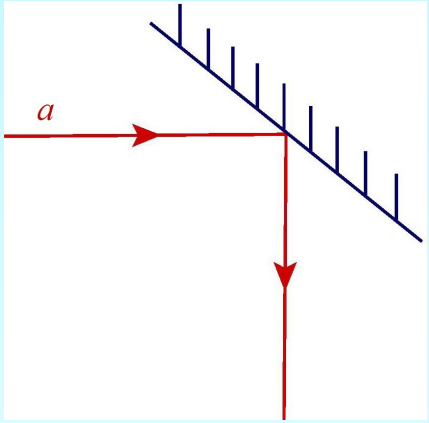
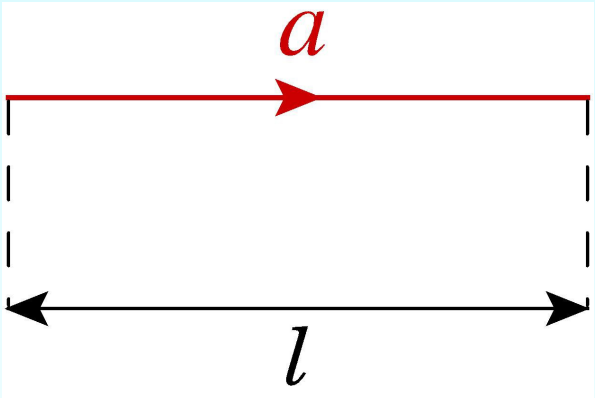
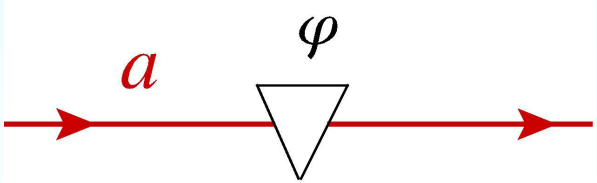
Часть 6

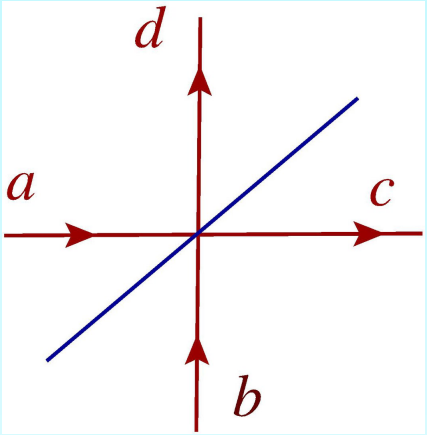
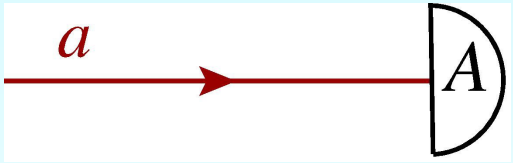
ПОЛЕЗНЫЕ ФИЗИЧЕСКИЕ ДОПОЛНЕНИЯ

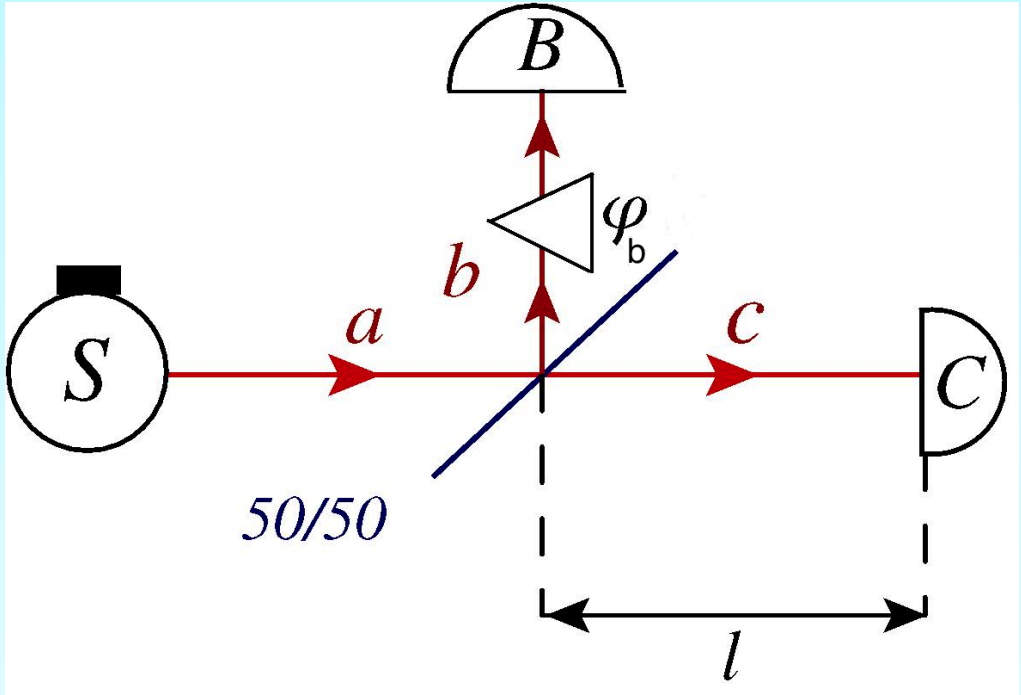
Конструктор для быстрого анализа процессов одно–фотонной интерференции

Этот конструктор в своих лекциях 2013/2014 годов предложил Люсьен Харди (Lucien Hardy). Мы воспроизводим этот конструктор с минимальными изменениями. Еще раз заметим, что данный конструктор применим для анализа только процессов ОДНОФОТОННОЙ интерференции.

Название	Элемент	Вклад в амплитуду
Источник "S" – source		$\lvert a \rangle$
Зеркало N1		$\lvert a \rangle \to i \lvert a \rangle$

Название	Элемент	Вклад в амплитуду
Зеркало N2		$\lvert a \rangle \to i \lvert a \rangle$
Набег фазы		$\lvert a \rangle \to \lvert a \rangle\, e^{i\,\frac{2\pi\ell}{\lambda}}$, где λ – длина волны фотона
Фазовый сдвиг		$\lvert a \rangle \to e^{i\,\varphi} \lvert a \rangle$

Название	Элемент	Вклад в амплитуду
Делитель пучка		$\begin{cases} \lvert a\rangle \to \sqrt{T}\,\lvert c\rangle + i\sqrt{R}\,\lvert d\rangle \\ \lvert b\rangle \to i\sqrt{R}\,\lvert c\rangle + \sqrt{T}\,\lvert d\rangle \end{cases},$ **где** R **– коэффициент прохождения,** T **– коэффициент отражения, которые связаны соотношением** $T + R = 1$
Детектор: первый тип		$\lvert a\rangle\,\lvert A_0\rangle \to \lvert A\rangle$ **детектор поглощает состояние** $\lvert a\rangle$ **и переходит из начального состояния** $\lvert A_0\rangle$ **в состояние выполненного измерения** $\lvert A\rangle$
Детектор: второй тип		$\lvert a\rangle\,\lvert A_0\rangle \to \lvert a\rangle\,\lvert A\rangle$ **детектор пропускает состояние** $\lvert a\rangle$ **и переходит из начального состояния** $\lvert A_0\rangle$ **в состояние выполненного измерения** $\lvert A\rangle$



Приведем простой пример использования конструктора. Для представленной на рисунке схемы можно написать следующую цепочку преобразований:

$$|\,a\,\rangle\,|\,B_0\,\rangle\,|\,C_0\,\rangle \to \left(\frac{i}{\sqrt{2}}\,|\,b\,\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\,c\,\rangle\right)|\,B_0\,\rangle\,|\,C_0\,\rangle \to$$

$$\to \left(\frac{i\,e^{i\varphi_b}}{\sqrt{2}}\,|\,b\,\rangle + \frac{e^{2\pi i\ell/\lambda}}{\sqrt{2}}\,|\,c\,\rangle\right)|\,B_0\,\rangle\,|\,C_0\,\rangle \to$$

$$\to \frac{i\,e^{i\varphi_b}}{\sqrt{2}}\,|\,B\,\rangle\,|\,C_0\,\rangle + \frac{e^{2\pi i\ell/\lambda}}{\sqrt{2}}\,|\,B_0\,\rangle\,|\,C\,\rangle.$$

Отсюда вероятность срабатывания только детектора "B" есть

$$w\,(B\,C_0) = \left|\frac{i\,e^{i\varphi_b}}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{2},$$

вероятность срабатывания только детектора "C":

$$w\,(B_0\,C) = \left|\frac{e^{2\pi i\ell/\lambda}}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{2},$$

вероятность срабатывания обоих детекторов совместно

$$w\,(B\,C) = 0,$$

вероятность, что ни один из детекторов не сработает

$$w\,(B_0\,C_0) = 0$$

и, наконец, вероятность срабатывания хотя бы одного из детекторов

$$w\,(B\,C_0) + w\,(B_0\,C) + w\,(B\,C) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + 0 = 1.$$

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.