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

2017–2018 учебный год

При поддержке фонда развития теоретической физики БАЗИС

Предисловие (не принимать за абсолютную истину!)

Квантовая физика – красивая наука. При первом знакомстве она кажется странной и непонятной, но жутко привлекательной своей волшебной (сумасшедшей? чеширской?) логикой, которая абсолютно непохожа на привычную с детства классическую логику, своими парадоксами, которые, на первый взгляд, не имеют решения, но, тем не менее, решаются. А справедливость каждого решения подтверждается экспериментально. Квантовая механика – это настоящий параллельный мир, который глубже и логичней, чем любой мир, придуманный писателями – фантастами или писателями – философами (впрочем, это одно и тоже). Квантовым мирам можно отдать всю жизнь, но не постичь их тысячной части... Согласен, вышло немного патетично. Но это – правда. К сожалению, современные курсы квантовой физики делают основной упор на тех ее частях, которые были важны при создании квантовой механики в 20–е и 30–е годы прошлого века, то есть на атомную спектроскопию и ядерную физику.

Однако еще основоположники квантовой механики (Н. Бор, В. Гейзенберг, М. Борн, Э. Шредингер, П. Дирак, А. Эйнштейн и др.) полагали, что основой созданной ими теории является проблема измерения или, иначе, проблема описания квантового объекта в классических терминах, поскольку человеческий мозг способен анализировать и обрабатывать только классические термины и составлять из них классическую информацию.

Можно даже 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. Оказывается, что в терминах матрицы плотности многие "парадоксы" квантовой механики полностью теряют свою "парадоксальность" (в качестве примера укажем парадокс кота Шредингера).

Только к концу 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,

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

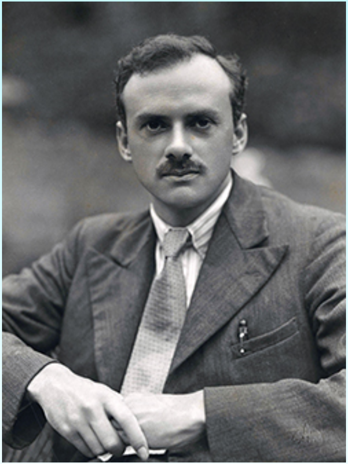
В классических учебниках по квантовой механике, например, в блестящей книге П.А.М. Дирака "*Принципы квантовой механики*" или в курсе лекций Д.И. Блохинцева "*Основы квантовой механики*" утверждается, что именно принцип суперпозиции является базой для квантовомеханического описания Природы.

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.

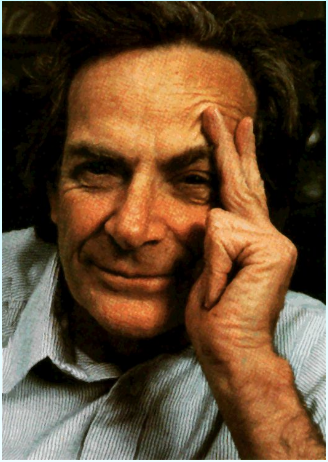
Ниже мы увидим, что более общая формулировка квантовой механики может быть дана в терминах матрицы плотности. В этом подходе принцип суперпозиции выглядит довольно искусственной конструкцией (см. параграф "Принцип суперпозиции на языке матрицы плотности"). Помимо этого активно используются фейнмановская 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 также можно описать не прибегая к принципу суперпозиции, например, в терминах POVM-операторов (см. параграф "Понятие о POVM-операторах").

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 макроскопических объектов (собак): ''Присел полежать''. Надеюсь, все понимают, в чем тут ''шутка юмора'', и почему собакен на рисунке 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:

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

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.

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 $w_{i'} = w\left(a_{i'}\,\middle|\psi\right) = |c_{i'}|^2$, 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 временно́го 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:

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

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

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:

$$\langle\, B\,\rangle_\psi (t) \;\equiv\; \frac{d}{dt}\Big(\langle\, A\,\rangle_\psi (t)\Big)$$

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:

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

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

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 вектора 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* можно записать в общем виде как

$$|\,\varphi_i\,\rangle \;=\; \frac{\hat{P}_{\varphi_i}\,|\,\psi\,\rangle}{\sqrt{w_i}}.$$

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

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

$$= C_1^2\,|\,\varphi_1\,\rangle\,|\,\varphi_1\,\rangle + C_2^2\,|\,\varphi_2\,\rangle\,|\,\varphi_2\,\rangle + C_1C_2\Big(|\,\varphi_1\,\rangle\,|\,\varphi_2\,\rangle + |\,\varphi_2\,\rangle\,|\,\varphi_1\,\rangle\Big).$$

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

Хотя вычисления, ведущие к доказательству теоремы о невозможности клонирования (по-английски *“No-cloning theorem”*), доступны любому студенту, но сама теорема была доказана только в 1982 году (больше чем через полвека после создания квантовой механики!) и опубликована в журнале Nature:
W. K. Wootters and W. H. Zurek, "A Single Quantum Cannot Be Cloned,"Nature 299, p.802 (1982).

Совместное клонирование ортогональных состояний

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

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

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

Теперь скалярно умножим одно равенство на другое. Получим:

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

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

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

Теорема о невозможности уничтожения копии произвольного чистого состояния

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

Напомним, что в результате измерения вектор состояния $|\psi\rangle$ переходит в один из векторов $|\varphi_{i'}\rangle$. 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 предания смысла принципу суперпозиции, дополнительно потребуем, чтобы $C_1 \neq 0$ и $C_2 \neq 0$. В остальном коэффициенты C_1 и C_2 являются абсолютно **произвольными**.

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

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

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:

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

Оно превращается в тождество, если

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

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

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

уничтожить нельзя. Теперь рассмотрим уничтожение одной из копий чистого состояния

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

Применим искомую процедуру к самому вектору

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

и к его разложению в суперпозицию

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

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

Результаты обеих процедур уничтожения согласуются, если выбрать

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

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

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

невозможно уничтожить также, 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 также, как и клонировать).

Люди, доказавшие "No-deleting theorem"

Arun Kumar Pati
род. в 1966 г.

Samuel Leon Braunstein
род. в 1961 г.

Доказательство было опубликована 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

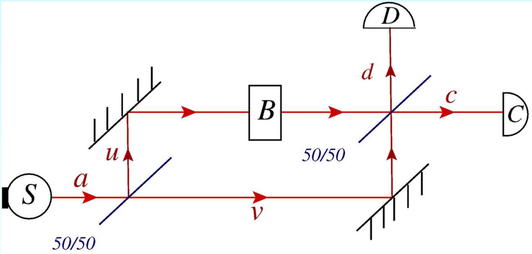
Принцип суперпозиции позволяет при помощи микрообъектов добиться успеха в такие задачах, которые принципиально НЕ могут быть решены на макроскопическом уровне. Хорошим примером служит задача о квантовой бомбе, предложенная двумя израильскими физиками Авшаломом Элитцуром и Львом Вайдманом в работе A. 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 а него фотон и приводит бомбу в действие. Неисправный взрыватель никак не взаимодействует с фотоном и не взрывает бомбу.

Требуется придумать процедуру, каким образом идентифицировать хоть 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 $|\,a\,\rangle\,\left|\,B_0^-\right\rangle \to |\,a\,\rangle\,\left|\,B_0^-\right\rangle$, а исправная бомба ни чем не отличается от детектора первого типа: $|\,a\,\rangle\left|\,B_0^+\right\rangle \to \left|\,B^+\right\rangle$. Тогда для неисправной бомбы имеется следующая цепочка преобразований:

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

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

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

Для исправной бомбы можем написать

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

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

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

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

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!

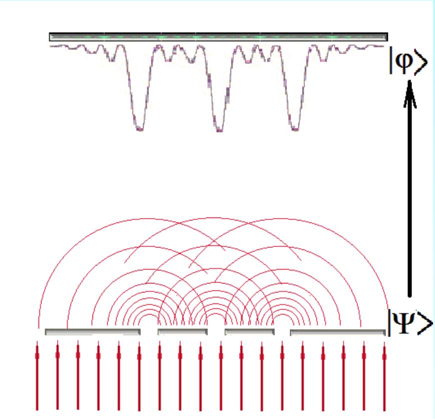
Таким образом $|1/2|^2 = 1/4$ всех исправных бомб удается идентифицировать как исправные, еще $|i/2|^2 = 1/4$ исправных бомб не удается однозначно идентифицировать как исправные. И половина исправных бомб взрывается. Заметим, что число идентифицированных исправных бомб можно поднять до $1/3$ (как?).

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 бы запрещали такую ситуацию. Например, правило, что в природе не возможны такие конфигурации макроприборов, которые приводят к отрицательным вероятностям для наблюдаемых величин.

Заметим, что для 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 независит от того, какие измерительные приборы мы используем для изучения микросистемы?

Второй вопрос: если мы утверждаем, что квантовая система описывается волновой функцией $\psi(...)$, 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 $\psi(...)$.

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-операторах

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

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

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

на любых векторах $\left| \psi \right\rangle$ 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-операторов прекционный 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 $\left| e_\alpha \right\rangle$, которое абсолютно гипотетически могло бы соответствовать измерению при помощи POVM–оператора $\hat{E}_\alpha$.

Между POVM-операторами и операторами измерений имеется прямая связь:

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

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»:

$$\langle\, A \,\rangle_{M_\psi} \;=\; \sum_\alpha w_\alpha \left\langle \chi_\alpha \middle| \hat{A} \middle| \chi_\alpha \right\rangle = \sum_\alpha \left\langle \psi \middle| \hat{M}^\dagger_\alpha \hat{A}\, \hat{M}_\alpha \middle| \psi \right\rangle \;=$$

$$=\; \sum_\alpha \mathbf{Tr}\left(\hat{M}^\dagger_\alpha \hat{A}\, \hat{M}_\alpha\, \hat{P}_\psi\right) = \sum_\alpha \mathbf{Tr}\left(\sqrt{\hat{E}_\alpha}\, \hat{U}^\dagger_\alpha\, \hat{A}\, \hat{U}_\alpha \sqrt{\hat{E}_\alpha}\, \hat{P}_\psi\right),$$

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

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

Впервые POVM-операторы 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-операторов 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-операторов

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 вектора $|\,a_i\,\rangle$ 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)

$$\mid \psi \rangle = \sum_i c_i \mid \varphi_i \rangle$$

предполагалось, что вектора $\mid \varphi_i \rangle$ ортогональны друг другу, т. е. что $\langle \varphi_{i'} \mid \varphi_{i''} \rangle = \delta_{i' \, i''}$. 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

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

где вектора $\mid \chi_i \rangle$ уже могут быть НЕ ортогональны друг другу.

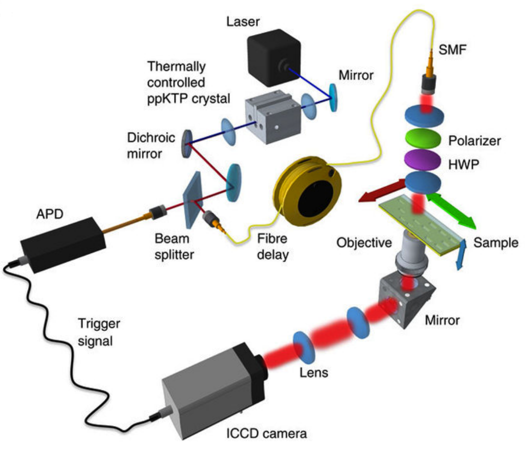
Однако в силу условия полноты для операторов измерения, проекторы $\hat{P}_{\chi_i} = |\,\chi_i\,\rangle\langle\,\chi_i\,|$ должны составлять неортогональное разложение единицы

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

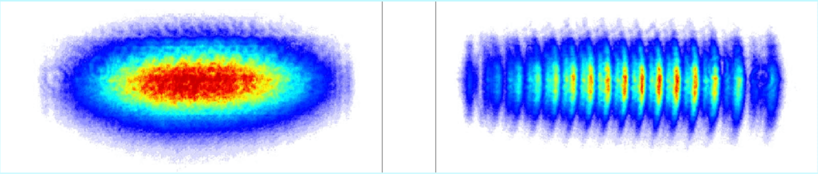
которое гарантирует правильную нормировку полной вероятности, если вероятности измерений вычислять согласно проекционному постулату М.Борна (Постулат N4):

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

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

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

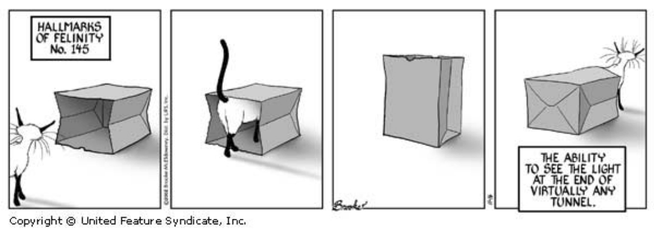
где $\hat{P}_i = |\,a_i\,\rangle\,\langle\,a_i\,|$ – проектор на чистое состояние $|\,a_i\,\rangle$. Тогда формула для $\langle\,A\,\rangle_w$ перепишется в виде

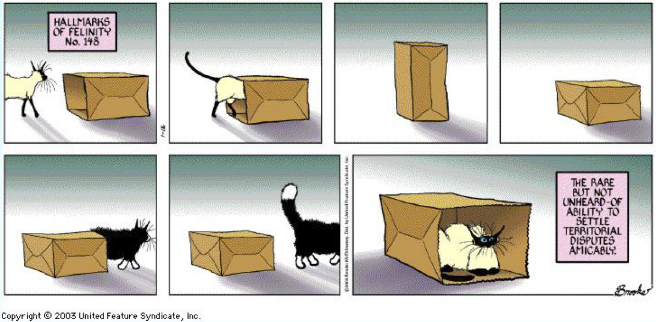
$$\langle\,A\,\rangle_w = \sum_i a_i\,\frac{\left\langle\,\varphi\,\middle|\,\hat{P}_i\,\middle|\,\psi\,\right\rangle}{\langle\,\varphi\,|\,\psi\,\rangle}.$$

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

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

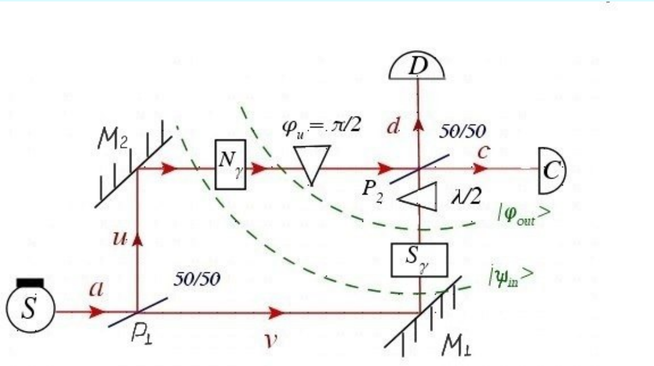
где вектора $|\varphi_i\rangle$ образуют базис $\langle \varphi_{i'} | \varphi_{i''} \rangle = \delta_{i'\,i''}$. Тогда $c_i = \langle \varphi_i | \psi \rangle$, вероятность $w_i = |c_i|^2$ и $\sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| = \hat{1}$. Вычислим среднее значение слабой величины для наблюдаемой 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 $P_1M_1P_2$, по которому, напомним, фотон **НЕ ПРОХОДИЛ**. Соответствующий оператор поляризации

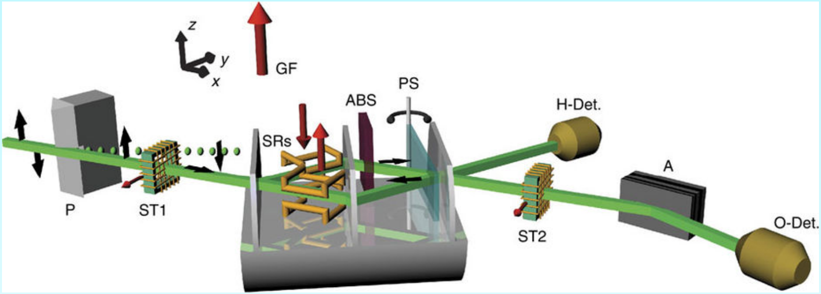
$$\hat{S}_{112} = |\, v\,\rangle\langle\, v\,| \Big(|+\rangle\langle +| - |-\rangle\langle -| \Big),$$

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 $P_1M_2P_2$ и поляризация фотона на пути $P_1M_1P_2$ совместно измеримы.

Для среднего значения слабой поляризации получаем

$$\langle\, S_\gamma(P_1M_1P_2)\,\rangle_w = \frac{\left\langle\, \Phi_{out} \,\middle|\, \hat{S}_{112} \,\middle|\, \Psi_{in}\,\right\rangle}{\langle\, \Phi_{out} \,|\, \Psi_{in}\,\rangle} = \frac{-1/2}{-1/2} = 1.$$

Таким образом мы получили **парадоксальную** (с классической точки зрения) **ситуацию**: фотон имеет НЕ нулевую (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 эксперименталькню 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

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

микрочастицы до прохождения трех щелей и post-selected state вида

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

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?

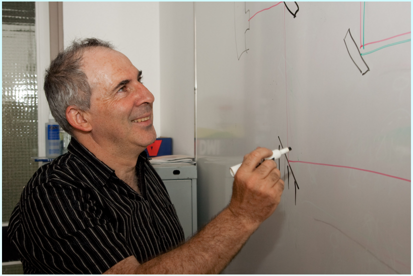
Ответ: предположим, что у нас есть положительно заряженная микрочастица, которая может находится в состояниях $|\,1\,\rangle$, $|\,2\,\rangle$ или $|\,3\,\rangle$ так, что ее начальное и конечное состояния описывались бы $|\,\Psi\,\rangle$ и $|\,\Phi\,\rangle$ соответственно. Для того, чтобы проверить, 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

проф. Якир Ааронов
род. 28.08.1932
Университет Чепмена, США



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

Часть 2

МАТРИЦА ПЛОТНОСТИ: ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА

Смешанные состояния

До сих пор мы задавали состояния квантовых систем при помощи векторов состояния $|\,\psi\,\rangle$ или волновых функций $\psi(a) = \langle\, a\,|\,\psi\,\rangle$ в некотором a-представлении. Напомним, что такие состояния носят название чистых состояний. Однако описание при помощи чистых состояний 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 не достаточно 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 $|\psi\rangle$, но и при помощи проекционного оператора $\hat{P}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ на это состояние. Очевидно, что в данном случае проектор несет ту же информацию о микросистеме, что и вектор состояния $|\psi\rangle$. Далее для общности описания чистых и смешанных состояний будем называть проектор $\hat{P}_\psi$ статистическим оператором или матрицей плотности микросистемы и обозначать как $\hat{\rho}$. Таким образом, для чистых состояний:

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

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

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

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

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

б) **диагональные элементы ρ_{nn} матрицы плотности $\hat{\rho}$ неотрицательны;**

в) **след матрицы плотности $\mathbf{Tr}\,\hat{\rho} = 1$;**

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

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

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

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

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

а) эрмитовость очевидна из явного вида проектора;

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

в) воспользуемся базисом из предыдущего пункта:

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

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

г) легко следует из свойств проектора;

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

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

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

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

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

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

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

Такому вектору состояния соответствует матрица плотности

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

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

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

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

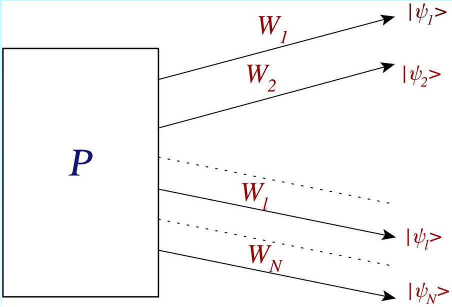
$$\langle\,\psi\,| = \begin{pmatrix} \cos\theta, & \sin\theta\, e^{-i\varphi} \end{pmatrix}.$$

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

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

Какой из двух способов получения матрицы плотности чистого состояния, из приведенных в этом параграфе, выбрать, дело вкуса и привычки.

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_{nn} матрицы плотности $\hat{\rho}$ **неотрицательны**;

в) след матрицы плотности $\mathbf{Tr}\,\hat{\rho} = 1$;

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

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

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

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

$$= \sum_\ell W_\ell\,\mathbf{Tr}\hat{\rho}_\ell = \sum_\ell W_\ell = 1.$$

Для доказательства пункта **г)** следует воспользоваться неравенством $\sum\limits_{\ell} W_\ell \geq \sum\limits_{\ell} W_\ell^2$, которое очевидно для $0 \leq W_\ell \leq 1$.

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

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

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

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

Примеры матриц плотности

Легко проверить, что матрица

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

удовлетворяет всем свойствам матрицы плотности чистого состояния, а матрица

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

может описывать только смешанное состояние. Матрица же

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

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

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

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

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 дискреиный спектр). Тогда элементы матрицы плотности 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 измерить значение $a_{n'}$ спектра наблюдаемой A. Недиагональные матричные элементы $\rho_{n'\,n''}$ (где $n' \neq n''$) определяют дисперсию и корреляции в системе. Действительно

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

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

Для практических вычислений удобно переходить в координатное представление. Тогда основным объектом становится не матрица (оператор) плотности $\hat{\rho}$, а его ядро в координатном представлении (для простоты рассматривается одномерный случай)

$$\rho(x, \tilde{x}) = \langle\, x \,|\, \hat{\rho} \,|\, \tilde{x} \,\rangle.$$

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.**

"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 связанно 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 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.

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

Прямое утверждение теоремы доказано.

Приступим к доказательству обратного утверждения. Пусть

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

Если $\hat{\rho}$ – матрица плотности, то заведомо существует такой ортонормированный набор состояний $\{|\, \chi_k \,\rangle\}$, что

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

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

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

Поскольку все $W_\ell \geq 0$ и $|\langle\, \Psi \,|\, \psi_\ell \,\rangle| \geq 0$, то сумма неотрицательных чисел равна нулю тогда и только тогда, когда $\sqrt{W_\ell}\,\langle\, \Psi \,|\, \psi_\ell \,\rangle = 0$. Отсюда следует. что все вектора $\sqrt{W_\ell}\,|\, \psi_\ell \,\rangle$ лежат в том же гильбертовом пространстве, что и вектора $|\, \chi_k \,\rangle$ и могут быть разложены по $|\, \chi_k \,\rangle$ как по базису, то есть

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

Тогда

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

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

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

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 очень часто встает вопрос, при каких условиях некоторая матрица (которая может быть бесконечномерной, заданной в виде (прямого) произведения нескольких нетривиальных матриц с параметрами и т.д.) является матрицей плотности? Как правило, в подобных задачах критерии а), в) и г) проверить достаточно просто, однако проверка критерия б) – неотрицательность диагональных матричных элементов – представляет серьезную проблему (см., например, параграф "Матрицы плотности состояний Белла и матрицы Паули").

Для чистых состояний в решении этой 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 вектора и собственные значения матрицы $\hat{\rho}$. В силу эрмитовости (условие **А)**) вектора $|\,\rho_\ell\,\rangle$ образуют базис, в котором мы будем вычислять след. Тогда в базисе собственных векторов имеем:

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

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.

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:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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** $[0,\,1]$ **так, что:**

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

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

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

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

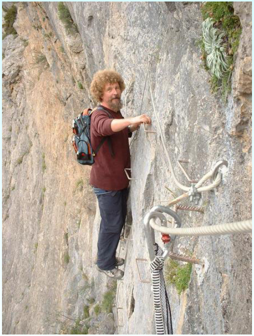
Однако использование Глизоном "интуитивно ясных" свойств вероятности в условии теоремы часто подвергается критике: "В самом деле, теорема Глизона в настоящее время по праву является известным и общепринятым результатом, который лежит в основании квантовой теории. Это строгая математическая теорема, как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

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

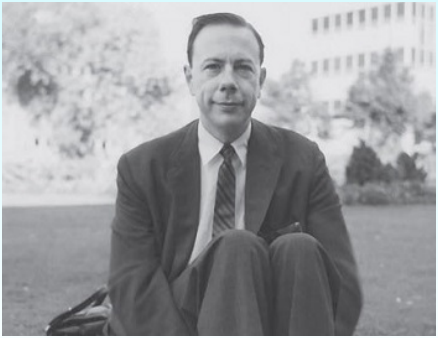
В двумерном пространстве свойство **"3)"** не работает. Для иллюстрации можно рассмотреть два фермиона с различными поляризациями $\vec{a}$ и $\vec{b}$ в чистом состоянии , которые описываются проекционными операторами $\hat{P}_a = \frac{1}{2}\,(\hat{1} + (\vec{a}\,\vec{\sigma}))$ и $\hat{P}_b = \frac{1}{2}\,\left(\hat{1}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

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

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



W.H.Zurek
подбирается с критикой



Эндрю Глизон
(04.11.1921 – 17.10.2008)

Матрица плотности и постулаты квантовой механики

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

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

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

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

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**:
$$D_i(\hat\rho_A, \hat\rho_B) \le D_i(\hat\rho_A, \hat\rho_C) + D_i(\hat\rho_C, \hat\rho_B).$$
Это основное свойство, которое отличает метрики от степеней совпадения;
2. $D_i(\hat U \hat\rho_A \hat U^\dagger, \hat U \hat\rho_B \hat U^\dagger) = D_i(\hat\rho_A, \hat\rho_B)$ – **инвариантность** относительно любых унитарных преобразований $\hat U$. Затруднение вызывает доказательство инвариантности только для относительной энтропии. Оно будет дано в лекции, посвященной квантовой энтропии;
3. $D_{Tr}\left(\hat\rho_A, \sum\limits_\ell W_\ell \hat\rho_\ell\right) \le \sum\limits_\ell W_\ell\, D_{Tr}(\hat\rho_A, \hat\rho_\ell)$ – **выпуклость** следовой метрики;
4. $D_B^2(\hat\rho_A, \hat\rho_B)/2 = 1 - F_1(\hat\rho_A, \hat\rho_B) \le D_{Tr}(\hat\rho_A, \hat\rho_B) \le \sqrt{1 - F_1^2(\hat\rho_A, \hat\rho_B)}$;
5. В случае чистых состояний $|\,A\,\rangle$ и $|\,B\,\rangle$
$$D_A(|\,A\,\rangle, |\,B\,\rangle) = \arccos\left(\frac{\langle\,A\,|\;B\,\rangle}{||A||\;||B||}\right),$$
что делает очевидным, почему данную метрику можно интерпретировать как "угол".

Как найти $F_1(\hat\rho_A,\,\hat\rho_B)$?

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

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

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

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

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

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

$$F_1(\hat\rho_A,\,\hat\rho_B) = \sum_i \sqrt{\rho_i}.$$

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

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

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

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

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

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

Пример вычисления $F_1(\hat\rho_A,\,\hat\rho_B)$ и $D_{Tr}(\hat\rho_A,\,\hat\rho_B)$

Рассмотрим две матрицы плотности

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

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

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

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 вектора $|\,\rho_i\,\rangle$ 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 имеются всего два состояния $\hat{\rho}_A$ и $\hat{\rho}_B$. В этом пространстве можно определить "оператор измерения исхода 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

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

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:

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

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

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

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

С другой стороны,

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

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 сепарабельные 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:

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

а общая волновая функция синглетного по спину состояния может быть записана в виде:

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

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.

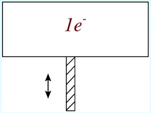


Рис. 1

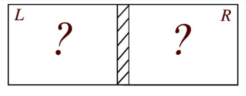


Рис. 2

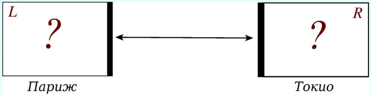


Рис. 3

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

$$|\,\Psi^+\,\rangle = \frac{|\,1_L\,\rangle\,|\,0_R\,\rangle + |\,0_L\,\rangle\,|\,1_R\,\rangle}{\sqrt{2}},$$

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 или сепарабельном состоянии.

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:

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

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

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

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

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

равна

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

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

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

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

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

Легко видеть, что $\mathbf{Tr}\,\left(\hat{\rho}^{(1)}\right)^2 = 1/2 < 1$. Таким образом, частица "1" находится в смешанном состоянии, несмотря на то, что вся система "1" + "2" находится в чистом состоянии!!! С вероятностью $W_+^{(1)} = 1/2$ частицу "1" можно измерить в состоянии $\left|\,+^{(1)}\right\rangle$, а с вероятностью $W_-^{(1)} = 1/2$ – в состоянии $\left|\,-^{(1)}\right\rangle$. И **принципиально** НЕ существует вектора состояния, который бы описывал частицу "1" в рассматриваемой ситуации! 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 было получить матрицу $\hat{\rho}^{(1)}$ из параграфа "Квантовое происхождение вероятностей W_ℓ" иначе. 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

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

Указанный способ предпочтительнее, если матрица плотности $\hat{\rho}$ изначально задана в виде матрицы и не ясно, как разложить ее в виде суммы симметричных и несимметричных проекторов на базисные состояния.

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 (*факторизация — простейший пример сепарабельного состояния в терминах матрицы плотности*), 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.

Обобщение понятия сепарабельного состояния

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

Пусть микросистема состоит из подсистем "1", "2", $\ldots$, "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. Этот частный пример иллюстрирует общую идею о том, что ЕДИНСТВЕННЫМ способом создания запутанности между двумя микросистемами является непосредственное взаимодействие этих микросистем друг с другом.

Разложение Шмидта

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

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

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

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

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

где

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

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

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

$$\hat\rho_A = \sum_\ell W_\ell\,|\,a_\ell\,\rangle\,\langle\,a_\ell\,|.$$

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

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

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

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

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

Сделайте это простое упражнение самостоятельно.

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

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

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

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

$$|\varphi\rangle = \sum_n \sqrt{W_n'}\,|a_n'\rangle\,|b_n'\rangle\,, \quad \text{где} \quad \sum_n W_n' = 1.$$

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

Число Шмидта и запутанные состояния

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

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

Примеры:
1) *запутанное* состояние:

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

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

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

2) ***запутанное* состояние:**

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

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

3) ***сепарабельное* состояние:**

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

для которого, очевидно, *число Шмидта* $= 1$.

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

Действительно, пусть $\hat{U} = \hat{U}_A \otimes \hat{1}_B$ – унитарное преобразование подсистемы “A”. Тогда разложение Шмидта для $\hat{U}\,|\,\psi\,\rangle$ имеет вид $\sum\limits_{\ell} \sqrt{W_\ell}\left(\hat{U}_A\,|\,a_\ell\,\rangle\right)\,|\,b_\ell\,\rangle$, 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 НЕ верно. Приведем соответствующий пример. Рассмотрим состояние

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

Тогда

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

Аналогично

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

и

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

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

Состояния Белла (the Bell states)

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

Чаще всего состояния Белла обозначают следующим образом:

$$
\begin{aligned}
|\,\Psi^+\,\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\Big|+^{(1)}\Big\rangle\Big|-^{(2)}\Big\rangle + \Big|-^{(1)}\Big\rangle\Big|+^{(2)}\Big\rangle\Big);\\
|\,\Psi^-\,\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\Big|+^{(1)}\Big\rangle\Big|-^{(2)}\Big\rangle - \Big|-^{(1)}\Big\rangle\Big|+^{(2)}\Big\rangle\Big);\\
|\,\Phi^+\,\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\Big|+^{(1)}\Big\rangle\Big|+^{(2)}\Big\rangle + \Big|-^{(1)}\Big\rangle\Big|-^{(2)}\Big\rangle\Big);\\
|\,\Phi^-\,\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\Big|+^{(1)}\Big\rangle\Big|+^{(2)}\Big\rangle - \Big|-^{(1)}\Big\rangle\Big|-^{(2)}\Big\rangle\Big).
\end{aligned}
$$

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

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 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:

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

Далее разложим систему "$(S)+(A)$" по базису Белла. После громоздких, но идейно простых вычислений, приходим к выражению:

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

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 $\left|\Psi^{+}_{\psi\,A}\right\rangle$. 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, Братецыванушка может проделывать над своим состояние набор измерений σ_3, $i\sigma_2$, $\hat{1}$ и σ_3 в зависимости от того, какое состояние получит Аленушка при данном измерении. Например, если Аленушка получила состояние $\left|\Phi^{+}_{\psi\,A}\right\rangle$, то Братецыванушка применяет измерение 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 $\left|\Psi^-\right\rangle$

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 $\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(2)}$:

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

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

В этом базисе синглетное по спину состояние запишется как

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

а соответствующая ему матрица плотности имеет следующий явный вид:

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

Матрицы плотности состояний Белла и матрицы Паули

Во многих приложениях удобно использовать выражение для матрицы плотности системы спинов $s = 1/2$, записанное через прямые произведения матриц Паули. Покажем, как можно получить подобное выражение.

В выбранном нами базисе при помощи идейно простых, но достаточно громоздких вычислений легко проверить, 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

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

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

Установим самый общий вид матрицы плотности двух спинов $s = 1/2$. Разложение по базису матриц Паули 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 происходит суммирование от 1 до 3.

Воспользуемся тем, что $\mathbf{Tr}\left(\hat{A} \otimes \hat{B}\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{A}\right) \times \mathbf{Tr}\left(\hat{B}\right)$. Тогда

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

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

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

Аналогично для $\mathbf{Tr}_{(1)}\,\hat{\rho}$.

Явные вычисления дают

$$\mathbf{Tr}_{(2)}\,\hat\rho \;=\; \frac{1}{2}\,\hat 1^{(1)} \,+\, 2\,\zeta_j\,\sigma_j^{(1)} \qquad\Longrightarrow\qquad \zeta_j = \frac{1}{4}\,p_j^{(1)}.$$

Полностью аналогично находим, что $\beta_i = \dfrac{1}{4}\,p_i^{(2)}$. Таким образом

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

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

где тензор $C_{ji} = 4\left(\eta_{ij} - \dfrac{1}{4}p_j^{(1)}p_i^{(2)}\right)$. Учтя, что $\vec p^{\,(\alpha)} = \left\langle\, \vec\sigma^{\,(\alpha)}\,\right\rangle_\rho$, легко получим 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 “BCHSH–неравенство и сепарабельные состояния”).

Все перечисленные выше условия являются только необходимыми. То есть при их НЕвыполнении состояние заведомо НЕ может быть сепарабельным. 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, например, матрицу плотности подсистемы "B". Тогда

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

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

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

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

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

А.Перес и клан Городецких

Ашер Перес
(30.01.1934 – 01.01.2005)

Семья Городецких:
Михал, Ядвига, Ричард и Павел

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

Как выполнять частичное транспонирование?

Для ответа на этот вопрос используем матрицу плотности $\hat{\rho}^{(\psi^-)}$. Частично транспонируем ее по переменным подсистемы "2". Имеем:

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

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

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

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

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

То есть, чтобы выполнить частичное транспонирование матрицы $\hat{\rho}^{(\psi^-)}$ размерности 4×4 надо провести независимое транспонирование каждого блока 2×2 данной матрицы.

Состояние Вернера и критерий сепарабельности Переса

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

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

где $0 \leq x \leq 1$, оператор $\hat{1}$ – единичная матрица размерности 4×4 (сумма проекторов на все состояния Белла) и $\left| \Psi^- \right\rangle$ - 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 $s = 1/2$:

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

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

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 $0 \le x \le 1$), а для матрицы $\left(\hat{\rho}^{(W)}\right)^{T_B}_{\mathbf{diag}}$ только при $0 \le x \le 1/3$. Таким образом, в диапазоне

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

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

Редукционное условие сепарабельности

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

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

Сначала рассмотрим отображение

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

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

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

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

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

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

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

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

Теперь рассмотрим сепарабельное состояние

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

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

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

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

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

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

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

тоже положительно определена.

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

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

и

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

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

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

Состояние Вернера и редукционный критерий

Применим редукционный критерий к состоянию Вернера. Имеем:

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

Тогда

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

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

Чтобы исследовать получившуюся матрицу на положительность, ее необходимо диагонализовать.

Простые стандартные вычисления дают:

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

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

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

Следовательно, **согласно редукционному критерию** при

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

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

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:

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

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 находится не могут). Пример:

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

Матрицы плотности подсистем имеют вид:

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

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 характеристике эрмитов оператор $\hat{A}$ с дискретным невырожденным спектром $\{a_n\}$ (для простоты). Хорошо известно, что собственные вектора $|\,a_n\,\rangle$ наблюдаемой A образуют ортонормированный базис.

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

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

В процессе вычислений мы воспользовались результатом параграфа "Физический смысл элементов матрицы плотности" для нескольких эквивалентных форм записи вероятности измерения значения $a_{n'}$:

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

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:

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

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".

Условная и совместная вероятности в классической и квантовой теориях

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

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

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

Сравним это классическое определение условной вероятности с сугубо квантовой формулой фон Неймана. Не вызывает сомнения, что вероятность измерения значения $a_{n'}$ спектра наблюдаемой A можно отождествить с выражением для степени совпадения или "fidelity", то есть

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

Тогда хотелось бы записать для совместной вероятности следующее выражение:

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

Вопрос: всегда ли данное выражение является верным?

Ответ: нет, не всегда. Совместная вероятность $w(b_{k'}, a_{n'})$ в квантовом случае корректно определена только при условии, что $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = 0$, то есть когда наблюдаемые A и B **совместно** (одновременно) **измеримы**.

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 то равенство справедливо только тогда, когда $\left[\hat{P}^{(A)}_{n'}, \hat{P}^{(B)}_{k'}\right] = 0$. Иными словами, только если $\langle\, a_{n'} \mid b_{k'}\,\rangle = \delta_{n'k'}$. Из последнего равенства очевидно, что вектора состояния $|\, a_{k'}\,\rangle$ и $|\, b_{k'}\,\rangle$ должны принадлежать к общему базису операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$. Таким образом операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ имеют общую систему собственных векторов, то есть коммутируют. Утверждение доказано.

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 парадигме можно предложить эксперименты по проверке оснований квантовой теории. Некоторые из экспериментов 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 значение $x_{\ell'}$ 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 $\bigcup\limits_{\ell}$.

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 $w\left(\bigcup_k b_k \,\middle|\, a_{n'}\right)$ имеем:

$$w\left(\bigcup_k b_k \,\middle|\, a_{n'}\right) = \frac{w\left(\bigcup_k b_k,\ a_{n'}\right)}{w\left(a_{n'}\right)} = \frac{w\left(\bigcup_k \left(b_k,\ a_{n'}\right)\right)}{w\left(a_{n'}\right)} =$$

$$= \frac{\sum_k w\left(b_k,\ a_{n'}\right)}{w\left(a_{n'}\right)} = \sum_k \frac{w\left(b_k,\ a_{n'}\right)}{w\left(a_{n'}\right)} = \sum_k w\left(b_k \,\middle|\, a_{n'}\right).$$

Таким образом классическая условная вероятность **аддитивна** по второму аргументу.

Проверим аддитивность по первому аргументу. Очевидно, что аддитивности можно ожидать только в том случае, когда измерения значений спектра наблюдаемой A независимы, то есть когда $a_{n'} \cap a_{n''} = \varnothing$ для любых разрешенных значений n' и n''. Тогда:

$$w\left(b_{k'} \,\middle|\, \bigcup_n a_n\right) = \frac{w\left(b_{k'},\ \bigcup_n a_n\right)}{w\left(\bigcup_n a_n\right)} = \frac{w\left(\bigcup_n \left(b_{k'},\ a_n\right)\right)}{w\left(\bigcup_n a_n\right)} =$$

$$= \frac{\sum\limits_n w\left(b_{k'},\, a_n\right)}{w\left(\bigcup\limits_n a_n\right)} = \sum_n \frac{w\left(a_n\right)}{w\left(\bigcup\limits_{\tilde n} a_{\tilde n}\right)} \frac{w\left(b_{k'},\, a_n\right)}{w\left(a_n\right)} = \sum_n \frac{w\left(a_n\right)}{w\left(\bigcup\limits_{\tilde n} a_{\tilde n}\right)} w\left(b_{k'} \mid a_n\right).$$

Из данной формулы видно, что классическая условная вероятность при условии $a_{n'} \cap a_{n''} = \varnothing$ так же аддитивна и по первому аргументу (с очевидными весовыми множителями).

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 событий, удовлетворяющих условию $b_{k'} \cap b_{k''} = \varnothing$ (а это именно наш случай!) принимается интуитивно ясное определение проектора на множество как суммы проекторов на каждый элемент этого множества, то есть

$$\hat{P}^{(B)}\left(\bigcup_k b_k\right) \equiv \sum_k \hat{P}_k^{(B)}.$$

Тогда при помощи формулы фон Неймана для второго аргумента условной вероятностиполучаем:

$$w\left(\bigcup_k b_k \,\middle|\, a_{n'}\right) = \frac{\mathbf{Tr}\left(\left(\sum_k \hat{P}_k^{(B)}\right)\hat{P}_{n'}^{(A)}\hat{\rho}\hat{P}_{n'}^{(A)}\right)}{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_{n'}^{(A)}\,\hat{\rho}\right)} = \frac{\sum_k \mathbf{Tr}\left(\hat{P}_k^{(B)}\hat{P}_{n'}^{(A)}\hat{\rho}\hat{P}_{n'}^{(A)}\right)}{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_{n'}^{(A)}\,\hat{\rho}\right)} =$$

$$= \sum_k \frac{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_k^{(B)}\hat{P}_{n'}^{(A)}\hat{\rho}\hat{P}_{n'}^{(A)}\right)}{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_{n'}^{(A)}\,\hat{\rho}\right)} = \sum_k w\left(b_k \,\middle|\, a_{n'}\right).$$

Таким образом, в силу линейности операции взятия следа квантовая условная вероятность аддитивна по второму аргументу, точно так же как и классическая условная вероятность.

По первому аргументу квантовая условная вероятность НЕ является аддитивной величиной.

Для иллюстрации этого утверждения рассмотрим пример: в двумерном гильбертовом пространстве имеется базис $|\, a_1 \,\rangle$ и $|\, a_2 \,\rangle$ из собственных векторов наблюдаемой A и базис $|\, b_1 \,\rangle$ и $|\, b_2 \,\rangle$ собственных векторов наблюдаемой B. Вычислим условную вероятность $w\left(b_{k'} | a_1 \oplus a_2\right)$ по формуле фон Неймана, если до проведения измерений квантовая система находилась в состоянии

$$|\, \psi \,\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\, |\, a_1 \,\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\, |\, a_2 \,\rangle.$$

Определим $\hat{\rho} = |\, \psi \,\rangle \langle\, \psi \,|$. Имеем:

$$w\left(b_{k'} | a_1 \oplus a_2\right) = \frac{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(B)}_{k'}\left(\hat{P}^{(A)}_1 + \hat{P}^{(A)}_2\right)\hat{\rho}\left(\hat{P}^{(A)}_1 + \hat{P}^{(A)}_2\right)\right)}{\mathbf{Tr}\left(\left(\hat{P}^{(A)}_1 + \hat{P}^{(A)}_2\right)\hat{\rho}\right)} = \mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(B)}_{k'}\hat{\rho}\right),$$

поскольку $\hat{P}^{(A)}_1 + \hat{P}^{(A)}_2 = \hat{1}$ и $\mathbf{Tr}\hat{\rho} = 1$. При этом измерению $a_1 \oplus a_2$ согласно проведенным выше рассуждениям мы сопоставили проекционный оператор $\hat{P}_{a_1 \oplus a_2} = \hat{P}^{(A)}_1 + \hat{P}^{(A)}_2$. Можно написать более сложные примеры, в которых $\hat{P}_{a_1 \oplus a_2} \neq \hat{1}$. Однако они принципиально не изменят свойства квантовой условной вероятности.

Простые вычисления дают: $w(a_1 \oplus a_2) = 1$, $w(a_1) = \frac{1}{3}$ **и** $w(a_2) = \frac{2}{3}$.

С учетом равенства $\hat{P}_1^{(A)} \hat{P}_2^{(A)} = 0$ **(аналог условия** $a_1 \cap a_2 = \varnothing$ **для классической условной вероятности) при формальном (!!!) применении условия аддитивности по первому аргументу к квантовой условной вероятности фон Неймана имеем:**

$$\sum_n \frac{w\left(a_n\right)}{w\left(\bigcup\limits_{\tilde{n}} a_{\tilde{n}}\right)} w\left(b_{k'} \mid a_n\right) = \sum_n \frac{w(a_n)}{w\left(\bigcup\limits_{\tilde{n}} a_{\tilde{n}}\right)} \frac{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_{k'}^{(B)} \hat{P}_n^{(A)} \hat{\rho} \hat{P}_n^{(A)}\right)}{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_n^{(A)}\, \hat{\rho}\right)} =$$

$$= \frac{1}{3} \frac{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_{k'}^{(B)} \frac{1}{3}\, \hat{P}_1^{(A)}\right)}{\mathbf{Tr}\left(\frac{1}{3} \hat{P}_1^{(A)}\right)} + \frac{2}{3} \frac{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_{k'}^{(B)} \frac{2}{3}\, \hat{P}_2^{(A)}\right)}{\mathbf{Tr}\left(\frac{2}{3} \hat{P}_2^{(A)}\right)} =$$

$$= \mathbf{Tr}\left(\hat{P}_{k'}^{(B)} \left(\frac{1}{3}\, \hat{P}_1^{(A)} + \frac{2}{3}\, \hat{P}_2^{(A)}\right)\right) \neq \mathbf{Tr}\left(\hat{P}_{k'}^{(B)} \hat{\rho}\right).$$

Таким образом продемонстрирована неаддитивность квантовой условной вероятности по первому аргументу.

Таким образом можно сказать, что квантовая теория вероятностей отличается от классической и не подчиняется аксиоматике Колмогорова. Еще одно отличие квантовой и классической теорий вероятности будет рассмотрено в параграфе "Формула для полной вероятности в классической теории вероятностей и квантовая теория".

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 $\hat{\rho}_{n'}^{(A)}$. 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:

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

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

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

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 (в тайне от санитаров) управляет состоянием Вселенной? И что измерит Братециванушка, когда, наконец, доберется до лаборатории? Квантовая механика дает однозначные ответы на поставленные вопросы (см. выше). И эти ответы НЕ нуждаются в особой роли мозга (души, печени и левой пятки) любого (не)разумного наблюдателя!

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

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

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

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

Вопрос: как обобщить проекционный постулат Борна на смешанные состояния?

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

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

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

где $\hat{P}_{n'}^{(A)}$ – проектор на собственный вектор $|\,a_{n'}\,\rangle$ оператора $\hat{A}$, отвечающий собственному значению $a_{n'}$.

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

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

Note: заметим, что так сформулированные 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, однако 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.

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 механизм 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

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

Матрица плотности всей системы $\hat{\rho} = \left|\,\Psi^-\,\right\rangle\left\langle\,\Psi^-\,\right|$. 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 гласит, что на уровне макроприборов никакие измерения наблюдаемых, связанных только с подсистемой A, не влияют на результат измерения любых наблюдаемых, которые связаны только с подсистемой B.

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

Тогда для теоремы Эберхарда можно дать еще одну эквивалентную формулировку: НКМ **запрещает нелокальные корреляции** между состояниями макроприборов $D_\alpha^{(A)}$ и $D_\beta^{(B)}$. В терминах условных вероятностей данное утверждение можно записать следующим образом:

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

и

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

В более общем контексте изучения корреляций данное условие носит название **"No-signaling Condition"**.

Особенностью данных формул является то, что в первой из них после суммирования по j пропадает зависимость не только от от состояния $g_j^{(B)}$ микросистемы B (что естественно и ожидаемо), но и от состояния $D_\beta^{(B)}$ макроприбора, который производит измерения в микросистеме B. Во второй формуле после суммирования по i уходит зависимость не только от $f_i^{(A)}$, но и от $D_\alpha^{(A)}$. Абсолютно нетривиальный результат!

Если бы локальность на **макроуровне** была бы нарушена (то есть имели бы место нелокальные корреляции между состояниями $D_\alpha^{(A)}$ и $D_\beta^{(B)}$ двух различных макроприборов), то изменяя, например, состояние макроприбора $D_\beta^{(B)}$, мы могли бы мгновенно влиять на результат измерения в подсистеме A и, тем самым, передавать информацию быстрее скорости света.

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

Докажем теорему Эберхарда. Сначала выполним измерение наблюдаемой F_A в подсистеме A. Для каждого отдельного измерения случайным образом будет выпадать одно из значений $\{f_i^{(A)}\}$ спектра наблюдаемой F_A. Вероятность этому значению оказаться равным $f_{i'}^{(A)}$ при условии, что макроприбор D_A будет находится в состоянии $D_\alpha^{(A)}$, дается формулой

$$w(f_{i'}^{(A)}|D_\alpha^{(A)}) = \mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(A)}_{f_{i'}\,D_\alpha}\,\hat{\rho}\right),$$

где $\hat{P}^{(A)}_{f_i\,D_\alpha} = \left|\, f_i^{(A)},\, D_\alpha^{(A)} \right\rangle \left\langle f_i^{(A)},\, D_\alpha^{(A)} \right|$ – проектор на состояние $\left|\, f_i^{(A)},\, D_\alpha^{(A)} \right\rangle$. Согласно правилу Людерса всякий раз после измерения наблюдаемой F_A, матрицу плотности квантовой системы можно записать в виде:

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

Теперь выполним измерение наблюдаемой G_B в подсистеме B. Вероятность найти значение $g_{j'}^{(B)}$ из спектра наблюдаемой G_B при условии, что состояние макроприбора D_B будет $D_\beta^{(B)}$, задается формулой фон Неймана:

$$w(g_{j'}^{(B)}|f_i^{(A)}, D_\alpha^{(A)}, D_\beta^{(B)}) = \mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(B)}_{g_{j'}\,D_\beta}\,\hat{\rho}^{(out)}\right) = \frac{\mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(B)}_{g_{j'}\,D_\beta}\,\hat{P}^{(A)}_{f_i\,D_\alpha}\,\hat{\rho}\;\hat{P}^{(A)}_{f_i\,D_\alpha}\right)}{w(f_i^{(A)}|D_\alpha^{(A)})},$$

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

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

$$w(g_j^{(B)}, f_i^{(A)} | D_\beta^{(B)}, D_\alpha^{(A)}) = w(f_i^{(A)} | D_\alpha^{(A)}) w(g_j^{(B)} | f_i^{(A)}, D_\beta^{(B)}, D_\alpha^{(A)}) =$$

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

При выводе данной формулы мы воспользовались определением совместной вероятности через условную (см. параграф "Условная и совместная вероятности в классической и квантовой теориях"):

$$w(b, a) \ = \ w(b|a)\, w(a),$$

где аргумент $b = g_j^{(B)} | D_\beta^{(B)}$ и аргумент $a = f_i^{(A)} | D_\alpha^{(A)}$.

Формулу для $w(g_j^{(B)}, f_i^{(A)} | D_\beta^{(B)}, D_\alpha^{(A)})$ можно упростить если воспользоваться тем, что проекторы $\hat{P}^{(A)}_{\mathbf{f_i} D_\alpha}$ и $\hat{P}^{(B)}_{\mathbf{g_j} D_\beta}$ действуют в разных гильбертовых пространствах. Поэтому эти проекторы должны коммутировать между собой.

Принимая во внимание цикличность операции взятия следа и условие ${\hat{P}^{(A)}_{f_i D_\alpha}}^2 = \hat{P}^{(A)}_{f_i D_\alpha}$ для искомой вероятности находим:

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

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

Если каждое отдельное измерение наблюдаемой F_A носит случайный характер, то при измерении какого-то фиксированного значения $g_{j'}^{(B)}$ спектра наблюдаемой G_B мы не можем знать, в каком состоянии находится подсистема A. Следовательно необходимо просуммировать по всем возможным состояниям подсистемы A ($=$ по всем возможным значениям i спектра наблюдаемой F_A). В результате такого суммирования должна получиться вероятность измерения значения $g_{j'}^{(B)}$ наблюдаемой G_B при условии, что макроприбор D_B находится в состоянии $D_\beta^{(B)}$ и макроприбор D_A находится в состоянии $D_\alpha^{(A)}$.

Воспользовавшись аддитивностью квантовой условной вероятности по второму аргументу (см. параграф "Аддитивность условной вероятности в классическом и квантовом случаях") и выполняя суммирование находим:

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

$$= \mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(B)}_{g_j D_\beta} \left(\sum_i \hat{P}^{(A)}_{f_i D_\alpha}\right) \hat{\rho}\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(B)}_{g_j D_\beta}\ \hat{1}\ \hat{\rho}\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(B)}_{g_j D_\beta}\ \hat{\rho}\right) =$$

$$= w(g_j^{(B)}|D_\beta^{(B)}),$$

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

Таким образом из доказательства теоремы Эберхарда следует, что локальность НКМ на макроуровне обусловлена принципиальной случайностью результата каждого отдельного измерения на микроуровне или из квантовомеханической концепции описания состояния микросистем в терминах вероятностей (что одно и то же).

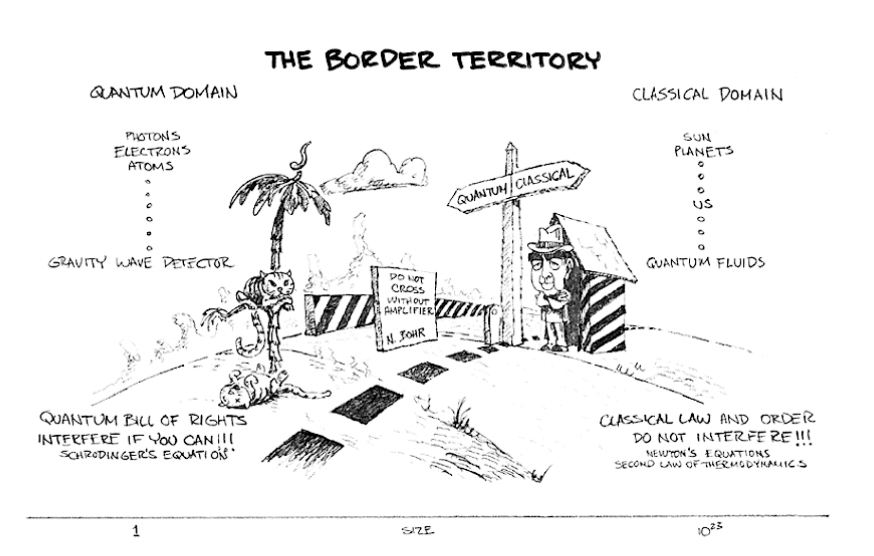
Теорема Эберхарда и Копенгагенская интерпретация квантовой механики

Одно из главных возражений против Копенгагенской интерпретации НКМ заключается в том, 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 тоже 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 не достаточно, чтобы обеспечить локальность НКМ на макроуровне. Необходимо сочетать эту теорему с теоремой о невозможности клонирования произвольного квантового состояния.

Интересный вопрос: если машина для клонирования есть у Братцаиванушки, но ее нет у Аленушки, то можно ли в этом случае придумать алгоритм для сверхсветовой передачи сигнала с Проксимы на Землю?

Еще более интересный вопрос: если не требовать точного клонирования, а удовлетворится приближенным, то можно ли в этом случае попытаться наладить "нечеткую сверхсветовую коммуникацию", которой при соблюдении определенных правил будет вполне достаточно для передачи осмысленной информации?

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

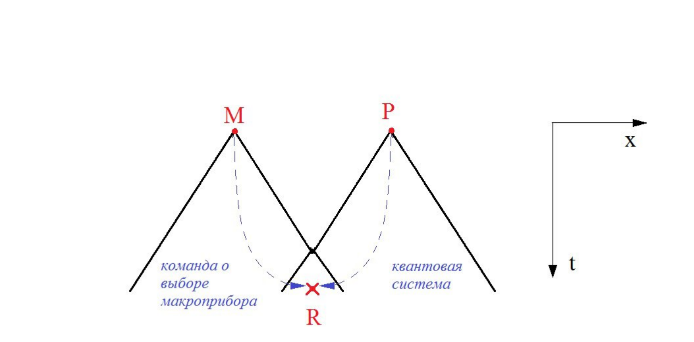
$$\hat{\rho}'_n \sim \left\langle \sum_\ell W_{\ell,\, n}(M\,|\,P)\, \hat{\rho}'_{\ell\, n} \right\rangle_P = \hat{P}_n^{(A)} \left\langle \sum_\ell \frac{W_{\ell,\, n}(M\,|\,P)}{w_{\ell,\, n}(M)}\, \hat{\rho}_\ell \right\rangle_P \hat{P}_n^{(A)},$$

где $\langle \ldots \rangle_P$ означает усреднение по всем возможным процедурам приготовления P.

Сравнение обоих 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 команду для "R", какую наблюдаемую в приготовленной микросистеме следует измерять. В такой конфигураци 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 $\sum\limits_k \hat{P}_{\varphi_{\boldsymbol{k}}}$. Тогда формула для матрицы плотности суперпозиции состояний модифицируется следующим образом:

$$\hat{\rho} = W_1\hat{\rho}_1 + W_2\hat{\rho}_2 + \mathbf{const}\left(\hat{\rho}_2\left(\sum_k \hat{P}_{\varphi_{\boldsymbol{k}}}\right)\hat{\rho}_1 + \hat{\rho}_1\left(\sum_k \hat{P}_{\varphi_{\boldsymbol{k}}}\right)\hat{\rho}_2\right).$$

Если усреднение происходит по всем возможным фазам, то $\sum\limits_k \hat{P}_{\varphi_{\boldsymbol{k}}} = \hat{1}_\varphi$. В силу ортогональности состояний $|\,\psi_1\,\rangle$ и $|\,\psi_2\,\rangle$:

$$\hat{\rho}_2\left(\sum_k \hat{P}_{\varphi_{\boldsymbol{k}}}\right)\hat{\rho}_1 = \hat{\rho}_2\hat{1}_\varphi\hat{\rho}_1 = \hat{\rho}_2\hat{\rho}_1 = |\,\psi_2\,\rangle\langle\,\psi_2\,|\,\psi_1\,\rangle\langle\,\psi_1\,| = 0.$$

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.

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 матрицы плотности (или проекционных операторов) формулировка принципа, эквивалентного принципу суперпозиции, становится не столь простой и элегантной.

Постулат N3': Пусть микросистема, находящая в чистом состоянии $|\,\psi\,\rangle$, описывается матрицей плотности $\hat{\rho} = |\,\psi\,\rangle\,\langle\,\psi\,|$. И пусть она в результате измерения микросистема может переходить в одно из макроскопически различных чистых состояний, каждому из которых соответствует матрица плотности $\hat{\rho}_i$. Тогда $\hat{\rho}$ можно представить в виде:

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

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

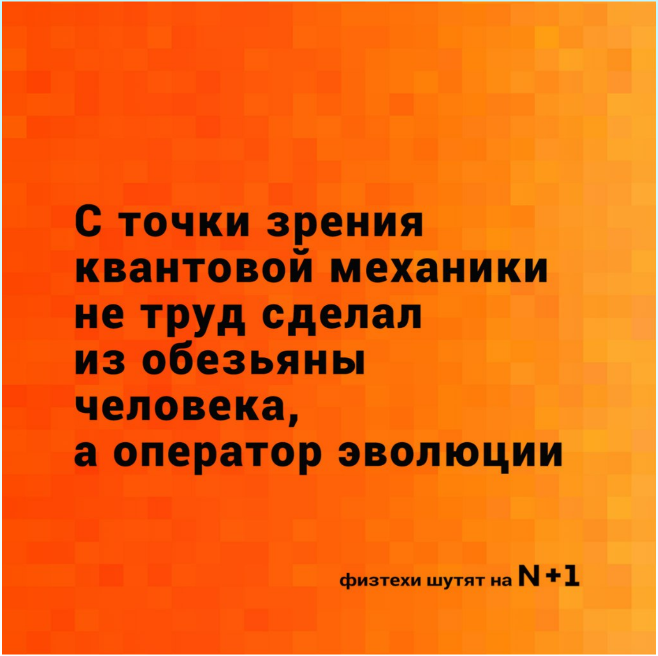
Из формального определения запутанного состояния (см. параграф "Запутанные состояния") абсолютно ясно, что понятие запутанности является результатом объединения концепции прямого произведения гильбертовых пространств и принципа суперпозиции.

Поскольку в принципе суперпозиции основную роль играет абсолютная фаза между различными членами разложения исходного состояния, 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).

Также очевидно, что только принципа суперпозиции не достаточно. Для возникновения запутанности необходимо иметь две и более микросистемы, которые в какой-то момент времени должны провзаимодействовать между собой (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 рекурентное соотношение**

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

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

Используем это соотношение пошагово.

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

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

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

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

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

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

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

получается следующее решение:

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

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

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

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

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

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

Тогда среднее значение любой наблюдаемой A можно вычислить по формуле:

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

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

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 в координатном представлении

Для практических вычислений запишем уравнение

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

в координатном представлении. Начнем с одномерного случая:

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

Определим матрицу плотности в координатном представлении как:

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

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

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

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

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

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

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

Аналогично для второго матричного элемента находим:

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

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

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

Обобщение на трехмерный случай напишите самостоятельно.

Матрица плотности свободной частицы

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

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

Данное дифференциальное уравнение допускает разделение переменных в виде:

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

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

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

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

где матрица плотности в координатном представлении

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

Подставим эту матрицу плотности в уравнение фон Неймана:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Свойство в) для матрицы плотности соблюдено, поскольку:

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

Обобщенная формула фон Неймана

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\hat{\rho}^{(A)}_{n'} = \frac{\hat{P}^{(A)}_{n'}\,\hat{\rho}\,\hat{P}^{(A)}_{n'}}{w_{n'}},$$

где вероятность измерения значения $a_{n'}$ из спектра наблюдаемой A есть $w_{n'} = \mathbf{Tr}\left(\hat{P}^{(A)}_{n'}\,\hat{\rho}\right)$ и $\sum\limits_n \hat{P}^{(A)}_n = \hat{1}$.

Обобщенное правило Людерса записывается как

$$\hat{\rho}_{\alpha'} = \frac{\hat{M}_{\alpha'}\,\hat{\rho}\,\hat{M}^{\dagger}_{\alpha'}}{w_{\alpha'}},$$

где вероятность результата измерения, которое описывается при помощи оператора измерения $\hat{M}_{\alpha'}$, есть $w_{\alpha'} = \mathbf{Tr}\left(\hat{M}^{\dagger}_{\alpha'}\hat{M}_{\alpha'}\,\hat{\rho}\right)$ и операторы $\hat{M}_\alpha$ удовлетворяют условию полноты $\sum\limits_\alpha \hat{M}^{\dagger}_\alpha\,\hat{M}_\alpha = \hat{1}$.

Формула фон Неймана найти вероятность измерения значения $b_{k'}$ из спектра наблюдаемой B при условии, что до этого было измерено значение $a_{n'}$ спектра наблюдаемой A записывается как

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

Обобщенная формула фон Неймана задает вероятность исхода измерения $\hat{N}_{\beta'}$ при условии, что до этого было проведено измерение $\hat{M}_{\alpha'}$:

$$w\left(\beta' \,|\, \alpha'\right) = \frac{\mathbf{Tr}\left(\hat{N}_{\beta'}\hat{M}_{\alpha'}\,\hat{\rho}\,\hat{M}^{\dagger}_{\alpha'}\hat{N}^{\dagger}_{\beta'}\right)}{w_{\alpha'}} = \frac{\mathbf{Tr}\left(\hat{N}_{\beta'}\hat{M}_{\alpha'}\,\hat{\rho}\,\hat{M}^{\dagger}_{\alpha'}\hat{N}^{\dagger}_{\beta'}\right)}{\mathbf{Tr}\left(\hat{M}^{\dagger}_{\alpha'}\hat{M}_{\alpha'}\,\hat{\rho}\right)}$$

и выполняется условие полноты $\sum\limits_{\beta}\hat{N}^{\dagger}_{\beta}\,\hat{N}_{\beta} = \hat{1}$ 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–операторов $\{\hat{E}_\beta\}$ (см. параграф "Понятие о POVM–операторах"). 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

$$\hat{\rho} = \sum W(\ell)\,|\,\ell\,\rangle\langle\,\ell\,|.$$

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 $W(\alpha) = \sum_\ell W(\alpha\,|\,\ell)\, W(\ell)$.

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 какай-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**

$$W_{i'} = \sum_{i''} W(i' \mid i'')\, w_{i''},$$

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

$$\begin{aligned}
\mathbf{Tr}\left(\hat{M}^{\dagger}_{i'}\, \hat{M}_{i'}\, \hat{\rho}\right) &= W_{i'} = \sum_{i''} W(i' \mid i'')\, \mathbf{Tr}\left(\hat{P}_{i''}\, \hat{\rho}\right) = \\
&= \mathbf{Tr}\left(\left(\sum_{i''} W(i' \mid i'')\, \hat{P}_{i''}\right) \hat{\rho}\right),
\end{aligned}$$

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 преодалеет и это расстояние, то черепаха будет опережать его на 1 мм. И так далее. Таким образом, черепаха, пусть на микроскопическое расстояние, но всегда будет впереди Ахилла!

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

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

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

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

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

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

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

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 во внутрь, чтобы узнать, закипела ли вода.

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

Аналогия с частым измерением состояния квантовой системы налицо.

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 $w(h)$:

$$w(h) \,=\, \mathbf{Tr}\,\left(\hat{P}_n\,\hat{P}_{n-1}\,\ldots\,\hat{P}_1\,\hat{\rho}\,\hat{P}_1\,\ldots\,\hat{P}_{n-1}\,\hat{P}_n\right).$$

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.

Формула Ааронова–Бергмана–Лебовица

Применяя обобщенное правило фон Неймана нетрудно найти вероятность того, что система, которая находилась в состоянии $\hat{\rho}$, после выполнения измерения $\hat{M}_{\alpha'}$ перешла в состояние $\hat{\sigma}$:

$$w\left(\sigma \,|\, \alpha' \,|\, \rho\right) = \frac{\mathbf{Tr}\left(\hat{\sigma}\,\hat{M}_{\alpha'}\,\hat{\rho}\,\hat{M}^{\dagger}_{\alpha'}\right)}{\mathbf{Tr}\left(\hat{M}^{\dagger}_{\alpha'}\hat{M}_{\alpha'}\,\hat{\rho}\right)}.$$

Однако часто бывает необходимо решить другую задачу. Пусть в результате измерения, которое описывается известным набором операторов измерения $\{\hat{M}_{\alpha}\}$, система перешла из состояния $\hat{\rho}$ в состояние $\hat{\sigma}$. Какова вероятность $w\left(\alpha' \,|\, \rho \,|\, \sigma\right)$ того, что при этом было выполнено конкретное измерение $\hat{M}_{\alpha'}$ из набора измерений $\{\hat{M}_{\alpha}\}$?

Ответ на данный вопрос может дать формула Ааронова–Бергмана–Лебовица, вывод которой основывается на предположении, что в квантовой механике справедлива теорема Байеса. Спорность такого предположения обсуждалась в параграфах "Условная и совместная вероятности в классической и квантовой теориях", "Формула для полной вероятности в классической теории вероятностей и квантовая теория" и "Теорема Байеса с точки зрения обобщенного правила Людерса".

Тем не менее предположим, что теорема Байеса справедлива в квантовой физике. Пусть X_α – событие, которое соответствует тому, что было выполнено измерение $\hat{M}_\alpha$, если до измерения система находилась в состоянии $\hat{\rho}$. То есть $X_\alpha = \alpha \,|\, \rho$. Событие Y отвечает тому, что система оказалась в состоянии $\hat{\sigma}$, то есть $Y = \sigma$. Тогда по теореме Байеса можем записать, что

$$w\,(\alpha' \,|\, \rho \,|\, \sigma) = w\,(X_{\alpha'} \,|\, Y) = \frac{w\,(Y \,|\, X_{\alpha'})\; w(X_{\alpha'})}{w(Y)}.$$

Согласно обобщенному правилу Людерса

$$\hat{\rho}_{\alpha'} = \frac{\hat{M}_{\alpha'}\, \hat{\rho}\, \hat{M}^{\dagger}_{\alpha'}}{w(X_{\alpha'})},$$

где $w(X_{\alpha'}) = w(\alpha' \,|\, \rho) = \mathbf{Tr}\left(\hat{M}^{\dagger}_{\alpha'} \hat{M}_{\alpha'}\, \hat{\rho}\right)$, хотя последняя формула напрямую не нужна для решения задачи. Далее при помощи определения степени совпадения двух матриц плотности, имеем:

$$\begin{aligned} w\,(Y \,|\, X_{\alpha'})\; w(X_{\alpha'}) &= \mathbf{Tr}\,(\hat{\sigma}\, \hat{\rho}_{\alpha'})\; w(X_{\alpha'}) = \frac{\mathbf{Tr}\left(\hat{\sigma}\, \hat{M}_{\alpha'}\, \hat{\rho}\, \hat{M}^{\dagger}_{\alpha'}\right)}{w(X_{\alpha'})}\, w(X_{\alpha'}) = \\ &= \mathbf{Tr}\left(\hat{\sigma}\, \hat{M}_{\alpha'}\, \hat{\rho}\, \hat{M}^{\dagger}_{\alpha'}\right). \end{aligned}$$

Если измерения $\{\hat{M}_\alpha\}$ являются независимыми событиями, то

$$w(Y) = \sum_\alpha w\,(Y\,|\,X_\alpha)\; w(X_\alpha) = \sum_\alpha \mathbf{Tr}\left(\hat{\sigma}\,\hat{M}_\alpha\,\hat{\rho}\,\hat{M}_\alpha^\dagger\right).$$

После подстановки всех найденных вероятностей в формулу Байеса, окончательно получаем

$$w\,(\alpha'\,|\,\rho\,|\,\sigma) = \frac{\mathbf{Tr}\left(\hat{\sigma}\,\hat{M}_{\alpha'}\,\hat{\rho}\,\hat{M}_{\alpha'}^\dagger\right)}{\sum\limits_\alpha \mathbf{Tr}\left(\hat{\sigma}\,\hat{M}_\alpha\,\hat{\rho}\,\hat{M}_\alpha^\dagger\right)}.$$

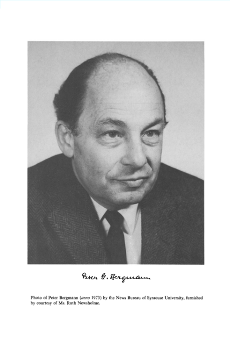
Это и есть формула Ааронова–Бергмана–Лебовица. В литературе более известен другой вариант формулы, когда состояния $\hat{\rho}$ и $\hat{\sigma}$ являются чистыми состояниями, а операторы измерения $\hat{M}_\alpha$ – проекционными операторами. Чтобы получить данную формулу, положим $\hat{\rho} = |\,\psi\,\rangle\,\langle\,\psi\,|$, $\hat{\sigma} = |\,\varphi\,\rangle\,\langle\,\varphi\,|$ и $\hat{M}_\alpha = \hat{P}_{a_n} \equiv |\,a_n\,\rangle\,\langle\,a_n\,|$. Тогда

$$w\,(a_{n'}\,|\,\psi\,|\,\varphi) = \frac{\left|\left\langle\,\varphi\,\middle|\,\hat{P}_{a_{n'}}\,\middle|\,\psi\,\right\rangle\right|^2}{\sum\limits_n \left|\left\langle\,\varphi\,\middle|\,\hat{P}_{a_n}\,\middle|\,\psi\,\right\rangle\right|^2}.$$

Интересное обобщение формулы Ааронова–Бергмана–Лебовица можно получить для POVM–измерений. Пусть измерение $\{\alpha\}$ задается набором POVM–операторов $\{\hat{E}_\alpha\}$. Тогда вероятность в результате измерения $\hat{E}_{\alpha'}$ обнаружить наблюдаемую A в состоянии $a_{i'}$ дается выражением

$$w\left(a_{i'}\,|\,\rho\,|\,\alpha'\right) = \frac{\mathbf{Tr}\left(\hat{E}_{\alpha'}\,\hat{P}_{a_{i'}}\,\hat{\rho}\,\hat{P}_{a_{i'}}\right)}{\sum\limits_j \mathbf{Tr}\left(\hat{E}_{\alpha'},\hat{P}_{a_j}\,\hat{\rho}\,\hat{P}_{a_j}\right)}.$$

Считается, что формула Ааронова–Бергмана–Лебовица впервые была получена в работе Y. Aharonov, P.G. Bergmann and J.L. Lebowitz, Phys.Rev. 134, pp.B1410-B1416 (1964). Но еще в 1939 году советский физик ак. Л.И. Мандельштам в пятой лекции своего курса "Лекции по основам квантовой механики (теория косвенных измерений)" выводит данную формулу, опираясь на теорему Байеса (см. Л.И. Мандельштам, "Полное собрание трудов", т. V под редакцией ак. М.А. Леонтовича, "Издательство АН СССР", 1950 г., стр.399–400, формулы (82) и (83)).



П.Г. Бергман

24.03.1915 – 19.10.2002
США
Institute for
Advanced Study

Л.И. Мандельштам

04.05.1879 – 22.11.1944
СССР
проф. МГУ
им. М.В.Ломоносова

Дж.Л. Лебовиц

род. 10.05.1930
США
president New York
Academy of Sciences

Формула Ааронова–Бергмана-Лебовица, проективные измерения и "квантовая стрела времени"

Прежде всего заметим, что формула

$$w\left(P'\,|\,\psi\,|\,\varphi\right) \;=\; \frac{\left|\left\langle\, \varphi \,\middle|\, \hat{P}' \,\middle|\, \psi \,\right\rangle\right|^2}{\sum\limits_P \left|\left\langle\, \varphi \,\middle|\, \hat{P} \,\middle|\, \psi \,\right\rangle\right|^2}$$

симметрична относительно замены $|\,\psi\,\rangle \leftrightarrow |\,\varphi\,\rangle$. Это позволяет утверждать, что переход из фиксированного начального состояния $|\,i\,\rangle$ в фиксированное конечное состояние $|\,f\,\rangle$ ОБРАТИМ, даже если в некоторый момент времени t (такой, что $t_i < t < t_f$) над микросистемой произвели известное проективное измерение $\hat{P}'$. Действительно, пусть $|\,\psi\,\rangle = \hat{U}(t,\,t_i)\,|\,i\,\rangle$ и пусть $|\,\varphi\,\rangle = \hat{U}(t,\,t_f)\,|\,f\,\rangle = \hat{U}^{\dagger}(t_f,\,t)\,|\,f\,\rangle$. Тогда

$$w_{t_i \to t \to t_f} = \frac{\left|\left\langle\, f \,\middle|\, \hat{U}(t_f,t)\,\hat{P}'\,\hat{U}(t,t_i) \,\middle|\, i \,\right\rangle\right|^2}{\sum\limits_P \left|\left\langle\, f \,\middle|\, \hat{U}(t_f,t)\,\hat{P}\,\hat{U}(t,t_i) \,\middle|\, i \,\right\rangle\right|^2} = \frac{\left|\left\langle\, i \,\middle|\, \hat{U}^{\dagger}(t,t_i)\,\hat{P}'^{\dagger}\,\hat{U}^{\dagger}(t_f,t) \,\middle|\, f \,\right\rangle\right|^2}{\sum\limits_P \left|\left\langle\, i \,\middle|\, \hat{U}^{\dagger}(t,t_i)\,\hat{P}^{\dagger}\,\hat{U}^{\dagger}(t_f,t) \,\middle|\, f \,\right\rangle\right|^2} =$$

$$= \frac{\left|\left\langle\, i \,\middle|\, \hat{U}(t_i,\, t)\, \hat{P}'\, \hat{U}(t,\, t_f) \,\middle|\, f \,\right\rangle\right|^2}{\sum\limits_{P} \left|\left\langle\, i \,\middle|\, \hat{U}(t_i,\, t)\, \hat{P}\, \hat{U}(t,\, t_f) \,\middle|\, f \,\right\rangle\right|^2} = w_{t_f \to t \to t_i}.$$

При доказательстве использовалась эрмитовость проекционных операторов $\hat{P}$. Данное доказательство элементарно обобщается на любое количество известных промежуточных проективных измерений.

Равенство $w_{t_i \to t \to t_f} = w_{t_f \to t \to t_i}$ означает, что при помощи проективного измерения НЕВОЗМОЖНО создать квантовую стрелу времени, хотя редукция вектора состояния в процессе измерения и является необратимой процедурой. В мире только с проективными измерениями для установления стрелы времени необходимо привлекать дополнительные соображения. Например, термодинамические. В параграфе "Декогеренция и парадокс кота Шредингера" в результате выполнения измерения над состоянием микросистемы склянка с ядом может разбиться и кот может умереть. В этом случае возникает термодинамическая необратимость процедуры измерения, но на макроскопическом уровне.

На микроскопическом уровне нарушение T–инвариантности возникает в электрослабой теории за счет механизма CP–нарушения, который не сводится к процедуре проективного измерения.

Оператор производной оператора по времени для смешанных состояний

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

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

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

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

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

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

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

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

Тогда:

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

Отсюда видно, что

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

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

Свойства интегралов движения

Пусть оператор $\hat{A}^{(S)}$ явно не зависит от времени (как это обычно бывает в представлении Шредингера), т.е. пусть $\partial\hat{A}^{(S)}/\partial t \;=\; 0$. Тогда оператор $\hat{A}^{(S)}$ называется интегралом движения, если

$$\left(\frac{d\hat{A}}{dt}(t)\right)^{(S)} \;=\; 0.$$

Из параграфа "Производная оператора по времени для смешанных состояний" сразу следует, что для интегралов движения

$$\left[\hat{H}^{(S)},\,\hat{A}^{(S)}\right] \;=\; 0.$$

Менее очевидно, что в этом случае

$$\left[\hat{A}^{(S)},\,\hat{\rho}^{(S)}(t)\right] \;=\; 0.$$

Докажем последнее утверждение. Имеем:

$$0 \;=\; \left\langle\,\left[\hat{H}^{(S)},\,\hat{A}^{(S)}\right]\,\right\rangle_{\rho} \;=\; \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}^{(S)}\;\left[\hat{H}^{(S)},\,\hat{A}^{(S)}\right]\right) \;=$$

$$=\;-\,\mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}^{(S)},\;\left[\hat{A}^{(S)}\,\hat{H}^{(S)}\right]\right) \;=\; \mathbf{Tr}\left(\left[\hat{A}^{(S)},\,\hat{\rho}^{(S)}\right]\;\hat{H}^{(S)}\right).$$

Поскольку $\hat{H}^{(S)} \neq 0$, то $\left[\hat{A}^{(S)},\,\hat{\rho}^{(S)}(t)\right] \;=\; 0$, что и требовалось доказать.

Часть 5

ОПИСАНИЕ ОТКРЫТЫХ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ

"Shut up and calculate!" ("Заткнись и вычисляй!").
Так говорили то ли Поль Дирак, то ли Вольфганг Паули, то ли Энрико Ферми, а, может быть, даже Ричард Фейнман. Никто точно уже не помнит...

Распад нестабильной микросистемы

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Квантовое уравнение Лиувилля для открытых систем

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

и

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

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

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

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

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

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

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

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

Эволюция матрицы плотности открытых квантовых систем. Общий подход

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

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

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

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

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

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

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

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}_A^{(S)}}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial \mathbf{Tr}_B \hat{\rho}^{(S)}}{\partial t} = i\hbar \mathbf{Tr}_B \left(\frac{\partial \hat{\rho}^{(S)}}{\partial t} \right) =$$

$$= \mathbf{Tr}_B \left(\hat{H}^{(S)} \hat{\rho}^{(S)} - \hat{\rho}^{(S)} \hat{H}^{\dagger\,(S)} \right) = \mathbf{Tr}_B \left(\hat{H}_A^{(S)} \hat{\rho}^{(S)} - \hat{\rho}^{(S)} \hat{H}_A^{(S)} \right) +$$

$$+ \mathbf{Tr}_B \left(\hat{H}_B^{(S)} \hat{\rho}^{(S)} - \hat{\rho}^{(S)} \hat{H}_B^{(S)} \right) + \mathbf{Tr}_B \left(\hat{V}_{AB}^{(S)} \hat{\rho}^{(S)} - \hat{\rho}^{(S)} \hat{V}_{AB}^{\dagger\,(S)} \right).$$

Разберемся с первым слагаемым в правой части. Имеем:

$$\mathbf{Tr}_B \left(\hat{H}_A^{(S)} \hat{\rho}^{(S)} - \hat{\rho}^{(S)} \hat{H}_A^{(S)} \right) = \hat{H}_A^{(S)} \left(\mathbf{Tr}_B \hat{\rho}^{(S)} \right) - \left(\mathbf{Tr}_B \hat{\rho}^{(S)} \right) \hat{H}_A^{(S)} =$$

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

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

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

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

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

Поэтому окончательно для матрицы плотности подсистемы $''A''$ **находим следующее уравнение фон Неймана:**

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

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

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

Поскольку в рассматриваемое уравнение входят как $\hat{\rho}_A$**, так и** $\hat{\rho}$**, то это делает крайне неудобным применение данного уравнения на практике.**

Релаксационное уравнение для частицы в термостате

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

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

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

Решение этого уравнения по аналогии с решением для нестационарного уравнения Шредингера можно представить при помощи оператора эволюции: $\left|\psi_\ell^{(I)}(t)\right\rangle = \hat{S}(t,t_0)\left|\psi_{\ell\,0}^{(I)}\right\rangle$. Если для простоты дополнительно предположить, что оператор $\hat{V}_{AB}$ – эрмитов, то уравнение для вектора $\left\langle\psi_\ell^{(I)}(t)\right|$ запишется следующим образом:

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

с решением $\left\langle\psi_\ell^{(I)}(t)\right| = \left\langle\psi_{\ell\,0}^{(I)}\right|\hat{S}^\dagger(t,t_0)$. Оператор $\hat{S}(t,t_0)$ в рассматриваемом приближении должен быть унитарным.

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

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

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

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

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

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

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

Формально подставим интегральное уравнение в дифференциальное и получим:

$$\frac{\partial\,\hat\rho^{(I)}(t)}{\partial\,t} = -\frac{i}{\hbar}\left[\hat V^{(I)}_{AB}(t),\,\hat\rho_0\right] + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int\limits_{t_0}^{t} d\tau\,\left[\hat V^{(I)}_{AB}(t),\,\left[\hat V^{(I)}_{AB}(\tau),\,\hat\rho^{(I)}(\tau)\right]\right].$$

Предположим, что в моменты времени $t < t_0$ микросистема "A" и термостат "B" не взаимодействовали между собой. Тогда матрица плотности $\hat\rho_0$ факторизуется, то есть: $\hat\rho_0 = \hat\rho_{A\,0}\,\hat\rho_{B\,0}$. Когда $t \geq t_0$, термостат продолжает оставаться в состоянии термодинамического равновесия при температуре T. Поэтому с хорошей степенью точности можно заменить полную матрицу плотности $\hat\rho^{(I)}(t)$ ее факторизационным приближением, то есть: $\hat\rho^{(I)}(t) \approx \hat\rho^{(I)}_A(t)\,\hat\rho_{B\,0}$. С учетом сделанной замены, для матрицы плотности подсистемы "A" получаем следующее уравнение

$$\frac{\partial\,\hat\rho^{(I)}_A(t)}{\partial\,t} = \mathbf{Tr}_B\left(\frac{\partial\,\hat\rho^{(I)}(t)}{\partial\,t}\right) = -\frac{i}{\hbar}\,\mathbf{Tr}_B\left(\left[\hat V^{(I)}_{AB}(t),\,\hat\rho_{A\,0}\,\hat\rho_{B\,0}\right]\right) +$$
$$+\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int\limits_{t_0}^{t} d\tau\,\mathbf{Tr}_B\left[\hat V^{(I)}_{AB}(t),\,\left[\hat V^{(I)}_{AB}(\tau),\,\hat\rho^{(I)}_A(\tau)\,\hat\rho_{B\,0}\right]\right],$$

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

Операторы Крауса и представление Крауса для матрицы плотности открытой квантовой системы

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

Пусть в начальный момент времени $t = t_0$ подсистемы "A" и "B" не взаимодействовали друг с другом. Подсистема "A" находилась в смешанном состоянии $\hat{\rho}_{A\,0}$, а подсистема "B" в чистом (для простоты!) состоянии $\hat{\rho}_{B\,0} = \left|\, in^{(B)} \right\rangle \left\langle\, in^{(B)} \right|$.

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

$$\hat{\rho}_A^{(S)}(t) = \mathbf{Tr}_B \Big(\hat{\mathcal{U}}(t,\, t_0)\, \hat{\rho}_{A\,0}\, \hat{\rho}_{B\,0}\, \hat{\mathcal{U}}^\dagger(t,\, t_0)\Big) =$$
$$= \mathbf{Tr}_B \Big(\hat{\mathcal{U}}(t,\, t_0) \left|\, in^{(B)} \right\rangle \hat{\rho}_{A\,0} \left\langle\, in^{(B)} \right| \hat{\mathcal{U}}^\dagger(t,\, t_0)\Big).$$

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

$$\hat{\rho}_A^{(S)}(t) = \sum_{k'} \left\langle f_{k'}^{(B)} \middle| \hat{\mathcal{U}}(t, t_0) \middle| in^{(B)} \right\rangle \hat{\rho}_{A\,0} \left\langle in^{(B)} \middle| \hat{\mathcal{U}}^{\dagger}(t, t_0) \middle| f_{k'}^{(B)} \right\rangle =$$
$$= \sum_{k'} \hat{K}_{k'}(t)\, \hat{\rho}_{A\,0}\, \hat{K}_{k'}^{\dagger}(t).$$

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

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

$$\mathbf{Tr}_A\, \hat{\rho}_A^{(S)}(t) = 1 \Rightarrow \sum_{k'} \hat{K}_{k'}^{\dagger}(t)\, \hat{K}_{k'}(t) = \hat{1}.$$

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

Для неэрмитовых гамильтонианов и связанной с ними неунитарной эволюции (например, в случае рассмотренного выше радиоактивного распада) $\mathrm{Tr}_A\,\hat\rho_A^{(S)}(t) \le 1$. Соответствующим образом изменяется и условие полноты для операторов Крауса:

$$\sum_{k'} \hat K_{k'}^{\dagger}(t)\,\hat K_{k'}(t) \le \hat 1.$$

Представление Крауса является прямым обобщением применения правила Людерса для неселективных проективных измерений (см. параграф "Селективные и неселективные измерения")

$$\hat\rho' = \sum_n w_n\,\hat\rho_n^{(F_A)} = \sum_n w_n\,\frac{\hat P_n^{(F_A)}\,\hat\rho\,\hat P_n^{(F_A)}}{w_n} = \sum_n \hat P_n^{(F_A)}\,\hat\rho\,\hat P_n^{(F_A)}$$

и использования обобщенного правила Людерса для операторов измерения $\hat M_\alpha$ (см. параграф "Обобщенные правило Людерса и формула фон Неймана") в случае неселективных измерений

$$\hat\rho' = \sum_\alpha w_\alpha\,\hat\rho_\alpha = \sum_\alpha w_\alpha\,\frac{\hat M_\alpha\hat\rho\,\hat M_\alpha^{\dagger}}{w_\alpha} = \sum_\alpha \hat M_\alpha\hat\rho\,\hat M_\alpha^{\dagger}.$$

Представление Крауса для наблюдаемых

Вопрос: как в представлении Крауса преобразуются операторы наблюдаемых величин?

Ответ получается прямым вычислением. Пусть $\hat{A}$ – оператор наблюдаемой A в представлении Шредингера. Тогда:

$$\begin{aligned}\langle A \rangle_{\rho'} &= \mathbf{Tr}\left(\hat{A}\,\hat{\rho}'\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{A}\sum_{k'}\hat{K}_{k'}\,\hat{\rho}\,\hat{K}_{k'}^{\dagger}\right) = \sum_{k'}\mathbf{Tr}\left(\hat{A}\,\hat{K}_{k'}\,\hat{\rho}\,\hat{K}_{k'}^{\dagger}\right) = \\ &= \sum_{k'}\mathbf{Tr}\left(\hat{K}_{k'}^{\dagger}\,\hat{A}\,\hat{K}_{k'}\,\hat{\rho}\right) = \mathbf{Tr}\left(\left(\sum_{k'}\hat{K}_{k'}^{\dagger}\,\hat{A}\,\hat{K}_{k'}\right)\hat{\rho}\right) = \\ &= \mathbf{Tr}\left(\hat{A}'\,\hat{\rho}\right) = \langle A' \rangle_{\rho}.\end{aligned}$$

Таким образом в представлении Крауса эволюция операторов наблюдаемых дается выражением

$$\hat{A}' = \sum_{k'}\hat{K}_{k'}^{\dagger}\,\hat{A}\,\hat{K}_{k'}.$$

Очевидно, что такая запись является обобщением эволюции операторов в представлении Гейзенберга и представлении взаимодействия.

Неоднозначность представления Крауса

Заметим, что представление Крауса неоднозначно. Сначала покажем это на примере. Рассмотрим два набора операторов Крауса

$$\hat{\mathcal{K}}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\mathcal{K}}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

и

$$\hat{K}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{\mathcal{K}}_1 + \hat{\mathcal{K}}_2 \right), \ \hat{K}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{\mathcal{K}}_1 - \hat{\mathcal{K}}_2 \right).$$

Оба набора удовлетворяют условию полноты

$$\sum_k \hat{\mathcal{K}}_k^\dagger \hat{\mathcal{K}}_k = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{1}$$

и

$$\sum_k \hat{K}_k^\dagger \hat{K}_k = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{1}.$$

Тогда отображение $\mathcal{E}(\hat{\rho})$ можно записать как

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(\hat{\rho}) &= \sum_k \hat{K}_k \hat{\rho}\, \hat{K}_k^\dagger = \\ &= \frac{\hat{\mathcal{K}}_1 + \hat{\mathcal{K}}_2}{\sqrt{2}}\, \hat{\rho}\, \frac{\hat{\mathcal{K}}_1^\dagger + \hat{\mathcal{K}}_2^\dagger}{\sqrt{2}} + \frac{\hat{\mathcal{K}}_1 - \hat{\mathcal{K}}_2}{\sqrt{2}}\, \hat{\rho}\, \frac{\hat{\mathcal{K}}_1^\dagger - \hat{\mathcal{K}}_2^\dagger}{\sqrt{2}} = \sum_k \hat{\mathcal{K}}_k\, \hat{\rho}\, \hat{\mathcal{K}}_k^\dagger.\end{aligned}$$

Рассмотренный пример делает ясным следующую **теорему**: если два набора операторов Крауса $\{\hat{K}_k\}$ и $\{\hat{\mathcal{K}}_k\}$ связаны унитарным преобразованием

$$\hat{K}_k = \sum_\ell U_{k\,\ell}\, \hat{\mathcal{K}}_\ell,$$

то они соответствуют одному и тому же представлению Крауса.

Доказательство теоремы очевидно из приведенного выше примера и свойства унитарности.

Теорема Крауса

Указанное в параграфе "Операторы Крауса и представление Крауса для матрицы плотности открытой квантовой системы" обобщение доказывается при помощи теоремы Крауса: пусть существует отображение

$$\mathcal{E}(\hat{\rho}) \to \hat{\rho}',$$

которое удовлетворяет следующим свойствам

а) *линейность*: $\mathcal{E}(\lambda\,\hat{\rho}_1 + \mu\,\hat{\rho}_2) = \lambda\,\mathcal{E}(\hat{\rho}_1) + \mu\,\mathcal{E}(\hat{\rho}_2)$;

б) *сохранение следа*: $0 \le \mathbf{Tr}\left(\mathcal{E}(\hat{\rho})\right) \le 1$;

в) *положительная определенность*: диагональные матричные элементы оператора $\hat{\rho}'$ неотрицательны.

При помощи отображения $\mathcal{E}(\hat{\rho})$ можно построить матрицу плотности

$$\hat{\rho}' = \frac{\mathcal{E}(\hat{\rho})}{\mathbf{Tr}\left(\mathcal{E}(\hat{\rho})\right)}.$$

Основное утверждение теоремы Крауса: отображение $\mathcal{E}(\hat{\rho})$, удовлетворяющее свойствам а) – в), всегда может быть представлено как

$$\mathcal{E}(\hat{\rho}) = \sum_{k'} \hat{K}_{k'}\,\hat{\rho}\,\hat{K}_{k'}^{\dagger},$$

где операторы Крауса $\hat{K}_{k'}$ удовлетворяют условию полноты: $\sum_{k'} \hat{K}_{k'}^{\dagger}\,\hat{K}_{k'} \le \hat{1}$.

Применение формализма операторов Крауса

Рассмотрим двухуровневую систему "A", которая помещена в двухуровневый же резервуар "B". Пусть совместная эволюция этих систем описывается преобразованием $\hat{\mathcal{U}}_{AB}$ и устроена следующим образом: если система "A" находится в возбужденном состоянии $\left|1^{(A)}\right\rangle$, то с вероятностью w она переходит в основное состояние $\left|0^{(A)}\right\rangle$ с излучением фотона. Резервуар всегда находится в основном состоянии $\left|0^{(B)}\right\rangle$. Если фотон испущен, то резервуар его всегда поглощает и переходит в возбужденное состояние $\left|1^{(B)}\right\rangle$. Если же система "$A$" находится в основ ном состоянии $\left|0^{(A)}\right\rangle$, то ничего не происходит, и резервуар "B" остается в основном состоянии $\left|0^{(B)}\right\rangle$.

Из физических соображений ясно, что в рассматриваемой задаче оператор эволюции $\hat{\mathcal{U}}_{AB}$ имеет три ненулевых матричных элемента:

$$\begin{aligned}
\left\langle 0^{(A)}, 1^{(B)} \middle| \hat{\mathcal{U}}_{AB} \middle| 1^{(A)}, 0^{(B)} \right\rangle &= \sqrt{w}, \\
\left\langle 1^{(A)}, 0^{(B)} \middle| \hat{\mathcal{U}}_{AB} \middle| 1^{(A)}, 0^{(B)} \right\rangle &= \sqrt{1-w}\, e^{i\varphi_1},
\end{aligned}$$

и

$$\left\langle 0^{(A)}, 0^{(B)} \middle| \hat{\mathcal{U}}_{AB} \middle| 0^{(A)}, 0^{(B)} \right\rangle \;=\; e^{i\varphi_2},$$

где φ_1 и φ_2 – относительные фазы. В базисе

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

оператор Крауса $\hat{K}_1$ записывается как

$$\begin{aligned} \hat{K}_1 \;&=\; \left\langle 1^{(B)} \middle| \hat{\mathcal{U}}_{AB} \middle| 0^{(B)} \right\rangle = \sqrt{w} \left| 0^{(A)} \right\rangle \left\langle 1^{(A)} \right| = \\ &=\; \sqrt{w} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes (0, \quad 1) = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{w} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Аналогично для оператора $\hat{K}_0$ имеем:

$$\begin{aligned} \hat{K}_0 \;&=\; \left\langle 0^{(B)} \middle| \hat{\mathcal{U}}_{AB} \middle| 0^{(B)} \right\rangle = \left| 0^{(A)} \right\rangle \left\langle 0^{(A)} \right| e^{i\varphi_2} + \\ &+\; \sqrt{1-w}\, e^{i\varphi_1} \left| 1^{(A)} \right\rangle \left\langle 1^{(A)} \right| = \begin{pmatrix} e^{i\varphi_2} & 0 \\ 0 & e^{i\varphi_1} \sqrt{1-w} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Самостоятельно проверьте, что других операторов Крауса в данной задаче нет.

Условие полноты:

$$\sum_{k'=0}^{1} \hat{K}_{k'}^{\dagger}\,\hat{K}_{k'} = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi_2} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi_1}\sqrt{1-w} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\varphi_2} & 0 \\ 0 & e^{i\varphi_1}\sqrt{1-w} \end{pmatrix} +$$

$$+ \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \sqrt{w} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{w} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1-w \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{1}.$$

Отображение $\mathcal{E}(\hat{\rho}_A)$ матрицы плотности

$$\hat{\rho}_A = \begin{pmatrix} \rho_{00} & \rho_{01} \\ \rho_{10} & \rho_{11} \end{pmatrix}$$

имеет вид

$$\mathcal{E}(\hat{\rho}_A) = \hat{K}_0\,\hat{\rho}_A\,\hat{K}_0^{\dagger} + \hat{K}_1\,\hat{\rho}_A\,\hat{K}_1^{\dagger} = \begin{pmatrix} \rho_{00} + w\,\rho_{11} & \sqrt{1-w}\,e^{i\Delta\varphi}\rho_{01} \\ \sqrt{1-w}\,e^{-i\Delta\varphi}\rho_{10} & (1-w)\,\rho_{11} \end{pmatrix},$$

где $\Delta\varphi = \varphi_2 - \varphi_1$. Полученное отображение удовлетворяет условию положительной определенности. Так как $1 = \mathbf{Tr}\,\hat{\rho}_A = \rho_{00} + \rho_{11}$, то

$$\mathbf{Tr}\,\mathcal{E}(\hat{\rho}_A) = 1.$$

Следовательно

$$\hat{\rho}'_A = \frac{\mathcal{E}(\hat{\rho})}{\mathbf{Tr}\left(\mathcal{E}(\hat{\rho})\right)} = \begin{pmatrix} \rho_{00} + w\,\rho_{11} & \sqrt{1-w}\,e^{i\Delta\varphi}\,\rho_{01} \\ \sqrt{1-w}\,e^{-i\Delta\varphi}\,\rho_{10} & (1-w)\,\rho_{11} \end{pmatrix}.$$

С помощью представления Крауса можно найти зависимость $\hat{\rho}_A$ от времени. Действительно, при $\Gamma\,t/\hbar \ll 1$, вероятность распада за время t имеет вид $w = \Gamma\,t/\hbar$. Тогда $\hat{\rho}_A$ надо трактовать как $\hat{\rho}_A(0)$, а $\hat{\rho}'_A$ как $\hat{\rho}_A(t)$. Кроме того, в первом порядке $1 - w \approx e^{-\Gamma\,t/\hbar}$. Тогда

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_A(t) &= \begin{pmatrix} \rho_{00}(0) + \rho_{11}(0) - e^{-\Gamma\,t/\hbar}\,\rho_{11}(0) & e^{-\Gamma\,t/(2\,\hbar)}\,e^{i\Delta\varphi}\,\rho_{01}(0) \\ e^{-\Gamma\,t/(2\,\hbar)}\,e^{-i\Delta\varphi}\,\rho_{10}(0) & e^{-\Gamma\,t/\hbar}\,\rho_{11}(0) \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} 1 - e^{-\Gamma\,t/\hbar}\,\rho_{11}(0) & e^{-\Gamma\,t/(2\,\hbar)}\,e^{i\Delta\varphi}\,\rho_{01}(0) \\ e^{-\Gamma\,t/(2\,\hbar)}\,e^{-i\Delta\varphi}\,\rho_{10}(0) & e^{-\Gamma\,t/\hbar}\,\rho_{11}(0) \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Заметим, что величина $\Delta\varphi$ в недиагональных матричных элементах из физических соображений должна быть равна $\omega\,t$. В параграфе **"Как работает уравнение Линдблада. Типичный пример"** мы дадим этому утверждению строгое обоснование.

Проекционный постулат и уравнение Шредингера

Во многих учебниках по квантовой механике обращается внимание на то, что эволюция векторов состояния $|\psi\rangle$ в квантовой теории описывается двумя принципиально различными способами: при помощи проекционного постулата М. Борна и при помощи уравнения Шредингера (см. параграф "Постулаты квантовой механики (для чистых состояний)"). При этом уравнение Шредингера применяется, когда микросистемы взаимодействуют друг с другом (например, происходит рассеяние электрона на атоме), а проекционный постулат – когда микросистема взаимодействует с макроприбором. Но макроприбор тоже состоит из огромного числа микросистем (молекул и атомов). Поэтому возникает вопрос: может ли уравнение Шредингера для взаимодействия $N \gg 1$ тел давать хоть в каком то приближении проекционный постулат? И не надо ли исключить этот постулат из списка постулатов квантовой теории?

Теорема Крауса показывает, что проекционный постулат и уравнение Шредингера являются частными случаями представления Крауса. Первый, когда $\hat{K}_0 = \hat{P}_{n'}^{(A)}$. Второй, когда $\hat{K}_0 = \hat{U}(t,\, t_0)$, а остальные $\hat{K}_i = 0$. Поэтому проекционный постулат не выводится из уравнения Шредингера. Но оба они выводятся из эволюции Крауса, которую можно включить в перечень постулатов вместо Постулата N4 и Постулата N6. Но в этом случае понять квантовую механику студентам будет еще труднее.

Модель Д.Дойча для замкнутых времениподобных кривых в квантовой механике

Приведем интересный пример физически обоснованного отображения, которое можно построить в рамках квантовой механики, и которое НЕ сводится к представлению Крауса.

Пусть микросистема эволюционирует в обычном пространстве–времени, в котором имеется стрела времени и выполняется принцип причинности. Такую микросистему мы будем называть CR–системой (сокращение от английских терминов "Causality–respecting system" или "Chronology–respecting system", то есть системой, удовлетворяющей принципу причинности и движущейся вдоль стрелы времени из прошлого в будущее).

Предположим, что имеется другая микросистема, которая движется по замкнутой времениподобной петле. Такие петли существуют, например, в Общей теории относительности как решения уравнения Эйнштейна с космологическим членом (см. K. Gödel, Rev.Mod.Phys. 21, p.447 (1949)). Назовем подобные микросистемы CTC–системами (от англ. "Closed Time-like Curves system").

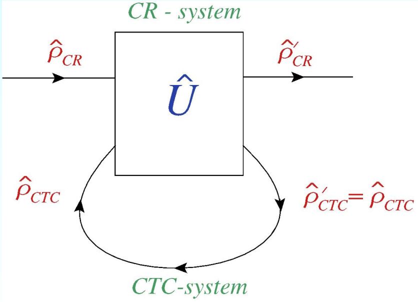
Пусть теперь CR-система и CTC-система взаимодействуют друг с другом при помощи унитарного преобразования $\hat{U}$. До взаимодействия общая матрица плотности факторизуется, то есть

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}_{CR} \otimes \hat{\rho}_{CTC}.$$

В результате взаимодействия общая матрица плотности приобретает вид

$$\hat{\rho}' = \hat{U}\,\hat{\rho}\,\hat{U}^{\dagger} = \hat{U}\left(\hat{\rho}_{CR} \otimes \hat{\rho}_{CTC}\right)\hat{U}^{\dagger}.$$

Этот процесс можно изобразить при помощи следующей интуитивно понятной диаграммы:



Если мы хотим непротиворечиво описать эволюцию CTC–системы, то матрица плотности CTC–системы после взаимодействия должна удовлетворять условию самосогласованности (условию Дойча):

$$\hat{\rho}'_{CTC} = \hat{\rho}_{CTC}.$$

Поскольку

$$\hat{\rho}'_{CTC} = \mathbf{Tr}_{CR}\,\hat{\rho}' = \mathbf{Tr}_{CR}\left(\hat{U}\left(\hat{\rho}_{CR} \otimes \hat{\rho}_{CTC}\right)\hat{U}^{\dagger}\right),$$

то условие Дойча приводит к нелинейному уравнению на матрицу плотности $\hat{\rho}_{CTC}$

$$\hat{\rho}_{CTC} = \mathbf{Tr}_{CR}\left(\hat{U}\left(\hat{\rho}_{CR} \otimes \hat{\rho}_{CTC}\right)\hat{U}^{\dagger}\right),$$

решение которого зависит от матрицы плотности $\hat{\rho}_{CR}$ и имеет как минимум одну неподвижную точку. Заметим, что условие Д.Дойча предполагает, что при возвращении вспять по времени CTC–система теряет всякую "память" о своем "будущем–прошлом" взаимодействии с CR–системой, поскольку в правой части условия самосогласования стоит факторизованная матрица плотности $\hat{\rho}_{CR} \otimes \hat{\rho}_{CTC}$, что предполагает отсутствие взаимодействия между системами, даже если оно "было в будущем".

Потерю "памяти" и факторизацию, по–видимому, должны обеспечивать некоторые "сохраняющие хронологию переменные" или свойства из внешнего окружения CTC–системы. Но конкретное действие данного механизма не совсем понятно. За это подход Д. Дойча критикуют.

Заметим, что условие самосогласования Д. Дойча не позволяет путешественнику во времени вернуться в прошлое и убить, например, своего дедушку, чтобы предотвратить рождение своих родителей и свое (так называемый "парадокс дедушки") и вообще сделать в прошлом изменения, которые повлияют на его будущее и сделают невозможным возвращение в прошлое, типа любимого писателями–фантастами жесткого варианта "эффекта бабочки" (см., например, Р. Бредбери, "И грянул гром").

Матрица плотности CR–системы после взаимодействия в фиксированной точке запишется как

$$\hat{\rho}'_{CR} = \mathbf{Tr}_{CTC}\,\hat{\rho}' = \mathbf{Tr}_{CTC}\left(\hat{U}\left(\hat{\rho}_{CR}\otimes\hat{\rho}_{CTC}\right)\hat{U}^{\dagger}\right) \equiv \frac{\mathcal{M}(\hat{\rho}_{CR})}{\mathbf{Tr}\Big(\mathcal{M}(\hat{\rho}_{CR})\Big)}.$$

Отображение $\mathcal{M}(\hat{\rho}_{CR})$ нелинейно, то есть **НЕ** подчиняется теореме Крауса. Это и есть обещанный пример.

Более подробное обсуждение парадоксов путешествия во времени в свете условия самосогласования Д. Дойча можно найти в работе D. Deutsch, "Quantum mechanics near closed timelike lines", PRD 44, 3197 (1991).

Приведем пример конкретной реализации модели Дойча, который взят из работы D. Bacon, "Quantum computational complexity in the presence of closed timelike curves", PRA 70, 032309 (2004). Пусть имеются два спина $s = 1/2$ каждый. Частицу "1" отождествим с CR–системой, а частицу "2" с CTC – системой. Тогда можно ввести базис $|\,1\,\rangle, \ldots, |\,4\,\rangle$ в пространстве состояния двух частиц как это сделано в параграфе "Явный вид матрицы плотности состояния $|\,\Psi^-\,\rangle$". Пусть оператор взаимодействия между CR– и CTC–системами в указанном базисе имеет вид

$$\hat{U} = |\,1\,\rangle\,\langle\,1\,| + |\,2\,\rangle\,\langle\,3\,| + |\,3\,\rangle\,\langle\,2\,| - |\,4\,\rangle\,\langle\,4\,|.$$

Если $\hat{\rho}_{CR} = \dfrac{1}{2}\left(\hat{1} + \vec{n}\,\vec{\sigma}\,\right)$, где $\vec{n} = (n_1,\, n_2,\, n_3)$, то условие самосогласованности Дойча позволяет однозначно найти матрицу плотности CTC–системы в виде: $\hat{\rho}_{CTC} = \dfrac{1}{2}\left(\hat{1} + \vec{m}\,\vec{\sigma}\,\right)$, где $\vec{m} = (n_1 n_3,\, n_2 n_3,\, n_3)$. Матрица плотности CR–системы после взаимодействия $\hat{\rho}'_{CR} = \dfrac{1}{2}\left(\hat{1} + \vec{n}'\,\vec{\sigma}\,\right)$ будет нелинейно зависеть от матрицы плотности CR–системы до взаимодействия, поскольку прямые вычисления дают $\vec{n}' = \left(n_1 n_3^2,\, n_2 n_3^2,\, n_3\right)$.

Уравнение Линдблада

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

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

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

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

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

$$\hat{K}_0 = \hat{1} + \left(\hat{L}_0 - \frac{i\hat{H}_A}{\hbar}\right)\Delta t;$$
$$\hat{K}_{k'} = \hat{L}_{k'}\sqrt{\Delta t} \quad \textbf{при} \quad k' \neq 0,$$

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

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

и

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

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

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

$$
\frac{\Delta\hat{\rho}_A^{(S)}(t)}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t}\left(\sum_{k'} \hat{K}_{k'}\,\hat{\rho}_A^{(S)}(t)\,\hat{K}_{k'}^{\dagger} - \hat{\rho}_A^{(S)}(t)\right) \approx
$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Тогда

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

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

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

Декогеренция с точки зрения уравнения Линдблада

В параграфе "Суперпозиция или смесь!" обсуждалось явление исчезновения недиагональных матричных элементов матрицы рассеяния – так называемое явление декогеренции – за счет усреднения по произвольно меняющейся относительной фазе. При помощи уравнения Линдблада покажем, что декогеренцию можно трактовать иначе как *эволюционный процесс*.

Рассмотрим микросистему, которая описывается матрицей плотности $\hat{\rho}_A^{(S)}$ размерности 2×2. Положим $\hat{H}_A^{(S)} = \hat{0}$, а влияние окружения будем описывать при помощи всего одного оператора Линдблада $\hat{L} = \sqrt{\frac{\Gamma}{2\hbar}}\,\sigma_3$, где $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ – третья матрица Паули. Тогда уравнение Линдблада принимает вид:

$$
\begin{aligned}
\frac{d\,\hat{\rho}_A^{(S)}}{dt} &= \frac{1}{2}\left(\left[\hat{L}\,\hat{\rho}_A^{(S)},\,\hat{L}^{\dagger}\right] + \left[\hat{L},\,\hat{\rho}_A^{(S)}\hat{L}^{\dagger}\right]\right) = \\
&= \frac{\Gamma}{4\hbar}\left(\sigma_3\,\hat{\rho}_A^{(S)}\sigma_3 - \sigma_3^2\hat{\rho}_A^{(S)} + \sigma_3\,\hat{\rho}_A^{(S)}\sigma_3 - \hat{\rho}_A^{(S)}\sigma_3^2\right) = \\
&= \frac{\Gamma}{2\hbar}\left(\sigma_3\,\hat{\rho}_A^{(S)}\sigma_3 - \hat{\rho}_A^{(S)}\right).
\end{aligned}
$$

Или переходя к матричной форме записи

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} \rho^{(S)}_{A\,00} & \rho^{(S)}_{A\,01} \\ \rho^{(S)}_{A\,10} & \rho^{(S)}_{A\,11} \end{pmatrix} = -\frac{\Gamma}{\hbar}\begin{pmatrix} 0 & \rho^{(S)}_{A\,01} \\ \rho^{(S)}_{A\,10} & 0 \end{pmatrix}.$$

Данное матричное дифференциальное уравнение разбивается на четыре простейших дифференциальных уравнения, после решения которых с учетом начального условия получаем:

$$\hat{\rho}^{(S)}_{A}(t) = \begin{pmatrix} \rho^{(S)}_{A\,00}(0) & \rho^{(S)}_{A\,01}(0)\, e^{-\Gamma\, t/\hbar} \\ \rho^{(S)}_{A\,10}(0)\, e^{-\Gamma\, t/\hbar} & \rho^{(S)}_{A\,11}(0) \end{pmatrix}.$$

Мы видим. что недиагональные матричные элементы подсистемы "A" за счет взаимодействия с внешним окружением экспоненциально убывают, и при достаточно больших временах их, фактически, можно считать нулевыми. То есть любая суперпозиция за время $t \sim 10\,\hbar/\Gamma$ с точки зрения любого экспериментального измерения становится смесью. Поскольку практически все макроскопические тела непрерывно взаимодействуют с внешним окружением (см., например, параграф "Декогеренция и парадокс кота Шредингера"), то для наблюдателя они никогда не находятся в суперпозиции состояний, но только в смеси.

Как работает уравнение Линдблада. Типичный пример

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

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

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

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

Невозмущенный гамильтониан двухуровневой системы можно написать в виде:

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

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

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

Тогда

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

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

Для дальнейших вычислений удобно ввести базис

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

и перейти к матричному представлению.

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

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

Решение уравнения:

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

Легко видеть, что число частиц в возбужденном состоянии (которое, очевидно, $\sim \rho_{11}(t)$) убывает согласно закону радиоактивного распада. Как и в параграфе "Декогеренция с точки зрения уравнения Линдблада" недиагональные матричные элементы подвержены декогеренции из-за взаимодействия квантовой системы с внешним окружением.

Попутно мы строго показали, почему фаза в недиагональных матричных элементах из параграфа "Применение формализма операторов Крауса" должна быть равна $\omega\, t$.

Уравнением Линдблада для наблюдаемых в представлении Гейзенберга

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

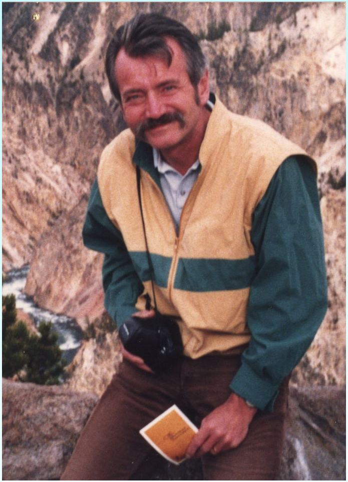
$$\langle F_A \rangle_{\rho_{\boldsymbol{A}}} = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}_A^{(S)}(t)\ \hat{F}_A^{(S)}\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}_{A\,0}\ \hat{F}_A^{(H)}(t)\right).$$

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

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

которое описывает неунитарную эволюцию наблюдаемой в открытой квантовой системе.

Краус и Линдблад



проф. Karl Kraus
(21.03.1938 – 09.06.1988)
University of Würzburg,
Германия

проф. Göran Lindblad
Royal Institute of Technology,
AlbaNova University,
Стокгольм, Швеция

Физический смысл введения POVM-операторов

В параграфе "Понятие о POVM-операторах" мы ввели специальное описание измерений, когда не нужно интересоваться конечным состоянием микросистемы. Ниже мы покажем, как можно обосновать существование POVM-операторов с точки зрения описания открытых квантовых систем.

POVM-измерение можно интерпретировать как измерение состояния некоторой вспомогательной микросистемы (по английски "ancilla"), которая ранее взаимодействовала с интересующей нас квантовой системой "S". Обозначим матрицу плотности квантовой системы через $\hat{\rho}_S$, а вспомогательной – через $\hat{\rho}_A$. Матрица плотности "S + ancilla" $\hat{\rho} = \hat{\rho}_S \otimes \hat{\rho}_A$ как матрица плотности замкнутой системы подчиняется унитарной эволюции

$$\hat{\rho}' = \hat{U}\,\hat{\rho}\,\hat{U}^{\dagger}.$$

В пространстве квантовой системы "S" введем базис $\left\{\left|\, f_i^{(S)} \right\rangle\right\}$ из собственных векторов наблюдаемой F_S, относящейся только к системе "S". В пространстве вспомогательной системы введем базис $\{|\, a_\alpha \rangle\}$, который также связан с измеримыми характеристиками ancilla.

Измерение состояния вспомогательной системы задается при помощи проекционного оператора вида

$$\hat{\mathcal{P}}_{\alpha'} = \hat{1}_S \otimes \hat{P}_{\alpha'},$$

где $\hat{P}_{\alpha'} = |\, a_{\alpha'} \,\rangle \langle\, a_{\alpha'} \,|$ – проектор на чистое состояние $|\, a_{\alpha'} \,\rangle$ вспомогательной системы. Тогда

$$\begin{aligned}
w_{\alpha'} &= \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}'\,\hat{\mathcal{P}}_{\alpha'}\right) = \mathbf{Tr}\left(\hat{U}\left(\hat{\rho}_S \otimes \hat{\rho}_A\right)\hat{U}^\dagger\left(\hat{1}_S \otimes \hat{P}_{\alpha'}\right)\right) = \\
&= \mathbf{Tr}\left(\left(\hat{\rho}_S \otimes \hat{\rho}_A\right)\hat{U}^\dagger\left(\hat{1}_S \otimes \hat{P}_{\alpha'}\right)\hat{U}\right) = \\
&= \sum_{i,\,\alpha}\left\langle f_i^{(S)} \middle| \langle\, a_\alpha \,|\left(\hat{\rho}_S \otimes \hat{\rho}_A\right)\hat{U}^\dagger\left(\hat{1}_S \otimes \hat{P}_{\alpha'}\right)\hat{U}\,|\, a_\alpha \,\rangle \middle| f_i^{(S)} \right\rangle = \\
&= \sum_i \left\langle f_i^{(S)} \middle| \hat{\rho}_S \left(\sum_\alpha \left\langle a_\alpha \middle| \left(\hat{1}_S \otimes \hat{\rho}_A\right)\hat{U}^\dagger\left(\hat{1}_S \otimes \hat{P}_{\alpha'}\right)\hat{U} \middle| a_\alpha \right\rangle\right) \middle| f_i^{(S)} \right\rangle = \\
&= \sum_i \left\langle f_i^{(S)} \middle| \hat{\rho}_S\,\hat{E}_{\alpha'} \middle| f_i^{(S)} \right\rangle = \mathbf{Tr}_S\left(\hat{\rho}_S\,\hat{E}_{\alpha'}\right),
\end{aligned}$$

где POVM–оператор

$$\hat{E}_{\alpha'} = \sum_\alpha \left\langle a_\alpha \middle| \left(\hat{1}_S \otimes \hat{\rho}_A\right)\hat{U}^\dagger\left(\hat{1}_S \otimes \hat{P}_{\alpha'}\right)\hat{U} \middle| a_\alpha \right\rangle.$$

Часть 6

ОСНОВЫ КЛАССИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ИНФОРМАЦИИ

"It from Bit" ("Все происходит из бита"). Говорят, что так утверждал Дж. Уиллер.

Классическая энтропия. Биты и наты

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

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

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

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

Энтропия и информация

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

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

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

$$H + I = const$$

или

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

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

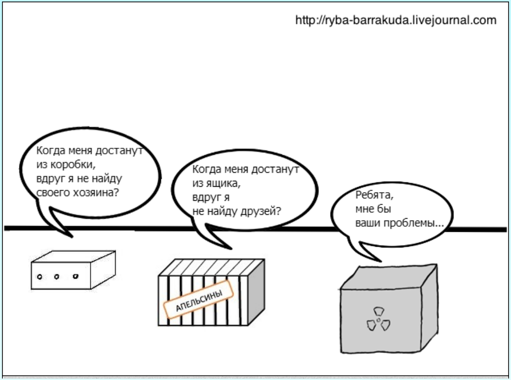
Механизм декогеренции и парадокс кота Шредингера

С понятием энтропии тесно связан один из любопытных механизмов перехода суперпозиции состояний в смесь состояний, который был опубликован в книге Б.Б. Кадомцева "Динамика и информация", М. УФН, 1999.

Какие проблемы могут возникнуть при описании такого перехода в рамках формализма квантовой теории, красиво показал Э. Шредингер в 1935 году. Рассуждение Шредингера получило название парадокса кота Шредингера.

Парадокс формулируется следующим образом. Пусть живой котик помещен в непрозрачный ящик с атомом, находящимся в возбужденном состоянии, и гранатой, взрыватель которой срабатывает при попадании в него фотона. У атома (для простоты) имеются всего две возможности: 1) остаться в возбужденном состоянии; 2) испустить фотон и перейти в основное состояние. Предположим, что испущенный фотон всегда попадает в гранату, которая, непременно, взрывается после поглощения фотона и безжалостно убивает бедного котика своими осколками.

Не вызывает сомнений, что атом находится в суперпозиции основного и возбужденного состояний. Из этого, казалось бы, можно сделать (неверный!) вывод, что граната должна находится в суперпозиции целой и взорвавшейся, а котик в суперпозиции живого и мертвого существа.



Однако если в любой момент времени экспериментатор Аленушка откроет непрозрачный ящик, то она увидит либо живого, либо (печалька!) мертвого котика, но никогда живо-мертвого или мертво-живого котомонстра. То есть, Аленушка всегда увидит смесь макроскопически различных состояний кота, но никогда не увидит суперпозицию.

Вопрос: почему так происходит, ведь породивший всю цепочку событий атом находился в суперпозиции состояний? Иначе, за счет какого физического механизма произошла декогеренция и суперпозиция превратилась в смесь?

Ответ любопытный **Б.Б. Кадомцева** на поставленные вопросы: **во всем виновато наше... Солнце!**

В более развернутой форме. Все предметы на Земле, в том числе и макроприборы, находятся в потоке излучения Солнца, который у поверхности Земли составляет $\dfrac{\Delta Q}{\Delta t} \approx 1,4{\cdot}10^6$ **эрг/см^2 сек** (так называемая солнечная постоянная). Этот поток излучения, в конечном счете, преобразуется в тепловую энергию атомов и молекул со средней температурой $< T >\sim 300$ **K**. Тогда поток изменения энтропии от Солнца (**в битах!**) у поверхности Земли равен:

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

где $k_B = 1,38\cdot 10^{-16}$ **бит эрг/K** – постоянная Больцмана. Потоку солнечной энтропии должен соответствовать поток информации

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

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

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

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

где L – характерный размер макроприбора. Примем $L = 10$ **см**. Тогда

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

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

Поэтому, пока макроприбор производит одно измерение над микросистемой, в объединенной системе происходит порядка $\Delta t_D / \Delta t_R \approx 10^{11}$ **актов редукции**. Столько же раз меняется относительная фаза между состояниями $\hat{\rho}_1$ (атом в возбужденном состоянии $+$ граната не взорвалась $+$ котик жив) и $\hat{\rho}_2$ (атом перешел в основное состояние $+$ граната взорвалась $+$ котик мертв)! Следовательно, процесс измерения должен включать в себя усреднение по огромному числу этих различных относительных фаз.

Основываясь на данной оценке и результатах параграфа **"Суперпозиция или смесь!"** приходим к выводу, что в земных условиях появление мертво-живых и живо-мертвых котиков маловероятно. Так **решается парадокс** кота Шредингера по Б.Б. Кадомцеву.

Параллельно мы показали, что для описания процесса измерения микросистемы (атом) макроприбором (котик) недостаточно дираковского формализма векторов состояния, а требуется привлекать аппарат матрицы плотности. В этом состоит **сущность оригинального парадокса кота Шредингера** образца 1935 года.

Граница между мирами

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

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

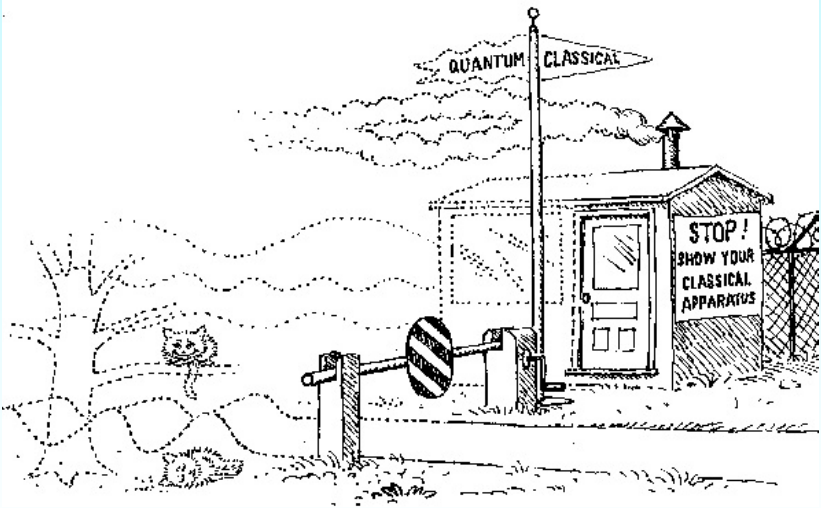
$$\Delta p \sim mv \sim m\frac{L}{\Delta t_R} \sim \rho\, L^3\, L\, \frac{\Delta I_\odot}{\Delta t}\, L^2 = \rho\, \frac{\Delta I_\odot}{\Delta t}\, L^6,$$

гдн ρ – характерная плотность тела. Таким образом:

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

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

Второй вариант границы между квантовым и классическим мирами по W.Zurek-у. Первый вариант был представлен в параграфе ''Теорема Эберхарда и Копенгагенская интерпретация квантовой механики''.



Ограничения на величину шенноновской энтропии

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

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

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

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

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

Тогда энтропию можно записать в виде

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

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

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

Максимум $H(X)$ находим из условия

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

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

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

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

где N - количество элементов в ансамбле X.

Двоичная энтропия

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

$$H(X_2) \equiv H(w) = H(x_1) + H(x_2) = -w \ln w \; - \; (1 - w) \ln (1 - w)$$

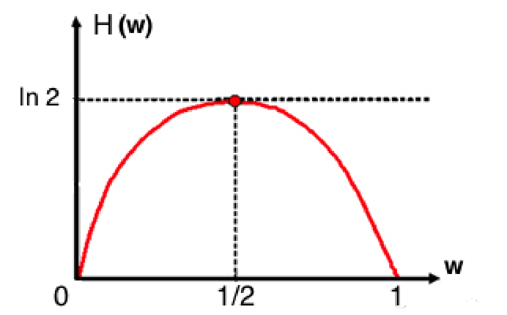
носит название двоичной энтропии.

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

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

Легко проверить, что максимальное значение двоичной энтропии $H_{max}(X_2) = \ln 2$ и достигается при $w = 1/2$, а минимальное значение $H_{min}(X_2) = 0$ соответствует $w = 0$ или $w = 1$ в полном согласии с общими результатами параграфа "Ограничения на величину шенноновской энтропии".

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



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

$$H(wx_1 + (1-w)x_2) \geq wH(x_1) + (1-w)H(x_2).$$

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

Неравенство Йенсена и вогнутость энтропии Шеннона

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

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

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

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

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

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

Классическая относительная энтропия и неравенство Гиббса

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

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

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

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

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

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

$$H\Big(P\,\|\,Q\Big) \geq 0.$$

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

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

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

Классическая совместная энтропия и субаддитивность

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

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

Поскольку $w(x_\ell, y_m) = w(y_m, x_\ell)$ и $\sum\limits_{\ell, m} \ldots = \sum\limits_{m, \ell} \ldots$, то

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

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

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

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

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

Условная вероятность и теорема Байеса

Обозначим через $w\,(y_m|x_\ell)$ – условную вероятность найти величину y_m при условии, что величина x_ℓ уже известна. Тогда по определению классической условной вероятности

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

При этом

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

и

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

Из равенства совместных вероятностей $w(y_m,\, x_\ell)$ и $w(x_\ell,\, y_m)$ для наборов классических случайных величин немедленно следует теорема Байеса:

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

Классическая условная энтропия

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

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

Величина

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

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

А величина

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

носит название частной классической условной энтропии.

Функция $H\left(Y|X\right)$ служит мерой неопределенности ансамбля Y при известном значении ансамбля X. А функция $H\left(Y|x_\ell\right)$ служит мерой неопределенности ансамбля Y при известном значении случайной величины x_ℓ.

Поскольку $0 \leq w\left(y_m|x_\ell\right) \leq 1$, то $-\ln w\left(y_m|x_\ell\right) \geq 0$. Поэтому

$$H\left(Y|X\right) \geq 0 \quad \text{и} \quad H\left(Y|x_\ell\right) \geq 0.$$

Аналогично величине $H\left(Y|X\right)$ можно определить классическую условную энтропию $H\left(X|Y\right)$ из соотношения:

$$H\left(X|Y\right) = H(X,\ Y) - H(Y).$$

Очевидно, что $H\left(X|Y\right) \geq 0$.

Доказательство субаддитивности

Выше было получено, что $H(Y|X) \geq 0$ и $H(X|Y) \geq 0$. Отсюда немедленно следуют неравенства:

$$H(X,\, Y) \geq H(X) \text{ и } H(X,\, Y) \geq H(Y).$$

Теперь исполним обещание и докажем субаддитивность энтропии. Для этого воспользуемся неравенством Гиббса. Рассмотрим наборы $P = \{x_\ell,\, y_m,\, w(x_\ell,\, y_m)\}$ и $Q = \{x_\ell,\, y_m,\, w(x_\ell)\, w(y_m)\}$. Тогда:

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

Неравенство доказано. Окончательно получаем, что

$$2 \cdot H(X,\, Y) \geq H(X) + H(Y) \geq H(X,\, Y).$$

Классическая взаимная информация

Классической взаимной информацией (**mutual information**) называется информация, которая является общей для наборов X и Y. Она записывается в виде:

$$I(X:Y) = H(X) + H(Y) - H(X,Y).$$

откуда немедленно следует, что $I(X:Y) \geq 0$ (см. неравенство в конце предыдущего слайда). По своему определению $I(X:Y)$ должна быть симметричной функцией наборов X и Y, то есть:

$$I(X:Y) = I(Y:X) \geq 0.$$

Отметим полезное равенство

$$I(X:Y) = H(X) - H(X|Y) = H(Y) - H(Y|X).$$

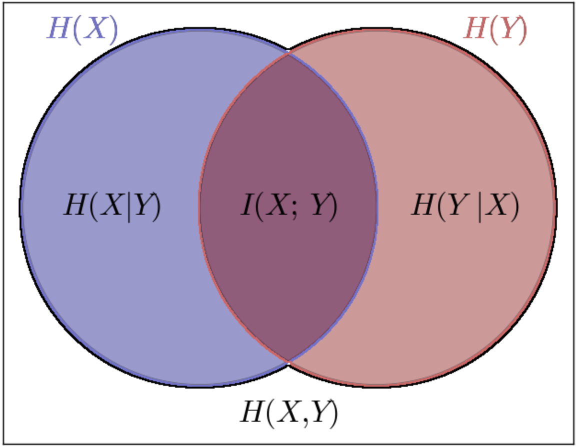
Из этого равенства и неотрицательности взаимной информации сразу получаем, что

$$H(X) \geq H(X|Y) \quad \text{и} \quad H(Y) \geq H(Y|X).$$

Заметим, что взаимная информация **НЕ обладает** свойством субаддитивности, т.е.

$$I(X,Y:Z) \not\leq I(X:Z) + I(Y:Z).$$

Наглядная связь между различными энтропиями и взаимной информацией



Сильная субаддитивность

Довольно очевидно, что можно узнать больше информации о наборе X, если известна информация о наборах Y и Z, которые каким то образом связанны с набором X (например, при помощи совместных распределений вероятностей или найденных на опыте эмпирических корреляций), чем когда известна информация только об одном таком наборе Y. В силу соотношения между энтропией и информацией для условной энтропии должно иметь место обратное неравенство

$$H(X|Y,Z) \leq H(X|Y).$$

Распишем правую и левую части данного неравенств согласно определению условной энтропии. Имеем

$$H(X|Y,Z) = H(X,Y,Z) - H(Y,Z) \quad \text{и} \quad H(X|Y) = H(X,Y) - H(Y).$$

Отсюда немедленно получаем свойство сильной субаддитивности для энтропии Шеннона

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

Часть 7

ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ИНФОРМАЦИИ

"It from QuBit" ("Все происходит от квантового бита"). Так думают многие современные физики (которые думают).

Квантовая энтропия (энтропия фон Неймана)

Рассмотрим микросистему, которая описывается матрицей плотности $\hat{\rho}$. Пусть $|\,\rho_i\,\rangle$ – собственные вектора матрицы плотности, отвечающие собственным значениям ρ_i (для простоты будем считать их невырожденными):

$$\hat{\rho}\,|\,\rho_i\,\rangle = \rho_i\,|\,\rho_i\,\rangle.$$

Очевидно, что ρ_i имеет смысл вероятности найти квантовую систему в чистом состоянии $\hat{\rho}_i = |\,\rho_i\,\rangle\langle\,\rho_i\,|$. Поэтому $0 \le \rho_i \le 1$.

В базисе $\{|\,\rho_i\,\rangle\}$ матрица плотности имеет диагональный вид. Поэтому в базисе собственных векторов квантовая энтропия (или энтропия фон Неймана) может быть определена аналогично классической (информационной) энтропии $H(X)$ Шеннона при помощи собственных значений:

$$S = -\sum_i \rho_i \ln\,\rho_i.$$

Докажем, что полученное на предыдущем слайде выражение для энтропии можно переписать в универсальном виде:

$$S \equiv S(\hat{\rho}) \equiv \left\langle \hat{S} \right\rangle_{\rho} = -\langle \ln \hat{\rho} \rangle_{\rho} = -\mathbf{Tr}\,(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}),$$

где $\hat{S} = -\ln \hat{\rho}$ — **оператор энтропии**. Формула для энтропии фон Неймана S верна в любом представлении матрицы плотности, и никак не связана со специфическим базисом собственных векторов матрицы $\hat{\rho}$.

Доказательство начнем с факта, что в базисе собственных векторов $F(\hat{\rho})\,|\,\rho_i\,\rangle = F(\rho_i)\,|\,\rho_i\,\rangle$. Тогда:

$$-\mathbf{Tr}\,(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) = -\sum_i \langle\, \rho_i \,|\, \hat{\rho} \ln \hat{\rho} \,|\, \rho_i \,\rangle = -\sum_i \rho_i \ln \rho_i.$$

При помощи унитарного преобразования $\hat{U}$ перейдем от матрицы $\hat{\rho}$ в базисе собственных векторов к матрице плотности в каком-либо другом базисе. Обозначим эту матрицу через $\hat{\rho}_*$. То есть $\hat{\rho}_* = \hat{U}\,\hat{\rho}\,\hat{U}^\dagger$ Поскольку физическое состояние микросистемы при таком преобразовании не меняется, то $\langle\, A \,\rangle_{\rho} = \langle\, A \,\rangle_{\rho_*}$.

Кроме того:

$$\ln \hat{\rho}_* = \ln \left(\hat{U}\,\hat{\rho}\,\hat{U}^\dagger\right) = \ln \hat{U} + \ln \left(\hat{\rho}\,\hat{U}^\dagger\right) = \ln \left(\hat{\rho}\,\hat{U}^\dagger\right) + \ln \hat{U} =$$
$$= \ln \left(\hat{\rho}\,\hat{U}^\dagger\,\hat{U}\right) = \ln \hat{\rho}.$$

Учитывая два последних результата, получаем:

$$-\langle \ln \hat{\rho}_* \rangle_{\rho_*} = -\langle \ln \hat{\rho}_* \rangle_{\rho} = -\langle \ln \hat{\rho} \rangle_{\rho}.$$

Таким образом, наше утверждение доказано. Из него сразу следует, что энтропия S не изменяется при любых унитарных преобразованиях базиса, в котором записана матрица $\hat{\rho}$, то есть

$$S\left(\hat{U}\,\hat{\rho}\,\hat{U}^\dagger\right) = S\left(\hat{\rho}\right).$$

Note: для практических вычислений удобнее находить собственные вектора и собственные значения матрицы плотности. При этом считается, что $0 \cdot \ln(0) = 0$. А потом вычислять энтропию по формуле $S = -\sum\limits_i \rho_i \ln \rho_i$.

Note: наоборот, для доказательства общих соотношений удобно операторное выражение для энтропии в виде $S = -\mathbf{Tr}\left(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}\right)$.

Энтропия замкнутой квантовой системы

Из курса термодинамики и статистической физики известно, что энтропия замкнутой системы сохраняется. Докажем это утверждение для энтропии замкнутой квантовой системы.

Первый способ. Как было показано в параграфе "Эволюция матрицы плотности во времени. Квантовое уравнение Лиувилля (уравнение фон Неймана)" эволюция замкнутых квантовых систем определяется унитарным оператором $\hat{U}(t, t_0)$ по формуле

$$\hat{\rho}^{(S)}(t) = \hat{U}\,(t,\ t_0)\ \hat{\rho}_0^{(S)}\ \hat{U}^{\dagger}\,(t,\ t_0).$$

Поскольку энтропия S не меняется при унитарных преобразованиях, то утверждение доказано.

Второй способ. Используя уравнение фон Неймана можно прямо показать, что

$$\frac{\partial S(\hat{\rho})}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial t}\left(\mathbf{Tr}\,(\hat{\rho}\ \ln\hat{\rho})\right) = 0,$$

откуда опять следует сохранение энтропии замкнутой квантовой системы. Проведите это доказательство самостоятельно. Для него нужно помнить о цикличности следа и что $[\hat{\rho}, \ln\hat{\rho}] = 0$.

Ограничения на величину энтропии фон Неймана

С учетом определения энтропии фон Неймана S в терминах собственных значений ρ_i и принимая во внимание, что все $0 \leq \rho_i \leq 1$, немедленно приходим к неравенству $S \geq 0$. Равенство достигается, когда одно из значений $\rho_k = 1$, а остальные значения равны нулю.

Если энтропия S имеет N ненулевых собственных значений, то $S \leq \ln(N)$. Равенство достигается, когда все $\rho_i = 1/N$, то есть когда квантовая система находится в максимально однородном состоянии. Доказательство этого факта полностью аналогично доказательству неравенства $H(X) \leq \ln(N)$, которое было проведено в параграфе "Ограничения на величину шенноновской энтропии".

Таким образом, аналогично классической энтропии Шеннона $H(X)$, квантовая энтропия фон Неймана S удовлетворяет двойному неравенству

$$0 \leq S \leq \ln(N).$$

Энтропия чистого состояния

Возьмем произвольное чистое состояние $|\,\psi\,\rangle$. Ему отвечает матрица плотности $\hat{\rho} = |\,\psi\,\rangle\,\langle\,\psi\,|$, для которой уравнение на собственные вектора и собственные значения записывается в виде:

$$\hat{\rho}\,|\,\rho_i\,\rangle = \rho_i\,|\,\rho_i\,\rangle \;\Rightarrow\; \langle\,\psi\,|\;\rho_i\,\rangle\,|\,\psi\,\rangle = \rho_i\,|\,\rho_i\,\rangle.$$

Поэтому матрица плотности чистого состояния имеет один собственный вектор $|\,\rho_1\,\rangle = |\,\psi\,\rangle$, которому соответствует единственное собственное значение $\rho_1 = \langle\,\psi\,|\;\rho_1\,\rangle = \langle\,\psi\,|\;\psi\,\rangle = 1$. Тогда энтропия чистого состояния

$$S_\psi = -\,1 \cdot \ln(1) = \;0.$$

Поскольку $S \geq 0$, то мы показали, что любое чистое состояние обладает максимально возможной для макроскопического наблюдателя (!!!) информацией о свойствах квантовой системы. Это утверждение полностью согласуется с примечанием к Постулату N1 из раздела "Постулаты квантовой механики".

Гипотеза о скрытых параметрах

Вообще говоря, понятие максимально возможного количества информации, которое доступно макроскопическому наблюдателю, может быть НЕ эквивалентно понятию полной информации, которой обладает квантовая система в чистом или смешанном состоянии.

Например, можно предположить, что существуют некие "тонкие" характеристики квантовой системы, которые принципиально не улавливаются при помощи наших грубых макроскопических приборов. И, если бы, экспериментаторы могли знать эти характеристики, то предсказания поведения квантовых систем можно было бы проводить абсолютно детерминистически в духе классической физики. Но мы не знаем и никогда не узнаем эти "тонкие" параметры. Поэтому вынуждены строить вероятностную теорию, которая относится к реальному поведению микрообъектов как, например, классическая термодинамика и статфизика к поведению классического идеального газа.

Такие "тонкие" параметры получили название скрытых параметров квантовой механики.

В настоящее время:

- кроме неизящной теории волны-пилота де Бройля-Бома не удалось построить ни одной логически непротиворечивой теории со скрытыми параметрами, которая могла бы в какой-то степени конкурировать с квантовой механикой по количеству описываемых явлений микромира при минимальных предположениях относительно базовых постулатов теории;
- экспериментально подтвержденное нарушение неравенств Белла исключает самые простые и естественные концепции скрытых параметров (локальные скрытые параметры, т.е. совместимые с аксиомами теории относительности);
- нелокальные скрытые параметры не исключены, но тогда требуется пересмотреть основы всей современной физики. А к этому нет никаких серьезных оснований.

Проще всего, вслед за Н.Бором, постулировать, что в квантовом мире случайность имеет фундаментальную природу... Но следует ли это делать?...

Пример вычисления энтропии смешанного состояния

Выше было показано, что матрица плотности $\hat{\rho}^{(1)} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ отвечает смешанному состоянию. Найдем энтропию этого состояния. Нам необходимо знать только собственные значения данной матрицы. Для этого решим характеристическое уравнение:

$$0 = \mathbf{det}\left(\hat{\rho}^{(1)} - \rho^{(1)}\hat{1}\right) = \mathbf{det}\begin{pmatrix} \frac{1}{2} - \rho^{(1)} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} - \rho^{(1)} \end{pmatrix} = \left(\frac{1}{2} - \rho^{(1)}\right)^2.$$

Из него находим два корня $\rho_1^{(1)} = \rho_2^{(1)} = 1/2$. Поэтому энтропия фон Неймана рассматриваемого состояния равна:

$$S^{(1)} = -2 \cdot \frac{1}{2}\ln\frac{1}{2} = \ln 2 \approx 0,69\,\mathbf{нат} = 1\,\mathbf{бит}.$$

Энтропия Шеннона для этого состояния составляет:

$$H^{(1)} = -2 \cdot \frac{1}{2}\log_2\frac{1}{2} = 1\,\mathbf{бит}.$$

Видно, что энтропия смешанного состояния больше нуля. Поэтому в матрице плотности смешанного состояния содержится меньше информации о квантовой системе, чем в векторе состояния чистого состояния. Это легко понять, поскольку декогеренция уничтожает информацию об относительной фазе.

Сравнение квантовой и классической энтропий

В предыдущем примере $S = H$. Но это равенство выполняется далеко не всегда. Рассмотрим двухуровневую квантовую систему с базисом $|\,1\,\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ и $|\,2\,\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$. В этом базисе определим два чистых состояния $|\,\psi_1\,\rangle = |\,1\,\rangle$ и $|\,\psi_2\,\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\,(|\,1\,\rangle + |\,2\,\rangle)$ и построим матрицу плотности смешанного состояния, если вероятности $W_1 = W_2 = 1/2$. Имеем:

$$\hat{\rho} = W_1\hat{\rho}_1 + W_2\hat{\rho}_2 = \frac{1}{2}\,(|\,\psi_1\,\rangle\,\langle\,\psi_1\,| + |\,\psi_2\,\rangle\,\langle\,\psi_2\,|) = \frac{1}{4}\begin{pmatrix}3 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}.$$

Собственные значения этой матрицы

$$\rho_1 = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\sqrt{2}}{2}\right) \approx 0,854 \;\text{ и }\; \rho_2 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\sqrt{2}}{2}\right) \approx 0,146.$$

При вычислении энтропии фон Неймана в битах удобно перейти от логарифмов по основанию "e" к логарифмам по основанию "2". Тогда находим:

$$S = -\left(\rho_1 \ln \rho_1 + \rho_2 \ln \rho_2\right) = -\ln 2 \cdot \left(\rho_1 \log_2 \rho_1 + \rho_2 \log_2 \rho_2\right) =$$

$$= \ln 2 \cdot \left(\frac{3}{2} - \frac{1}{2\sqrt{2}} \log_2 \left(\frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}-1}\right)\right) \approx 0,6 \cdot \ln 2 = 0,6\,\textbf{бит} \approx 0,86\,\textbf{нат}.$$

Для того же самого состояния классическая энтропия Шеннона равна:

$$H = -W_1 \log_2 W_1 - W_2 \log_2 W_2 = -2 \cdot \frac{1}{2} \log_2 \frac{1}{2} = 1\,\textbf{бит} \approx 1,44\,\textbf{нат}.$$

Практическое наблюдение: таким образом в рассматриваемом случае $H > S$. То есть, принципиально, при помощи квантовых систем можно передать или обработать БОЛЬШЕ информации, чем с помощью их классических аналогов. На этом основаны методы квантового сверхплотного кодирования и эффективные алгоритмы квантовых вычислений, которые реализуются с помощью запутанных состояний.

Вопрос: всегда ли $H \geq S$, или неравенство можно обратить?

Ответ: **ВСЕГДА**. Сформулируем это утверждение более строго. Пусть имеется наблюдаемая F, которая (для простоты!) обладает дискретным невырожденным спектром $\{f_\ell\}$. Если квантовая система описывается матрицей плотности $\hat{\rho}$, то каждое значение спектра измеряется с вероятностью $w_\ell = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{P}_\ell\right) = \langle\, f_\ell \,|\, \hat{\rho} \,|\, f_\ell \,\rangle$, где $\hat{P}_\ell = |\, f_\ell \,\rangle \langle\, f_\ell \,|$ – проектор на состояние $|\, f_\ell \,\rangle$. Следовательно, для величин f_ℓ можно задать ансамбль $X = \{f_\ell,\, w_\ell\}$. Тогда

$$H(X) \geq S(\hat{\rho}).$$

Равенство достигается, если $\left[\hat{F},\, \hat{\rho}\right] = 0$, то есть когда $w_i \equiv \rho_i$.

Докажем данное неравенство. Рассмотрим матрицу $\hat{\rho}$ в базисе собственных векторов $\hat{\rho} = \sum\limits_i \rho_i \,|\, \rho_i \,\rangle \langle\, \rho_i \,|$. Тогда для вероятностей w_ℓ можем записать

$$w_\ell = \sum_i |C_{\ell\, i}|^2 \rho_i, \quad \text{где} \quad C_{\ell\, i} = \langle\, f_\ell \,|\, \rho_i \,\rangle.$$

Коэффициенты $C_{\ell\, i}$ удовлетворяют условию нормировки

$$\sum_{\ell} |C_{\ell\, i}|^2 = \left\langle\, \rho_i \,\middle|\, \sum_{\ell} \hat{P}_{\ell} \,\middle|\, \rho_i \,\right\rangle = \langle\, \rho_i \,|\, \hat{1} \,|\, \rho_i \,\rangle = \langle\, \rho_i \,|\, \rho_i \,\rangle = 1.$$

Энтропия Шеннона ансамбля X имеет вид:

$$H(X) = -\sum_{\ell} w_{\ell} \ln w_{\ell}.$$

Применим к ней неравенство Йенсена. Поскольку функция $f(x) = -x \ln x$ является вогнутой, то с учетом разложения w_{ℓ} по ρ_i, которое было получено на предыдущем слайде, и используя нормировку коэффициентов $|C_{\ell\, i}|^2$, находим:

$$\begin{aligned} H(X) \;&\geq\; \sum_{\ell} \sum_{i} |C_{\ell\, i}|^2 H(\rho_i) = \sum_{i} H(\rho_i) \sum_{\ell} |C_{\ell\, i}|^2 = \sum_{i} H(\rho_i) = \\ &= \; -\sum_{i} \rho_i \ln \rho_i \; = \; S\,(\hat{\rho}). \end{aligned}$$

Неравенство доказано.

Квантовая относительная энтропия и неравенство Клейна

Пусть проводятся измерения некоторой наблюдаемой F со спектром $\{f_\ell\}$ в микросистемах, которые описываются матрицами плотности $\hat{\rho}$ и $\hat{\sigma}$ соответственно. Тогда квантовой относительной энтропией матрицы $\hat{\rho}$ по отношению к матрице $\hat{\sigma}$ называется величина

$$S\left(\hat{\rho}\,||\,\hat{\sigma}\right) = -\mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}\ln\hat{\sigma}\right) + \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}\ln\hat{\rho}\right) = -\mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}\ln\hat{\sigma}\right) - S\left(\hat{\rho}\right).$$

Квантовая относительная энтропия удовлетворяет неравенству Клейна

$$S\left(\hat{\rho}\,||\,\hat{\sigma}\right) \geq 0,$$

которое является квантовым аналогом неравенства Гиббса. Докажем это неравенство.

Пусть в базисе собственных векторов матрицы $\hat{\rho} = \sum_i \rho_i \,|\, \rho_i \,\rangle \langle\, \rho_i \,|$ и $\hat{\sigma} = \sum_k \sigma_k \,|\, \sigma_k \,\rangle \langle\, \sigma_k \,|$. Тогда

$$S\left(\hat{\rho}\,||\,\hat{\sigma}\right) = -\sum_i \langle\, \rho_i \,|\, \hat{\rho}\ln\hat{\sigma} \,|\, \rho_i \,\rangle + \sum_i \rho_i \ln\rho_i =$$

$$
\begin{aligned}
&= \; -\sum_i \rho_i \, \langle \rho_i \,|\ln\hat\sigma\,|\, \rho_i \rangle + \sum_i \rho_i \ln \rho_i \; = \\
&= \; -\sum_i \rho_i \sum_k \ln \sigma_k \,|\, \langle \rho_i \,|\, \sigma_k \rangle \,|^2 + \sum_i \rho_i \ln \rho_i .
\end{aligned}
$$

В силу вогнутости функции $f(x) = \ln x$ при $x \in (0,\, 1]$ (проверьте это самостоятельно!) можем воспользоваться неравенством Йенсена

$$
\sum_k |\, \langle \rho_i \,|\, \sigma_k \rangle \,|^2 \ln \sigma_k \; \le \; \ln \left(\sum_k |\, \langle \rho_i \,|\, \sigma_k \rangle \,|^2 \sigma_k \right) \; = \; \ln \zeta_i .
$$

Легко видеть, что $0 \le \zeta_i \le 1$ и $\sum_i \zeta_i = 1$.Тогда величины ζ_i можно трактовать как вероятности и, следовательно,

$$
S\,(\hat\rho\,||\,\hat\sigma) \; \ge \; -\sum_i \rho_i \ln \zeta_i + \sum_i \rho_i \ln \rho_i \; = \sum_i \rho_i \ln \left(\frac{\rho_i}{\zeta_i} \right) \; = \; H(P||Q) \; \ge \; 0,
$$

где используются ансамбли $P = \{f_i,\, \rho_i\}$ $Q = \{f_i,\, \zeta_i\}$. Неравенство доказано.

Квантовая совместная энтропия и субаддитивность

Пусть имеется квантовая система, которая описывается матрицей плотности $\hat{\rho}_{AB}$. И пусть эта система состоит из двух подсистем "A" и "B". Тогда квантовой совместной энтропией рассматриваемой квантовой системы называется величина

$$S\left(\hat{\rho}_{AB}\right) = -\mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}_{AB} \ln \hat{\rho}_{AB}\right).$$

Как и классическая совместная энтропия, квантовая совместная энтропия обладает свойством субаддитивности

$$S\left(\hat{\rho}_{AB}\right) \leq S\left(\hat{\rho}_{A}\right) + S\left(\hat{\rho}_{B}\right),$$

где $\hat{\rho}_A = \mathbf{Tr}_B \hat{\rho}_{AB}$ и $\hat{\rho}_B = \mathbf{Tr}_A \hat{\rho}_{AB}$ – матрицы плотности подсистем "A" и "B" соответственно. Воспользуемся очевидным свойством частичного следа

$$\mathbf{Tr}(\ldots) = \mathbf{Tr}_A\Big(\mathbf{Tr}_B(\ldots)\Big) = \mathbf{Tr}_B\Big(\mathbf{Tr}_A(\ldots)\Big).$$

и докажем свойство субаддитивности при помощи неравенства Клейна. Имеем:

$$\begin{aligned} 0 \quad &\leq \quad S\left(\hat{\rho}_{AB} \,||\, \hat{\rho}_A \otimes \hat{\rho}_B\right) = -\mathbf{Tr}\Big(\hat{\rho}_{AB} \ln\left(\hat{\rho}_A\, \hat{\rho}_B\right)\Big) - S\left(\hat{\rho}_{AB}\right) = \\ &= \quad -\mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}_{AB} \ln \hat{\rho}_A\right) - \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}_{AB} \ln \hat{\rho}_B\right) - S\left(\hat{\rho}_{AB}\right) = \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= -\mathrm{Tr}_A\Big(\mathrm{Tr}_B(\hat\rho_{AB}\ln\hat\rho_A)\Big) - \mathrm{Tr}_B\Big(\mathrm{Tr}_A(\hat\rho_{AB}\ln\hat\rho_B)\Big) - S(\hat\rho_{AB}) = \\
&= -\mathrm{Tr}_A\Big((\mathrm{Tr}_B\,\hat\rho_{AB})\ln\hat\rho_A\Big) - \mathrm{Tr}_B\Big((\mathrm{Tr}_A\,\hat\rho_{AB})\ln\hat\rho_B\Big) - S(\hat\rho_{AB}) = \\
&= -\mathrm{Tr}_A(\hat\rho_A\ln\hat\rho_A) - \mathrm{Tr}_B(\hat\rho_B\ln\hat\rho_B) - S(\hat\rho_{AB}) = S(\hat\rho_A) + S(\hat\rho_B) - S(\hat\rho_{AB}),
\end{aligned}
$$

что и требовалось доказать. Равенство достигается для некоррелированых подсистем "A" и "B", то есть когда $\hat\rho_{AB} = \hat\rho_A \otimes \hat\rho_B$.

Для квантовой энтропии выполняется свойство сильной субаддитивности, которое аналогично соответствующему свойству для классической энтропии. Пусть квантовая система описывается матрицей плотности $\hat\rho_{ABC}$ и состоит из трех подсистем "A", "B" и "C". Тогда

$$S(\hat\rho_{ABC}) + S(\hat\rho_B) \le S(\hat\rho_{AB}) + S(\hat\rho_{BC}).$$

В квантовом случае доказательство гораздо сложнее классического. Его можно найти, например, в книге М. Нильсен, И.Чанг, "Квантовые вычисления и квантовая информация", М. "Мир" (2006), § 11.4. Мы это доказательство проводить не будем.

Свойство субаддитивности для состояния Вернера

Покажем, что состояние Вернера автоматически удовлетворяет свойству субаддитивности при любых значениях $x \in [0, 1]$. Для рассматриваемого состояния размерность Гильбертова пространства $N = 4$. Поэтому из разделе "Ограничения на величину энтропии фон Неймана" сразу следует, что

$$S\left(\hat{\rho}^{(W)}\right) \le \ln 4 = 2 \ln 2.$$

В разделе "Редукционное условие сепарабельности" были найдены матрицы плотности подсистем "A" и "B" в виде

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

Используя результаты раздела "Пример вычисления энтропии смешанного состояния" для энтропий подсистем "A" и "B" немедленно можем написать, что $S\left(\hat{\rho}_A^{(W)}\right) = S\left(\hat{\rho}_B^{(W)}\right) = \ln 2$. Тогда

$$S\left(\hat{\rho}_A^{(W)}\right) + S\left(\hat{\rho}_B^{(W)}\right) = 2 \ln 2 \ge S\left(\hat{\rho}^{(W)}\right)$$

при любых $x \in [0, 1]$, что и требовалось проверить.

Субаддитивность и второе начало термодинамики

Часто второе начало термодинамики формулируют следующим образом: энтропия любой замкнутой системы (например, нашей Вселенной) не может убывать со временем. Покажем, что второе начало термодинамики может быть получено из свойства субаддитивности энтропии фон Неймана.

Рассмотрим микрочастицу "A" в термодинамическом окружении (или в термостате) "B". Пусть при $t \leq t_0$ микрочастица и окружение не взаимодействовали друг с другом. Тогда в момент времени t_0 матрицу плотности всей замкнутой системы $\hat{\rho}_0 = \hat{\rho}_{AB}(t_0)$ можно записать в виде $\hat{\rho}_0 = \hat{\rho}_{A\,0} \otimes \hat{\rho}_{B\,0}$.. По свойству субаддитивности

$$S\,(\hat{\rho}_0) \;=\; S\,(\hat{\rho}_{A\,0}) \,+\, S\,(\hat{\rho}_{B\,0}).$$

В произвольный момент времени эволюция матрицы плотности замкнутой квантовой системы может быть записана при помощи УНИТАРНОГО оператора эволюции $\hat{U}(t,\, t_0)$ в виде:

$$\hat{\rho}_{AB}(t) \;=\; \hat{U}(t,\, t_0)\,\hat{\rho}_0\,\hat{U}^{\dagger}(t,\, t_0).$$

В разделе "Квантовая энтропия" было показано, что энтропия фон Неймана не меняется при унитарных преобразованиях. Поэтому

$$S\left(\hat{\rho}_{AB}(t)\right) = S\left(\hat{\rho}_0\right).$$

С другой стороны при $t > t_0$ между микрочастицей и термостатом началось взаимодействие. Поэтому матрицу плотности всей $\hat{\rho}_{AB}(t)$ всей системы уже нельзя записать в простом факторизованном виде. Согласно условию субаддитивности это приводит к тому, что

$$S\left(\hat{\rho}_{AB}(t)\right) \le S\left(\hat{\rho}_A(t)\right) + S\left(\hat{\rho}_B(t)\right).$$

Поэтому

$$S\left(\hat{\rho}_{A\,0}\right) + S\left(\hat{\rho}_{B\,0}\right) \le S\left(\hat{\rho}_A(t)\right) + S\left(\hat{\rho}_B(t)\right).$$

Если рассматривать Вселенную как набор микрочастиц во внешнем окружении (например, в поле Хиггса, в поле реликтовых фотонов или нейтрино) то при помощи последнего неравенства можно сразу заключить, что энтропия Вселенной не может убывать. То есть со временем энтропия Вселенной достигнет максимума, установится тепловое равновесие и Вселенная придет к тепловой смерти... Ну это только в нулевом приближении...

Квантовая взаимная информация

Квантовая взаимная информация вводится по аналогии с классической $I(X:Y)$ по формуле

$$I_Q(\hat{\rho}_A : \hat{\rho}_B) = S\left(\hat{\rho}_A\right) + S\left(\hat{\rho}_B\right) - S\left(\hat{\rho}_{AB}\right) \geq 0,$$

что следует из свойства субаддитивности энтропии фон Неймана. Величина $I_Q(\hat{\rho}_A : \hat{\rho}_B)$ является мерой степени корреляции двух квантовых подсистем "A" и "B". Чтобы пояснить сказанное, приведем несколько примеров.

1) Для состояния Белла

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

матрица плотности $\hat{\rho}_{AB} = \left|\,\Psi^-\,\right\rangle\left\langle\,\Psi^-\,\right|$. Это матрица плотности чистого состояния. Поэтому $S\left(\hat{\rho}_{AB}\right) = 0$ (см. раздел "Матрица плотности чистого состояния"). В то время как матрицы плотности каждой из подсистем $\hat{\rho}_A = \hat{\rho}_B = \dfrac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$. (см. "Квантовое происхождение вероятностей W_ℓ"). Для них $S\left(\hat{\rho}_A\right) = S\left(\hat{\rho}_B\right) = \ln 2$.

Тогда квантовая взаимная информация двух подсистем в состоянии Белла

$$I_Q^{-}(\hat{\rho}_A : \hat{\rho}_B) = 2 \ln 2,$$

что означает **максимально возможную** степень корреляции.

2) Для смеси состояний

$$\hat{\rho}_{AB} = \frac{1}{2} \left(|+\rangle^{(A)} \langle +|^{(A)} \otimes |-\rangle^{(B)} \langle -|^{(B)} + |-\rangle^{(A)} \langle -|^{(A)} \otimes |+\rangle^{(B)} \langle +|^{(B)} \right)$$

энтропия всей квантовой системы $S(\hat{\rho}_{AB}) = -2\,\frac{1}{2}\,\ln\frac{1}{2} = \ln 2$. Матрицы плотности каждой из подсистем $\hat{\rho}_A = \hat{\rho}_B = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$. Для них $S(\hat{\rho}_A) = S(\hat{\rho}_B) = \ln 2$. Тогда квантовая взаимная информация смеси будет

$$I_Q^{mixt}(\hat{\rho}_A : \hat{\rho}_B) = 2 \ln 2 - \ln 2 = \ln 2$$

меньше, чем для запутанного белловского состояния.

3) Если же $\hat{\rho}_{AB} = \hat{\rho}_A \otimes \hat{\rho}_B$, то

$$I_Q^{prod}(\hat{\rho}_A : \hat{\rho}_B) = 0.$$

Любые корреляции отсутствуют.

Неравенство треугольника

Иначе оно называется неравенством Араки–Либа:

$$S\left(\hat{\rho}_{AB}\right) \geq \left|S\left(\hat{\rho}_{A}\right) - S\left(\hat{\rho}_{B}\right)\right|.$$

Данное неравенство является квантовым аналогом неравенств $H(X,Y) \geq H(X)$ и $H(X,Y) \geq H(Y)$, которые были найдены в разделе "Доказательство субаддитивности".

Докажем неравенство треугольника. Введем чистое состояние $|\,\psi_{ABC}\,\rangle$ так, что $\hat{\rho}_{AB} = \mathbf{Tr}_C\hat{\rho}_{ABC} = \mathbf{Tr}_C(|\,\psi_{ABC}\,\rangle\langle\,\psi_{ABC}\,|)$. Тогда из свойства субаддитивности следует неравенство

$$S\left(\hat{\rho}_{AC}\right) \leq S\left(\hat{\rho}_{A}\right) + S\left(\hat{\rho}_{C}\right).$$

В разделе "Разложение Шмидта" было показано, что если система, которая состоит из двух подсистем, находится в чистом состоянии, то ненулевые наборы собственных значений матриц плотности ее подсистем совпадают. Это автоматически приводит к совпадению численных значений энтропий обеих подсистем.

Разобьем квантовую систему $"ABC"$ **на подсистемы** $"AC"$ **и** $"B"$**. Тогда** $S(\hat{\rho}_{AC}) = S(\hat{\rho}_B)$**. Теперь разделим** $"ABC"$ **на подсистемы** $"AB"$ **и** $"C"$**. В этом случае** $S(\hat{\rho}_C) = S(\hat{\rho}_{AB})$**. Подставляем найденные равенства в последнее неравенство и получаем**

$$S(\hat{\rho}_B) \leq S(\hat{\rho}_A) + S(\hat{\rho}_{AB}).$$

Аналогично из условия субаддитивности

$$S(\hat{\rho}_{BC}) \leq S(\hat{\rho}_B) + S(\hat{\rho}_C)$$

приходим к неравенству

$$S(\hat{\rho}_A) \leq S(\hat{\rho}_B) + S(\hat{\rho}_{AB}).$$

Поскольку энтропия неотрицательна, то объединяя два доказанных результата при помощи модуля немедленно приходим к неравенству Араки-Либа, которое принципиально отличается от своего классического аналога.

Вогнутость квантовой энтропии

Рассмотрим матрицу плотности $\hat{\rho} = \sum\limits_{\ell} W_\ell \hat{\rho}_\ell$ такую, что матрицы плотности $\hat{\rho}_\ell$ сами являются матрицами плотности смешанных состояний. Тогда задача на собственные вектора и собственные значения каждой из таких матриц имеет вид:

$$\hat{\rho}_\ell \,|\, \rho_{\ell\, i} \,\rangle = \rho_{\ell\, i} \,|\, \rho_{\ell\, i} \,\rangle, \text{ где } \langle\, \rho_{\ell\, i} \,|\; \rho_{\ell\, i'} \,\rangle = \delta_{i\, i'} \text{ и } \sum_i \rho_{\ell\, i} = 1.$$

Наложим на вектора $|\, \rho_{\ell\, i} \,\rangle$ дополнительное условие

$$\langle\, \rho_{\ell\, i} \,|\; \rho_{\ell'\, i'} \,\rangle = \delta_{\ell\, \ell'}\, \delta_{i\, i'},$$

которое является обобщением свойства ортогональности проекторов на макроскопически различимые состояния. Тогда:

$$\hat{\rho} \,|\, \rho_{\ell\, i} \,\rangle = \left(\sum_{\ell'} W_{\ell'} \hat{\rho}_{\ell'} \right) |\, \rho_{\ell\, i} \,\rangle = W_\ell\, \rho_{\ell\, i} \,|\, \rho_{\ell\, i} \,\rangle,$$

то есть вектор $|\, \rho_{\ell\, i} \,\rangle$ является собственным вектором оператора $\hat{\rho}$, отвечающим собственному значению $W_\ell\, \rho_{\ell\, i}$.

С учетом сказанного выше, получаем:

$$S(\hat{\rho}) = -\sum_{\ell\, i} (W_\ell\, \rho_{\ell\, i}) \ln (W_\ell\, \rho_{\ell\, i}) = -\sum_{\ell} W_\ell \ln W_\ell \left(\sum_{i} \rho_{\ell\, i} \right) - $$
$$- \sum_{\ell} W_\ell \left(\sum_{i} \rho_{\ell\, i} \ln \rho_{\ell\, i} \right) = H(X) + \sum_{\ell} W_\ell\, S(\hat{\rho}_\ell),$$

где ансамбль $X = \{\rho_{\{i\}\,\ell},\ W_\ell\}$. Поскольку энтропия Шеннона всегда неотрицательна (т.е. $H(X) \geq 0$), то немедленно получаем свойство вогнутости энтропии фон Неймана:

$$S\left(\sum_{\ell} W_\ell \hat{\rho}_\ell \right) \geq \sum_{\ell} W_\ell\, S(\hat{\rho}_\ell).$$

Это свойство полностью аналогично свойству вогнутости энтропии Шеннона. Его также можно вывести при помощи неравенства Йенсена или из свойства субаддитивности (см., например, книгу Дж.Прескилл, "Квантовая информация и квантовые вычисления", т.1, стр.278, М. "РХД" (2008)). Проделайте эти выводы самостоятельно.

Теорема о невозможности передачи произвольного смешанного состояния

В параграфе "Постулаты квантовой механики" была доказана теорема о невозможности клонирования произвольного чистого состояния. Имеется аналогичная теорема о невозможности передачи произвольного смешанного состояния (так называемая "No-broadcast theorem").

Теорема: предположим, что имеется некоторое квантовое состояние, которое описывается матрицей плотности $\hat{\rho}$. Тогда невозможно создать микросистему с матрицей плотности $\hat{\rho}_{AB}$ в прямом произведении гильбертовых пространств $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ такую, что $\mathrm{Tr}_A\, \hat{\rho}_{AB} = \hat{\rho}$ и $\mathrm{Tr}_B\, \hat{\rho}_{AB} = \hat{\rho}$.

Доказательство этой теоремы можно найти в работе Barnum, H., C. M. Caves, C. A. Fuchs, R. Jozsa, and B. Schumacher, Physical Review Letters vol.76, p.2818 (1996).

Хотя точная передача смешанного состояния невозможна, но приближенная, иначе, неточная передача смешанного состояния осуществима. Это было показано в работе: V. Buzek and M. Hillery, Physical Review A 54, p.1844 (1996).

Приближенное копирование чистого состояния. ''Угадайка''

Чтобы понимать эффективность различных алгоритмов неточного копирования, данную эффективность необходимо определить количественно и с чем-то сравнивать. Примем за меру эффективности степень совпадения (fidelity)

$$F_0\left(\hat{\rho},\, \hat{\sigma}\right) \;=\; \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{\sigma}^{\dagger}\right)$$

между матрицей плотности $\hat{\rho} = |\,\psi\,\rangle\,\langle\,\psi\,|$ чистого состояния, которое надо скопировать, и матрицей плотности $\hat{\sigma}$, которая получилась в результате процедуры копирования.

В качестве реперной степени совпадения возьмем среднюю степень совпадения, которая получается, если пробовать случайно угадать искомую матрицу плотности $\hat{\rho}$.

Для вычисления $F_0\left(\hat{\rho},\, \hat{\sigma}\right)$ рассмотрим "угадайку" чистого состояния спина $s = 1/2$, записанного в самой общей форме

$$|\,\psi\,\rangle \;=\; \cos\,\frac{\theta}{2}\;|+\rangle \;+\; e^{i\phi}\sin\,\frac{\theta}{2}\;|-\rangle.$$

Ему соответствует матрица плотности $\hat{\rho} = |\,\psi\,\rangle\,\langle\,\psi\,|$.

Пусть в результате угадывания неизвестному состоянию $|\,\psi\,\rangle$ мы сопоставили известное состояние

$$|\,\varphi\,\rangle \;=\; \cos\,\frac{\alpha}{2}\;|+\rangle \;+\; e^{i\beta}\sin\,\frac{\alpha}{2}\;|-\rangle,$$

которому соответствует матрица плотности $\hat\sigma = |\,\varphi\,\rangle\,\langle\,\varphi\,|$. Тогда средняя степень совпадения

$$\begin{aligned}
F_0^{\mathbf{base}}(\hat\rho,\,\hat\sigma) \;&=\; \int\frac{d\cos\theta\,d\phi}{4\,\pi}\,\mathbf{Tr}\left(\hat\rho\,\hat\sigma^{\dagger}\right) \;=\; \int\frac{d\cos\theta\,d\phi}{4\,\pi}\;|\langle\,\varphi\,|\;\;\psi\,\rangle|^2 \;=\\
&=\; \int\frac{d\cos\theta\,d\phi}{4\,\pi}\left|\cos\,\frac{\theta}{2}\,\cos\,\frac{\alpha}{2}\,+\,e^{i(\phi-\beta)}\,\sin\,\frac{\theta}{2}\,\sin\,\frac{\alpha}{2}\right|^2 \;=\\
&=\; \int\frac{d\cos\theta\,d\phi}{4\,\pi}\Bigg(\cos^2\frac{\theta}{2}\,\cos^2\frac{\alpha}{2}\,+\,\sin^2\frac{\theta}{2}\,\sin^2\frac{\alpha}{2}\,+\\
&+\; \frac{1}{2}\,\sin\theta\,\sin\alpha\,\cos(\phi-\beta)\Bigg) \;=\\
&=\; \int\frac{d\cos\theta}{2}\left(\cos^2\frac{\theta}{2}\,\cos^2\frac{\alpha}{2}\,+\,\sin^2\frac{\theta}{2}\,\sin^2\frac{\alpha}{2}\right) \;=\\
&=\; \frac{1}{2}\left(\cos^2\frac{\alpha}{2}\,+\,\sin^2\frac{\alpha}{2}\right) \;=\; \frac{1}{2}.
\end{aligned}$$

Мы видим, что результат никак не зависит от выбора случайного состояния $|\varphi\rangle$.

В процессе вычисления мы воспользовались тем, что интегрирование периодической функции по периоду дает ноль, а

$$\int\limits_{-1}^{1} d\cos\theta\ \cos^2\frac{\theta}{2} = 1 \qquad \text{и} \qquad \int\limits_{-1}^{1} d\cos\theta\ \sin^2\frac{\theta}{2} = 1.$$

Остальные детали интегрирования восстановить несложно.

Таким образом мы получили, что если клонировать угадыванием неизвестное состояние $\hat{\rho}$, то степень совпадения полученного состояния $\hat{\sigma}$ с оригиналом будет

$$F_0^{\mathbf{base}}(\hat{\rho}, \hat{\sigma}) = \frac{1}{2}.$$

Любой алгоритм, который приводит к степени совпадения между клоном и оригиналом больше, чем $1/2$, уже может быть назван осмысленным алгоритмом приближенного копирования.

Приближенное копирование чистого состояния. "Идентификация"

Опять рассмотрим состояние спина $s = 1/2$ **в виде**

$$|\,\psi\,\rangle \;=\; \cos\,\frac{\theta}{2}\;|\,+\,\rangle \,+\, e^{i\phi}\sin\,\frac{\theta}{2}\;|\,-\,\rangle.$$

Идея алгоритма идентификации заключается в том, чтобы сначала провести измерение над состоянием $|\,\psi\,\rangle$ **в базисе** $|\,\pm\,\rangle$**. А затем копировать получившееся в результате измерения ИЗВЕСТНОЕ состояние** $|\,+\,\rangle$ **или** $|\,-\,\rangle$**.**

Поскольку состояние $|\,+\,\rangle$ **возникает с вероятностью** $\cos^2\frac{\theta}{2}$**, а состояние** $|\,-\,\rangle$ **– с вероятностью** $\sin^2\frac{\theta}{2}$**, то матрица плотности состояния, которое получается при подобной процедуре копирования, имеет вид**

$$\hat{\sigma} \;=\; \cos^2\frac{\theta}{2}\;|\,+\,\rangle\langle\,+\,| \,+\, \sin^2\frac{\theta}{2}\;|\,-\,\rangle\langle\,-\,|.$$

Введем матрицу плотности $\hat{\rho} = |\,\psi\,\rangle\langle\,\psi\,|$ **неизвестного чистого состояния** $|\,\psi\,\rangle$ **и вычислим среднюю степень совпадения алгоритма идентификации.**

$$
\begin{aligned}
F_0^{\mathbf{ident}}(\hat\rho,\,\hat\sigma) &= \int \frac{d\cos\theta\, d\phi}{4\,\pi}\,\mathbf{Tr}\left(\hat\rho\,\hat\sigma^{\dagger}\right) = \int \frac{d\cos\theta\, d\phi}{4\,\pi}\,\langle\,\psi\,|\,\hat\sigma\,|\,\psi\,\rangle = \\
&= \int \frac{d\cos\theta\, d\phi}{4\,\pi}\left(\cos^4\frac{\theta}{2} + \sin^4\frac{\theta}{2}\right) = \frac{2}{3}.
\end{aligned}
$$

В процессе вычисления мы воспользовались следующими интегралами

$$
\int\limits_{-1}^{1} d\cos\theta\;\cos^4\frac{\theta}{2} = \frac{2}{3} \qquad \text{и} \qquad \int\limits_{-1}^{1} d\cos\theta\;\sin^4\frac{\theta}{2} = \frac{2}{3}.
$$

Поскольку

$$
F_0^{\mathbf{ident}}(\hat\rho,\,\hat\sigma) = \frac{2}{3} > \frac{1}{2},
$$

то процедура идентификации дает результат лучший, чем простое угадывание. То есть алгоритм идентификации можно рассматривать как один из возможных алгоритмов неточного копирования. Однако этот алгоритм не дает наибольшего возможного значения степени совпадения.

Оптимальное копирование чистого состояния

Для оптимального копирования, при котором достигается максимально возможная степень совпадения, необходимо ввести помимо состояний спина копируемой системы $|\pm\rangle$ еще вспомогательную систему ("ancilla") в некотором состоянии $|a\rangle$ и универсальную копирующую машину (UCM), которая обладает двумя ортогональными состояниями $|q_+\rangle$ и $|q_-\rangle$. Алгоритм оптимального копирования следующий:

$$|+\rangle \otimes |a\rangle \otimes |Q\rangle \quad \to \quad \sqrt{\frac{2}{3}}|+\rangle \otimes |+_a\rangle \otimes |q_+\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|\Psi^+\rangle \otimes |q_-\rangle;$$

$$|-\rangle \otimes |a\rangle \otimes |Q\rangle \quad \to \quad \sqrt{\frac{2}{3}}|-\rangle \otimes |-_a\rangle \otimes |q_-\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|\Psi^+\rangle \otimes |q_+\rangle,$$

где запутанное состояние $|\Psi^+\rangle$ определено в параграфе "Состояния Белла". Если до процедуры копирования система находилась в состоянии $|\psi\rangle$, то после копирования "ANCILLA" будет находится в состоянии

$$\hat{\rho}_a = \frac{5}{6}|\psi\rangle\langle\psi| + \frac{1}{6}\left|\psi^\perp\right\rangle\left|\psi^\perp\right\rangle,$$

где $|\psi^\perp\rangle$ – состояние, ортогональное $|\psi\rangle$. Таким образом

$$F_0^{\max}(\hat{\rho}, \hat{\rho}_a) = \frac{5}{6} > \frac{1}{2}.$$

Доказательство см. в работе V. Buzek, M. Hillery, "Quantum copying: beyond the no-cloning theorem", Phys. Rev. A 54, 1844 (1996).

Часть 8

НЕРАВЕНСТВА БЕЛЛА И КОРРЕЛЯЦИИ В КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ

”Shut up and contemplate!” (”Заткнись и размышляй!”). Luchien Hardy and Robert Spekkens, 2010 год.

Совместная измеримость и неизмеримость

Одним из фундаментальных вопросов квантовой физики является вопрос о том, в какой степени физические свойства микрообъектов определяются процедурой измерения и конструкцией макроприборов, использующихся в эксперименте?

Согласно Копенгагенской интерпретации квантовой механики, не имеет смысла говорить о свойствах микрообъекта без конкретизации, при помощи какого макроприбора эти свойства измерены. Сторонники данной интерпретации считают, что максимально доступная информация о физических свойствах микросистемы определяется набором наблюдаемых, которые измеряются при помощи макроприбора одного типа. О таких наблюдаемых говорят, что они совместно или одновременно (второй термин представляется мне менее удачным) измеримы.

С точки зрения математического формализма квантовой теории процесс измерения соответствует разложению вектора состояния $|\,\psi\,\rangle$ любой микросистемы в суперпозицию ортогональных $\langle\, i\,|\, i'\,\rangle = \delta_{i\,i'}$ (иначе говоря, макроскопически различимых) состояний $|\,i\,\rangle$:

$$|\,\psi\,\rangle = \sum_i C_i\,|\,i\,\rangle.$$

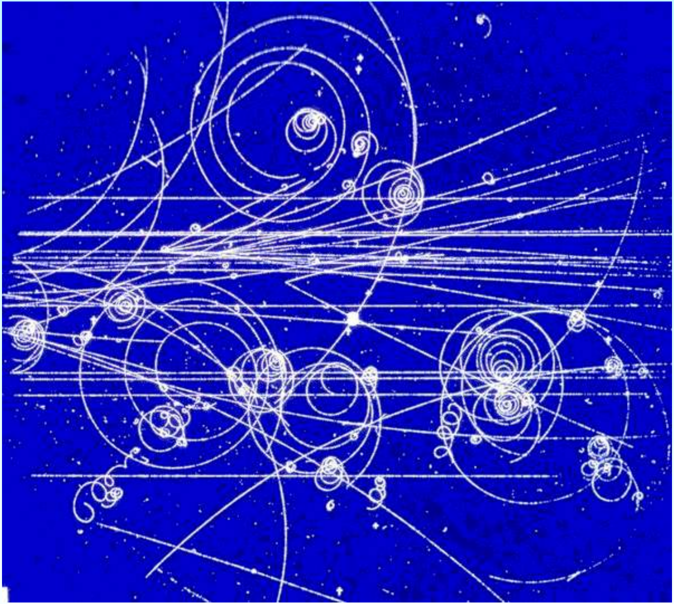
Справедливость данного утверждения была обоснована еще в параграфе "Модель измерения по фон Нейману".

Если характеристик F_A и G_B данной микросистемы совместно измеримы, то базисные вектора $|\, i\,\rangle$ должны быть ОБЩИМИ собственными векторами операторов $\hat{F}_A$ и $\hat{G}_B$, что ведет к условию $\left[\hat{F}_A, \hat{G}_B\right] = 0$. Соответственно, если операторы между собой не коммутируют, то они не имеют общей системы собственных векторов, и характеристики F_A и G_B не могут быть совместно измерены (измерены с нулевой дисперсией!) любыми макроприборами.

Напомним, что наблюдаемые F_A и F'_A, квантовомеханические операторы которых не коммутируют, могут быть измерены вместе, но точности их измерения (дисперсии) ΔF_A и $\Delta F'_A$ подчиняются соотношению неопределенностей Гейзенберга

$$\Delta F_A \, \Delta F'_A \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Например, в пузырьковой камере можно видеть трек заряженной частицы и то, как этот трек изгибается в магнитном поле. По кривизне трека легко измерить импульс частицы. Однако, произведение ширины трека Δx и разрешения по импульсу Δp для всех реальных пузырьковых камер на много порядков превосходят величину $\hbar/2$.



Треки частиц в пузырьковой камере Д.Глейзера, 1952 год.

Везде ниже, когда мы будем говорить об одновременно измеримых величинах, всегда будем полагать, что измерения производятся с нулевой дисперсией для каждой из наблюдаемых.

В квантовой теории легко предъявить некоммутирующие между собой операторы, отвечающие физическим характеристикам любой наперед выбранной микросистемы . Например, это могут быть операторы проекций спина $s = 1/2$ на непараллельные направления для фермионов.

Напомним, что в нерелятивистском случае оператор спина фермиона $s = 1/2$ можно записать в виде вектора $\hat{\vec{s}} = \vec{\sigma}/2$, декартовы компоненты которого не коммутируют между собой:

$$\left[\hat{s}^i, \hat{s}^j\right] = i\,\varepsilon^{ijk}\,\hat{s}^k, \text{ или } \left[\sigma^i, \sigma^j\right] = 2\,i\,\varepsilon^{ijk}\,\sigma^k, \text{ где } \varepsilon^{123} = +1$$

и σ^i – матрицы Паули, ε^{ijk} – полностью антисимметричный тензор третьего ранга. Операторы $\hat{s}^i$ не обладают общей системой собственных векторов, что, с точки зрения Копенгагенской интерпретации, эквивалентно невозможности одновременного точного измерения определенного значения проекций спина $s = 1/2$ на ЛЮБЫЕ два и более непараллельных направления при помощи одного макроприбора.

Понятие об элементах физической реальности

По-видимому, в статье A.Einstein, B.Podolsky, and N.Rosen ”Can quantum mechanical description of physical reality be considered complete?”, Phys. Rev.47, p.777 (1935) был впервые поставлен вопрос о том, могут ли характеристики некоторой микросистемы, которым в квантовой теории соответствуют некоммутирующие операторы, существовать одновременно (или *”быть одновременно элементами физической реальности”* по А.Эйнштейну), даже если эти характеристики невозможно совместно измерить ни одним макроприбором, который был, есть или будет в нашем распоряжении?

Для дальнейшего обсуждения необходимо разумно определить элемент физической реальности. Альберт Эйнштейн предложил следующую формулировку: *”Если мы можем без какого бы то ни было возмущения системы предсказать с вероятностью, равной единице, значение некоторой физической характеристики этой системы, то существует элемент физической реальности, который соответствует такой характеристике”* и *"каждый элемент физической реальности должен иметь отражение в физической теории"*.

На первый взгляд может показаться, что определение Эйнштейна бесполезно и не вносит ничего нового в понимание квантовой теории. Действительно, если две наблюдаемые измеримы совместно, то не нужно сначала предсказывать значение одной из них без возмущения микросистемы, а потом проводить измерение другой, которое должно привести к редукции вектора состояния.

Если же две физические характеристики одновременно не измеримы, то, казалось бы, не существует никакой возможности без возмущения микросистемы точно предсказать значение одной из наблюдаемых, не изменив вектора состояния изучаемой системы, а потом точно измерить другую наблюдаемую в этом состоянии, поскольку такая процедура противоречит соотношению неопределенностей Гейзенберга. Но в этом месте интуиция нас подводит. На самом деле, КОСВЕННО значения наблюдаемой можно достоверно предсказать при помощи запутанных состояний. И эта процедура НЕ противоречит фундаментальным принципам нерелятивистской квантовой механики!

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

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

Матрица плотности всей системы $\hat{\rho} = \left|\, \Psi^- \,\right\rangle \left\langle\, \Psi^- \,\right|$. Пусть теперь в подсистеме B измерено значение спина $s_z^{(B)} = +1/2$. Тогда согласно проекционному постулату Дирака – фон Немана матрица плотности подсистемы A будет иметь вид:

$$\hat{\rho}^{(A)} = \mathbf{Tr}_B \left(\frac{(\hat{1}^{(A)} \otimes \hat{P}_+^{(B)})\, \hat{\rho}\, (\hat{1}^{(A)} \otimes \hat{P}_+^{(B)})}{\mathbf{Tr}\left((\hat{1}^{(A)} \otimes \hat{P}_+^{(B)})\, \hat{\rho} \right)} \right) = \hat{P}_-^{(A)},$$

где $\hat{P}_\pm^{(\alpha)} = \left|\, \pm \,\right\rangle^{(\alpha)} \left\langle\, \pm \,\right|^{(\alpha)}$ – 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 $s_z^{(B)} = +1/2$:

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

Из данного примера мы видим, что при помощи запутанного состояния и понятия условной вероятности можно придать операционный смысл эйнштейновскому понятию "элемента физической реальности".

Действительно, только по измерению в подсистеме B и не разрушая подсистему A можно **КОСВЕННО предсказать** проекцию спина $s_z^{(A)}$ **с вероятностью, равной единице**. Теперь в подсистеме A можно измерить проекцию спина на любую другую ось, не параллельную оси z. Заметим, что проекции спинов подсистем A и B на любые непараллельные направления совместно измеримы, поскольку для соответствующих проекторов

$$\left[\hat{P}_i^{(A)} \otimes \hat{1}^{(B)}, \hat{1}^{(A)} \otimes \hat{P}_j^{(B)}\right] = 0,$$

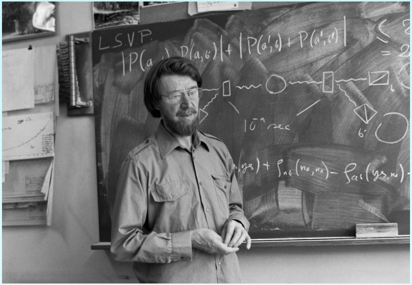
где $\{i, j\} = \{+, -\}$. То есть мы НЕ вступили в противоречие с соотношением неопределенностей Гейзенберга!

Неравенств Белла. Историческая справка

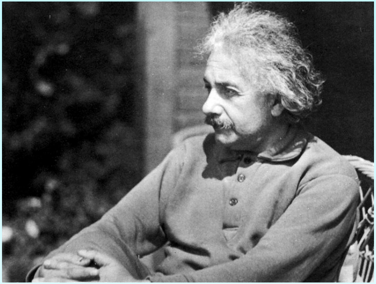
Первая удачная попытка перевести вопрос о совместном существовании элементов физической реальности, соответствующих одновременно неизмеримым величинам, из области умозрительных рассуждений в экспериментальную плоскость была предпринята Дж.Беллом в двух работах 1964-ого и 1966-ого годов (J.S.Bell, ”On the Einstein-Podolsky-Rosen paradox”, Physics 1, p.195 (1964) и J.S.Bell, ”On the Problem of Hidden Variables in Quantum Mechanics”, Rev. Mod. Phys. 38, p.447 (1966)).

В дальнейшем идеи Дж.Белла были развиты Клаузером, Хорном, Шимони и Хольтом в работе J.F.Clauser, M.A.Horne, A.Shimony and R.A.Holt, ”Proposed experiment to test local hidden variable theories”, Phys. Rev. Lett. 23, p.880 (1969). (так называемые BCHSH-неравенства). Обычно именно эти неравенства называют неравенствами Белла, хотя сам Дж.Белл не имел к их выводу прямого отношения.

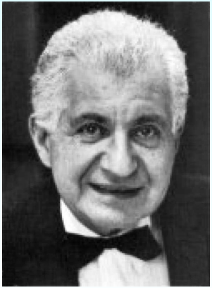
Ниже мы приведем три различных доказательства BCHSH-неравенства (”простое”; ”сложное”, основанное на неотрицательности совместных вероятностей; ”исторически первое”, использующее гипотезу о скрытых параметрах) и покажем, что BCHSH-неравенства нарушаются в квантовой механике на любых запутанных состояниях.



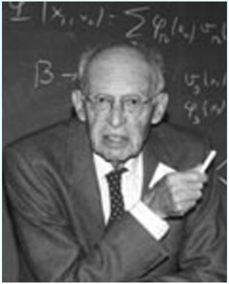
Дж. Белл (1928 – 1990)



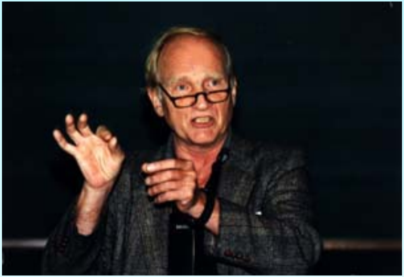
А.Эйнштейн (1879 – 1955)



Б.Подольский (1896 – 1966)



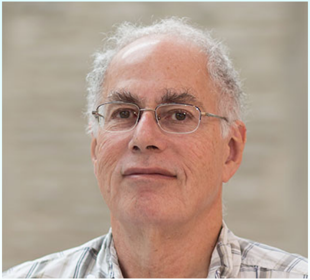
Н.Розен (1909 – 1995)



J.F.Clauser

M.A.Horne

A.Shimony



R.A.Holt

Неравенств Белла. Основная идея

Как записать, что некоторая совокупность физических характеристик микросистемы одновременно является элементом физической реальности, даже если эта совокупность совместно не может быть измерена никаким макроприбором? Хорошая возможность заключается в предположении, что совместная вероятность одновременного существования рассматриваемой совокупности наблюдаемых неотрицательна.

Далее необходимо найти соотношение, которое:

а) может быть получено из предположения о существовании неотрицательных совместных вероятностей и, возможно, некоторых дополнительных условий, накладываемых на процедуру измерения (обычно требуется локальность);

б) может быть вычислено в рамках квантовой теории;

в) поддается экспериментальной проверке с помощью макроприборов.

Предсказания пунктов а) и б) НЕ должны полностью совпадать, чтобы можно было поставить критический эксперимент.

Простой вывод BCHSH-неравенства

Пусть имеются подсистемы A и B, которые являются частями некоторой общей системы. Для подсистемы A рассмотрим две наблюдаемые F_A и F'_A, относящиеся только к этой подсистеме. Для подсистемы B аналогично определим две наблюдаемые G_B и G'_B, которые относятся только к этой подсистеме.

Дополнительно потребуем, чтобы наблюдаемые F_A, F'_A, G_B и G'_B были дихотомными, то есть, чтобы спектр каждой из наблюдаемых принимал всего два значения ± 1. Очевидно, что дихотомными переменными являются, например, удвоенные проекции спинов электронов или фотонов на любое направление.

Если все четыре наблюдаемые одновременно являются элементами физической реальности, то тогда с неотрицательной вероятностью существуют всевозможные наборы элементов их спектров $\{f_i^{(A)}, {f'}_j^{(A)}, g_k^{(B)}, {g'}_m^{(B)}, \}$, даже если эти наборы невозможно измерить ни одним макроприбором. Составим из этих наборов суммы вида

$$S_{ijkm} = \left({f'}_j^{(A)} + f_i^{(A)}\right) g_k^{(B)} + \left({f'}_j^{(A)} - f_i^{(A)}\right) {g'}_m^{(B)}.$$

Легко проверить, что для любых комбинаций $\{i, j, k, m\} = \{+, -\}$ **верно равенство:**

$$S_{ijkm} = \pm 2.$$

Зададим выборку из $N \gg 1$ **комбинаций. Пусть каждая комбинация** S_{ijkm} **встречается в этой выборке** $N_{ijkm} \gg 1$ **раз. Тогда для среднего значения величины** S **по данной выборке можем записать**

$$|\langle S \rangle| = \left| \frac{1}{N} \sum_{i,\, j,\, k,\, m} S_{ijkm} \, N_{ijkm} \right| \leq 2.$$

Данное неравенство можно переписать в эквивалентной форме:

$$|\langle F_A \, G_B \rangle - \langle F_A \, G'_B \rangle + \langle F'_A \, G_B \rangle + \langle F'_A \, G'_B \rangle| \leq 2.$$

Таким образом, если дихотомные наблюдаемые F_A**,** F'_A**,** G_B **и** G'_B **одновременно являются элементами физической реальности, то среднее значение величины** S **для любой выборки НИКОГДА не превзойдет по модулю двойки. Это и есть одна из форм BCHSH-неравенства. Данное предсказание нужно сравнить с тем, что можно получить для значения величины** $|\langle S \rangle|$ **из квантовой механики.**

Вывод BCHSH-неравенства из условия неотрицательности совместных вероятностей

Предыдущий вывод BCHSH-неравенства лишь косвенно использовал предположение о неотрицательности совместных вероятностей совокупности наблюдаемых. Теперь покажем, как это предположение может быть использовано явно.

Пусть для всех наборов $\{f_i^{(A)}, {f'}_j^{(A)}, g_k^{(B)}, {g'}_m^{(B)},\}$ **четверные совместные вероятности**

$$1 \geq w\left(f_i^{(A)}, {f'}_j^{(A)}, g_k^{(B)}, {g'}_m^{(B)}\right) \geq 0.$$

Элементарно проверить, что любые тройные и двойные совместные вероятности также неотрицательны. Действительно, например

$$w\left(f_i^{(A)}, {f'}_j^{(A)}, g_k^{(B)}\right) = \sum_{m=\pm} w\left(f_i^{(A)}, {f'}_j^{(A)}, g_k^{(B)}, {g'}_m^{(B)}\right) \geq 0$$

и

$$w\left(f_i^{(A)}, g_k^{(B)}\right) = \sum_{j=\pm} w\left(f_i^{(A)}, {f'}_j^{(A)}, g_k^{(B)}\right) \geq 0.$$

Помимо этого совместные вероятности подчиняются естественным условиям нормировки:

$$\sum_{i,j,k,m} w\left(f_i^{(A)},\ f'^{(A)}_j,\ g_k^{(B)},\ g'^{(B)}_m\right) = 1;$$

$$\sum_{i,j,k} w\left(f_i^{(A)},\ f'^{(A)}_j,\ g_k^{(B)}\right) = 1; \quad \ldots \quad \text{все остальные тройные};$$

и

$$\sum_{i,k} w\left(f_i^{(A)},\ g_k^{(B)}\right) = 1; \quad \ldots \quad \text{плюс все остальные двойные}$$

и условиям соответствия типа: $w\left(f_i^{(A)}, g_k^{(B)}\right) \geq w\left(f_i^{(A)}, f'^{(A)}_j, g_k^{(B)}\right)$**,**

$w\left(f_i^{(A)}, g_k^{(B)}, g'^{(B)}_m\right) \geq w\left(f_i^{(A)}, f'^{(A)}_j, g_k^{(B)}, g'^{(B)}_m\right)$ **плюс все аналогичные им.**

Поскольку величины $f_i^{(A)}$, $f'^{(A)}_j$, $g_k^{(B)}$ и $g'^{(B)}_m$ принимают значения только ± 1, то любое суммирование по индексам может быть записано в явной форме следующим образом:

$$\begin{aligned} w(\ldots, x_\alpha, y_\beta, \ldots) &= \sum_{\ldots \ell \ldots} w(\ldots, x_\alpha,\ h_\ell,\ y_\beta, \ldots) = \\ &= w(\ldots, x_\alpha,\ +h_\ell,\ y_\beta \ldots) + w(\ldots, x_\alpha,\ -h_\ell,\ y_\beta, \ldots). \end{aligned}$$

Теперь можно начать доказательство. Рассмотрим величину

$$\Lambda\left(f_i^{(A)}, {f'}_j^{(A)}, g_k^{(B)}, {g'}_m^{(B)}\right) = w\left(f_i^{(A)}, g_k^{(B)}\right) - w\left(f_i^{(A)}, {g'}_m^{(B)}\right) + \\ + w\left({f'}_j^{(A)}, g_k^{(B)}\right) + w\left({f'}_j^{(A)}, {g'}_m^{(B)}\right) - w\left({f'}_j^{(A)}\right) - w\left(g_k^{(B)}\right).$$

Проверим, что эта величина удовлетворяет неравенству

$$-1 \le \Lambda\left(f_i^{(A)}, {f'}_j^{(A)}, g_k^{(B)}, {g'}_m^{(B)}\right) \le 0.$$

I) Начнем с *неположительности* $\Lambda(\ldots)$. Имеем

$$\begin{aligned} 0 \quad &\le \quad w\left({f'}_j^{(A)}, -g_k^{(B)}, -{g'}_m^{(B)}\right) = w\left({f'}_j^{(A)}, -g_k^{(B)}\right) - w\left({f'}_j^{(A)}, -g_k^{(B)}, {g'}_m^{(B)}\right) = \\ &= \quad w\left({f'}_j^{(A)}\right) - w\left({f'}_j^{(A)}, g_k^{(B)}\right) - w\left({f'}_j^{(A)}, {g'}_m^{(B)}\right) + w\left({f'}_j^{(A)}, g_k^{(B)}, {g'}_m^{(B)}\right). \end{aligned}$$

Далее

$$w\left({f'}_j^{(A)}, g_k^{(B)}, {g'}_m^{(B)}\right) = w\left(f_i^{(A)}, {f'}_j^{(A)}, g_k^{(B)}, {g'}_m^{(B)}\right) + w\left(-f_i^{(A)}, {f'}_j^{(A)}, g_k^{(B)}, {g'}_m^{(B)}\right) \le$$

$$\le w\left(f_i^{(A)}, {g'}_m^{(B)}\right) + w\left(-f_i^{(A)}, g_k^{(B)}\right) = w\left(f_i^{(A)}, {g'}_m^{(B)}\right) + w\left(g_k^{(B)}\right) - w\left(f_i^{(A)}, g_k^{(B)}\right).$$

Подставив последнее неравенство в предпоследнее немедленно получаем утверждение о неположительности $\Lambda(\ldots)$.

II) Теперь докажем, что $\Lambda(\ldots)$ превосходит величину $"-1"$.

$$0 \le w\left(-f'^{(A)}_j, -g^{(B)}_k, -g'^{(B)}_m\right) = w\left(-g^{(B)}_k, -g^{(B)}_k\right) - w\left(f'^{(A)}_j, -g^{(B)}_k, -g'^{(B)}_m\right) =$$

$$= w\left(-g^{(B)}_k\right) - w\left(-g^{(B)}_k, g'^{(B)}_m\right) - w\left(f'^{(A)}_j, -g^{(B)}_k, -g'^{(B)}_m\right) =$$

$$= 1 - w\left(g^{(B)}_k\right) - w\left(g'^{(B)}_m\right) + w\left(g^{(B)}_k, g'^{(B)}_m\right) - w\left(f'^{(A)}_j, -g^{(B)}_k, -g'^{(B)}_m\right) =$$

$$\begin{aligned}
= \;& 1 - w\left(f'^{(A)}_j\right) - w\left(g^{(B)}_k\right) - w\left(g'^{(B)}_m\right) + w\left(f'^{(A)}_j, g^{(B)}_k\right) + w\left(f'^{(A)}_j, g'^{(B)}_m\right) + \\
+ \;& w\left(g^{(B)}_k, g'^{(B)}_m\right) - w\left(f'^{(A)}_j, g^{(B)}_k, g'^{(B)}_m\right) = 1 - w\left(f'^{(A)}_j\right) - w\left(g^{(B)}_k\right) + \\
+ \;& w\left(f'^{(A)}_j, g^{(B)}_k\right) + w\left(f'^{(A)}_j, g'^{(B)}_m\right) + \left[w\left(-f'^{(A)}_j, g^{(B)}_k, g'^{(B)}_m\right) - w\left(g'^{(B)}_m\right)\right].
\end{aligned}$$

Воспользуемся неравенством (докажите его самостоятельно)

$$w\left(-f'^{(A)}_j, g^{(B)}_k, g'^{(B)}_m\right) - w\left(g'^{(B)}_m\right) \le w\left(f^{(A)}_i, g^{(B)}_k\right) - w\left(f^{(A)}_i, g'^{(B)}_m\right),$$

тогда

$$0 \le 1 - w\left(f'^{(A)}_j\right) - w\left(g^{(B)}_k\right) + w\left(f'^{(A)}_j, g^{(B)}_k\right) + w\left(f'^{(A)}_j, g'^{(B)}_m\right) +$$
$$+ \; w\left(f^{(A)}_i, g^{(B)}_k\right) - w\left(f^{(A)}_i, g'^{(B)}_m\right) = 1 + \Lambda\left(f^{(A)}_i,\, f'^{(A)}_j,\, g^{(B)}_k,\, g'^{(B)}_m\right).$$

Таким образом доказана и вторая часть неравенства.

III) На заключительном этапе доказательства распишем подробно, например, выражение для $\langle\, F_A\, G_B \,\rangle$. Имеем:

$$\langle\, F_A\, G_B \,\rangle = \sum_{i,\,k} f^{(A)}_i\, g^{(B)}_k\, w\left(f^{(A)}_i, g^{(B)}_k\right) =$$
$$= w\,(+1,\, +1) + w\,(-1,\, -1) - w\,(+1,\, -1) - w\,(-1,\, +1).$$

Аналогично можно расписать $\langle\, F_A\, G'_B \,\rangle$, $\langle\, F'_A\, G_B \,\rangle$ и $\langle\, F'_A\, G'_B \,\rangle$. Тогда простыми (но несколько длинными и нудными) алгебраическими преобразованиями находим, что

$$\langle\, F_A\, G_B \,\rangle - \langle\, F_A\, G'_B \,\rangle + \langle\, F'_A\, G_B \,\rangle + \langle\, F'_A\, G'_B \,\rangle = \Lambda\,(+1,\, +1,\, +1\, + 1) +$$
$$+\Lambda\,(-1,\, -1,\, -1\, - 1) - \Lambda\,(+1,\, -1,\, +1\, - 1) - \Lambda\,(-1,\, +1,\, -1\, + 1).$$

Поскольку

$$-2 \leq \Lambda(+1, +1, +1 + 1) + \Lambda(-1, -1, -1 - 1) \leq 0;$$
$$0 \leq -\Lambda(+1, -1, +1 - 1) - \Lambda(-1, +1, -1 + 1) \leq 2,$$

то

$$|\langle F_A G_B \rangle - \langle F_A G'_B \rangle + \langle F'_A G_B \rangle + \langle F'_A G'_B \rangle| \leq 2.$$

Таким образом мы получили BCHSH-неравенство другим способом. Именно, из условия неотрицательности четверных совместных вероятностей. Заметим, что при доказательстве неявно было также использовано условие отсутствия каких-либо корреляций между наблюдаемыми F_A, F'_A, G_B и G'_B.

Впервые такой вывод BCHSH-неравенства был дан в работе W.M. de Muynck, "The Bell inequalities and their irrelevance to the problem of locality in quantum mechanics", Phys. Lett. 114A, p.65 (1986). Более ясный и простой вариант можно найти в статье А.В.Белинского "Неравенства Белла без предположения о локальности", "Успехи физических наук" т.164, N2, стр.231 (1994).

Willem M. de Muynck
Eindhoven University of Technology,
Netherlands

А.В.Белинский
МГУ им. М.В.Ломоносова,
Россия

No-signaling Conditions

Вывод BCHSH-неравенства из условия неотрицательности совместных вероятностей содержит в себе дополнительную тонкость. Именно, все четверные $w\left(f_i^{(A)}, {f'}_j^{(A)}, g_k^{(B)}, {g'}_m^{(B)}\right)$, тройные, двойные и одинарные вероятности на самом деле являются еще более сложными конструкциями: совместными–условными вероятностями вида

$$w\left(f_i^{(A)}, {f'}_j^{(A)}, g_k^{(B)}, {g'}_m^{(B)} \,|\, F_A, F'_A, G_B, G'_B\right),$$

а любое суммирование устроено следующим образом:

$$w\left(f_i^{(A)}, {f'}_j^{(A)}, g_k^{(B)} \,|\, F_A, F'_A, G_B\right) = \\ = \sum_{m=\pm} w\left(f_i^{(A)}, {f'}_j^{(A)}, g_k^{(B)}, {g'}_m^{(B)} \,|\, F_A, F'_A, G_B, G'_B\right),$$

то есть при суммировании, например, по всем значениям переменной ${g'}_m^{(B)}$ одновременно исчезает зависимость от G'_B. И так далее. Такие условия является естественными следствиями локальности и называются "условиями отсутствия обмена информацией" (англ. "No-signaling Conditions") или "NS–условиями". Напомним, что в квантовой механике эти условия выполнены автоматически, что показывается при помощи теоремы Эберхарда.

Вывод BCHSH–неравенств при помощи концепции локальных скрытых параметров

Дадим еще один вывод BCHSH–неравенств. В параграфе ”Вывод BCHSH-неравенства из условия неотрицательности совместных вероятностей” мы не задумывались, какой механизм может обеспечивать существование четверных $w\left(f_i^{(A)}, {f'}_j^{(A)}, g_k^{(B)}, {g'}_m^{(B)}\right)$, тройных и так далее совместных вероятностей.

Предположим, что скрытые параметры λ полностью определяют состояние микросистемы в том смысле, как это было описано в параграфе ”Гипотеза о скрытых параметрах” и обеспечивают существование любых неотрицательных совместных и условных вероятностей. Дополнительно потребуем локальности, то есть невозможности в процессе выполнения измерения обмена любой информацией о настройках макроприборов и результатах измерения в каждой из подсистем между подсистемами A и B. Скрытые параметры λ, удовлетворяющие условию локальности, называются локальными скрытыми параметрами. Они могут относиться как к каждой из подсистем микросистемы, так к измерительным макроприборам и окружению (контекстуально зависимые скрытые параметры).

Тогда можно ввести вероятность измерения конкретного значения $f_i^{(A)}$ наблюдаемой F_A при данном наборе скрытых параметров λ как условную вероятность $w\left(f_i^{(A)} \,|\, F_A,\, \lambda\right)$. В силу требования локальности

$$w\left(f_i^{(A)},\, g_k^{(B)} \,|\, F_A,\, G_B,\, \lambda\right) \;=\; w\left(f_i^{(A)} \,|\, F_A,\, \lambda\right)\, w\left(g_k^{(B)} \,|\, G_B,\, \lambda\right)$$

Если принять дополнительную гипотезу, что экспериментаторы обладают свободой воли, а потому могут выбирать настройки макроприборов вне зависимости от текущего набора скрытых параметров λ, то

$$w\left(f_i^{(A)},\, g_k^{(B)} \,|\, F_A,\, G_B\right) \;=\; \int d\lambda\, w(\lambda)\, w\left(f_i^{(A)},\, g_k^{(B)} \,|\, F_A,\, G_B,\, \lambda\right) \;=$$

$$=\; \int d\lambda\, w(\lambda)\, w\left(f_i^{(A)} \,|\, F_A,\, \lambda\right)\, w\left(g_k^{(B)} \,|\, G_B,\, \lambda\right),$$

где $w(\lambda)$ – нормированная функция распределения для скрытых параметров: $1 = \int d\lambda\, w(\lambda)$, которая не зависит от способа измерения, то есть

$$w(\lambda) = w(\lambda \,|\, F_A, G_B) = w(\lambda \,|\, F_A, G_B') = w(\lambda \,|\, F_A', G_B) = w(\lambda \,|\, F_A', G_B').$$

С учетом всего вышесказанного для $\langle\, F_A\, G_B \,\rangle$ можем записать

$$\langle\, F_A\, G_B \,\rangle \;=\; \sum_{i,\,k} f_i^{(A)}\, g_k^{(B)}\, w\left(f_i^{(A)},\, g_k^{(B)} \,|\, F_A,\, G_B\right) \;=$$

$$=\; \int d\lambda w(\lambda) \left(\sum_i f_i^{(A)}\, w\left(f_i^{(A)} \,|\, F_A,\, \lambda\right)\right) \left(\sum_k g_k^{(B)}\, w\left(g_k^{(B)} \,|\, G_B,\, \lambda\right)\right) =$$

$$=\; \int\, d\lambda\, w(\lambda)\, \langle\, F_A \,\rangle_\lambda\, \langle\, G_B \,\rangle_\lambda.$$

Таким образом $\langle\, F_A\, G_B \,\rangle \;=\; \int\, d\lambda\, w(\lambda)\, \langle\, F_A \,\rangle_\lambda\, \langle\, G_B \,\rangle_\lambda$.

Далее при доказательстве мы будем использовать следующий факт: поскольку F_A, F'_A, G_B и G'_B – дихотомные переменные, то

$$\left|\langle\, F_A \,\rangle_\lambda\right| \le 1, \quad \left|\langle\, F'_A \,\rangle_\lambda\right| \le 1, \quad \left|\langle\, G_B \,\rangle_\lambda\right| \le 1 \text{ и } \left|\langle\, G'_B \,\rangle_\lambda\right| \le 1.$$

Отсюда сразу следует, что

$$\left|1 \pm \langle\, F'_A \,\rangle_\lambda\, \langle\, G_B \,\rangle_\lambda\right| \;=\; 1 \pm \langle\, F'_A \,\rangle_\lambda\, \langle\, G_B \,\rangle_\lambda$$

и

$$\left|1 \pm \langle\, F'_A \,\rangle_\lambda\, \langle\, G'_B \,\rangle_\lambda\right| \;=\; 1 \pm \langle\, F'_A \,\rangle_\lambda\, \langle\, G'_B \,\rangle_\lambda.$$

Наконец при доказательстве нам понадобятся очевидные неравенства: $|a \pm b| \le |a| + |b|$ **и** $0 \le a \pm b \;\Rightarrow\; |b| \le a$**.**

Теперь можно приступить к доказательству BCHSH-неравенства при помощи гипотезы скрытых параметров

$$\left|\langle F_A G_B\rangle - \langle F_A G'_B\rangle\right| = \left|\int d\lambda\, w(\lambda)\, (\langle F_A\rangle_\lambda \langle G_B\rangle_\lambda - \langle F_A\rangle_\lambda \langle G'_B\rangle_\lambda)\right| =$$

$$= \left|\int d\lambda\, w(\lambda) \Big(\langle F_A\rangle_\lambda \langle G_B\rangle_\lambda \pm \langle F_A\rangle_\lambda \langle G_B\rangle_\lambda \langle F'_A\rangle_\lambda \langle G'_B\rangle_\lambda - \right.$$

$$\left. - \langle F_A\rangle_\lambda \langle G'_B\rangle_\lambda \mp \langle F_A\rangle_\lambda \langle G_B\rangle_\lambda \langle F'_A\rangle_\lambda \langle G'_B\rangle_\lambda \Big)\right| =$$

$$= \left|\int d\lambda\, w(\lambda) \langle F_A\rangle_\lambda \langle G_B\rangle_\lambda \Big(1 \pm \langle F'_A\rangle_\lambda \langle G'_B\rangle_\lambda\Big) - \right.$$

$$\left. - \int d\lambda\, w(\lambda) \langle F_A\rangle_\lambda \langle G'_B\rangle_\lambda \Big(1 \pm \langle F'_A\rangle_\lambda \langle G_B\rangle_\lambda\Big)\right| \le$$

$$\le \left|\int d\lambda\, w(\lambda) \Big(1 \pm \langle F'_A\rangle_\lambda \langle G'_B\rangle_\lambda\Big) - \int d\lambda\, w(\lambda) \Big(1 \pm \langle F'_A\rangle_\lambda \langle G_B\rangle_\lambda\Big)\right| \le$$

$$\le \left|\int d\lambda\, w(\lambda) \Big(1 \pm \langle F'_A\rangle_\lambda \langle G'_B\rangle_\lambda\Big)\right| + \left|\int d\lambda\, w(\lambda) \Big(1 \pm \langle F'_A\rangle_\lambda \langle G_B\rangle_\lambda\Big)\right| =$$

$$= \int d\lambda\, w(\lambda) \Big(1 \pm \langle F'_A\rangle_\lambda \langle G'_B\rangle_\lambda\Big) + \int d\lambda\, w(\lambda) \Big(1 \pm \langle F'_A\rangle_\lambda \langle G_B\rangle_\lambda\Big) =$$

$$= 1 \pm \langle F'_A G'_B\rangle + 1 \pm \langle F'_A G_B\rangle = 2 \pm \Big(\langle F'_A G'_B\rangle + \langle F'_A G_B\rangle\Big).$$

Отсюда сразу же следует новое сильное неравенство

$$\Big|\langle\, F_A\, G_B \,\rangle - \langle\, F_A\, G_B' \,\rangle\Big| + \Big|\langle\, F_A'\, G_B \,\rangle + \langle\, F_A'\, G_B' \,\rangle\Big| \le 2,$$

из которого получается более слабое (sic!) BCHSH-неравенство:

$$|\langle\, F_A\, G_B \,\rangle - \langle\, F_A\, G_B' \,\rangle + \langle\, F_A'\, G_B \,\rangle + \langle\, F_A'\, G_B' \,\rangle| \le 2.$$

Таким образом, если предположить, что скрытые параметры существуют, то экспериментальное нарушение полученного неравенства будет означать, что микромир не может быть описан никакой теорией, совместимой со специальной теорией относительности, но устроенной по образцу классической статфизики, когда вероятности возникают из-за усреднения по некоторым неизмеряемым в эксперименте параметрам.

Если квантовая механика предсказывает нарушение данных неравенств, то это означает, что случайность в квантовой механике не сводится к усреднению только по локальным контекстуально зависимым скрытым параметрам. Нелокальные скрытые параметры НЕ запрещаются.

Граница Цирельсона

BCHSH-неравенство получено в предположении, что наблюдаемые F_A, F'_A, G_B и G'_B одновременно являются элементами физической реальности. Естественно задаться вопросом, может ли (и если может, то при каких условиях) BCHSH-неравенство нарушаться в нерелятивистской квантовой механике?

Чтобы ответить на этот вопрос, сопоставим наблюдаемым F_A, F'_A, G_B и G'_B эрмитовы операторы $\hat{F}_A$, $\hat{F}'_A$, $\hat{G}_B$ и $\hat{G}'_B$. Пусть для наблюдаемых, относящихся к одной подсистеме (A или B), эти операторы не коммутируют, то есть

$$\left[\hat{F}_A, \hat{F}'_A\right] \neq 0 \quad \text{и} \quad \left[\hat{G}_B, \hat{G}'_B\right] \neq 0.$$

Согласно теореме Эберхарда о локальности измерений (локальности квантовой теории на уровне макроприборов), можно написать следующие дополнительные коммутационные условия на операторы $\hat{F}_A$, $\hat{F}'_A$, $\hat{G}_B$ и $\hat{G}'_B$ (NS-условие):

$$\left[\hat{F}_A, \hat{G}_B\right] = \left[\hat{F}_A, \hat{G}'_B\right] = \left[\hat{F}'_A, \hat{G}_B\right] = \left[\hat{F}'_A, \hat{G}'_B\right] = 0.$$

Тогда, согласно Копенгагенской интерпретации квантовой механики, имеет смысл говорить, например, об одновременной измеримости (*совместном существовании*) наблюдаемых F_A и G_B, но нельзя говорить об одновременной измеримости (*совместном существовании*) наблюдаемых F_A и F'_A.

Поскольку наблюдаемые F_A, F'_A, G_B и G'_B отвечают дихотомным величинам, то их операторы подчиняются дополнительному условию

$$\hat{F}_A^2 = \hat{F}_A'^{\,2} = \hat{G}_B^2 = \hat{G}_B'^{\,2} = \hat{1}.$$

Определим следующий оператор (оператор Белла):

$$\hat{S} = \hat{F}_A \hat{G}_B - \hat{F}_A \hat{G}'_B + \hat{F}'_A \hat{G}_B + \hat{F}'_A \hat{G}'_B.$$

Тогда:

$$\begin{aligned} \left(2\sqrt{2}\right)\hat{1} - \hat{S} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{F}_A^2 + \hat{F}_A'^{\,2} + \hat{G}_B^2 + \hat{G}_B'^{\,2}\right) - \hat{S} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{F}'_A - \frac{\hat{G}_B + \hat{G}'_B}{\sqrt{2}}\right)^2 + \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{F}_A - \frac{\hat{G}_B - \hat{G}'_B}{\sqrt{2}}\right)^2. \end{aligned}$$

Усредняем это равенство по состоянию $\hat{\rho}$ произвольной микросистемы. Правая часть равенства неотрицательна. Поэтому

$$0 \leq 2\sqrt{2}\,\langle\,\hat{1}\,\rangle_\rho - \langle\,S\,\rangle_\rho = 2\sqrt{2} - \langle\,S\,\rangle_\rho.$$

Таким образом

$$\langle\,S\,\rangle_\rho \leq 2\sqrt{2}.$$

Полностью аналогично можно показать, что

$$\langle\,S\,\rangle_\rho \geq -2\sqrt{2}.$$

Объединяя оба неравенство в одно при помощи модуля

$$\left|\langle\,S\,\rangle_\rho\right| \leq 2\sqrt{2}.$$

приходим к выражению для так называемой границы Цирельсона квантовых корреляций (B.S. Cirel'son, "Quantum generalizations of Bell's inequality", "Letters in Mathematical Physics", Vol.4, p.93 (1980)). Перепишем последнее неравенство в терминах средних для наблюдаемых F_A, F'_A, G_B и G'_B.

Имеем:

$$\Big| \langle F_A \, G_B \rangle_\rho - \langle F_A \, G'_B \rangle_\rho + \langle F'_A \, G_B \rangle_\rho + \langle F'_A \, G'_B \rangle_\rho \Big| \le 2\sqrt{2}.$$

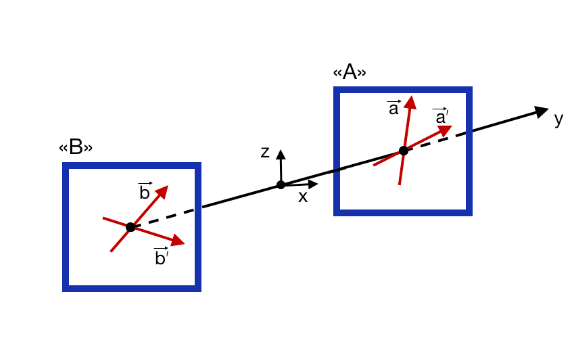
Этот результат надо сравнить с BCHSH-неравенством:

$$|\langle F_A \, G_B \rangle - \langle F_A \, G'_B \rangle + \langle F'_A \, G_B \rangle + \langle F'_A \, G'_B \rangle| \le 2.$$

Из сравнения обоих неравенств видно, что принципиально в квантовой теории BCHSH-неравенство может нарушаться. Если имеется путь экспериментального подтверждения этого нарушения, то появляется возможность объективной проверки, являются ли наблюдаемые F_A, F'_A, G_B и G'_B одновременно элементами физической реальности, или это не имеет места, как утверждает квантовая механика. Более аккуратно: нарушение BCHSH-неравенства может подтвердить правоту квантовой теории. Его выполнение квантовой теории НЕ противоречит.

Остается важный вопрос: существуют ли такие квантовые состояния $|\,\Psi\,\rangle$ или $\hat{\rho}$ и наблюдаемые F_A, F'_A, G_B, G'_B, на которых в реальных экспериментах можно достичь границы Цирельсона?

Запутанные состояния вступают в игру



Рассмотри мысленный эксперимент, в котором подсистема A отвечает фермиону, распространяющемуся вдоль оси "y", подсистема B – фермиону, который двигается против направления оси "y". Наблюдаемые F_A и F'_A соответствуют удвоенным проекциям спина фермиона A на направления $\vec{a}$ и $\vec{a}\,'$. Наблюдаемые G_B и G'_B – удвоенным проекциям спина фермиона B на направления $\vec{b}$ и $\vec{b}\,'$ соответственно. Пусть все четыре направления непараллельны друг другу. Их удобно выбрать лежащими в плоскостях, которые параллельны плоскости (x, z), как это показано на рисунке.

Ответ на вопрос из предыдущего параграфа: для достижения границы Цирельсона в квантовой механике можно использовать белловское состояние

$$
\begin{aligned}
|\,\Psi^-\,\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+\rangle^{(A)}|-\rangle^{(B)} - |-\rangle^{(A)}|+\rangle^{(B)}\Big) = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}^{(A)}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}^{(B)} - \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}^{(A)}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}^{(B)}\right).
\end{aligned}
$$

Рассмотрим направление $\vec{a}$, которое задается единичным вектором $\vec{a} = (\sin\theta_a,\, 0,\, \cos\theta_a)$. Тогда оператор $\hat{F}_A$ можно записать как

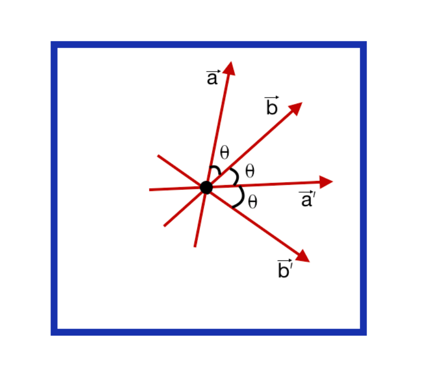
$$
\hat{F}_A = \left(\vec{a}\,\vec{\sigma}^{\,(A)}\right) = \sigma_x^{(A)}\sin\theta_a + \sigma_z^{(A)}\cos\theta_a.
$$

Абсолютно аналогичные формулы имеют место для операторов $\hat{F}'_A$, $\hat{G}_B$ и $\hat{G}'_B$. Тогда

$$
\langle\, F_A\, G_B\,\rangle_{\Psi^-} \equiv \left\langle\, \Psi^- \,\middle|\, \hat{F}_A\, \hat{G}_B \,\middle|\, \Psi^- \,\right\rangle = -\cos(\theta_a - \theta_b) = -\cos\theta_{ab}.
$$

Не представляет труда вычислить оставшиеся средние, которые входят в BCHSH-неравенство.

В итоге $|\langle S \rangle_{\psi-}| = |\cos\theta_{ab} - \cos\theta_{ab'} + \cos\theta_{a'b} + \cos\theta_{a'b'}|$.



Максимум $|\langle S \rangle_{\psi-}|$ **достигается для углов** $\theta_{ab} = \theta_{ba'} = \theta_{a'b'} = \theta = \pi/4$ **и** $\theta_{ab'} = 3\theta = 3\pi/4$. **В этом случае**

$$|\langle S \rangle_{\psi-}| = \left|3\cos\frac{\pi}{4} - \cos\frac{3\pi}{4}\right| = \left|4\cos\frac{\pi}{4}\right| = 2\sqrt{2}$$

попадает на границу Цирельсона и нарушает BCHSH-неравенство!

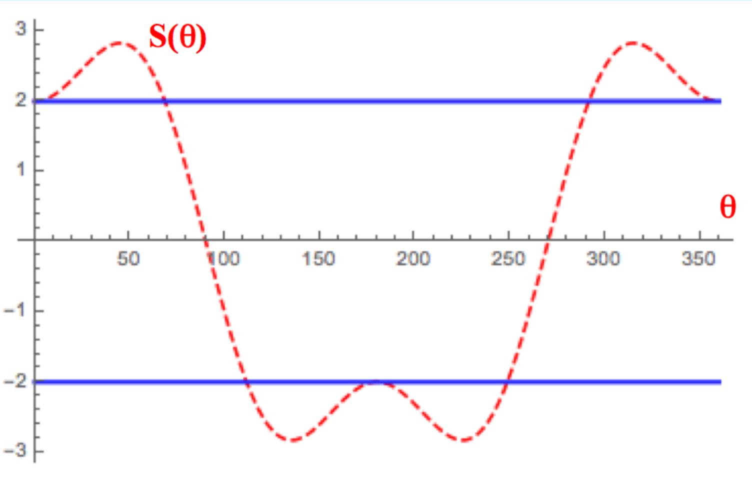


График функции

$$S(\theta) = 3\cos\theta - \cos 3\theta$$

приведен на рисунке. По оси абсцисс отложен угол θ в градусах. BCHSH-неравенство нарушается при углах θ, когда функция $S(\theta)$ больше $+2$ или меньше -2.

Запутанные состояния продолжают игру

Вопрос: что будет, если единичные вектора $\vec{a}$, $\vec{a}\,'$, $\vec{b}$ и $\vec{b}\,'$ имеют произвольные направления в пространстве, а запутанное по спину состояние микросистемы описывается некоторой матрицей плотности $\hat{\rho}$? Можно ли в этом случае попытаться превзойти границу Цирельсона?

Ответ: нет, этого сделать нельзя. Для доказательства рассмотрим оператор Белла вида:

$$\begin{aligned}\hat{S} \;&=\; \left(\vec{a}\,\vec{\sigma}^{\,(A)}\right)\left(\vec{b}\,\vec{\sigma}^{\,(B)}\right) - \left(\vec{a}\,\vec{\sigma}^{\,(A)}\right)\left(\vec{b}\,'\,\vec{\sigma}^{\,(B)}\right) + \left(\vec{a}\,'\,\vec{\sigma}^{\,(A)}\right)\left(\vec{b}\,\vec{\sigma}^{\,(B)}\right) + \\ &+\; \left(\vec{a}\,'\vec{\sigma}^{\,(A)}\right)\left(\vec{b}\,'\,\vec{\sigma}^{\,(B)}\right).\end{aligned}$$

Идейно простые, но достаточно громоздкие алгебраические вычисления дают, что

$$\hat{S}^{\,2} = 4\left[\hat{1} + \left(\vec{n}_a\,\vec{\sigma}^{\,(A)}\right)\left(\vec{n}_b\,\vec{\sigma}^{\,(B)}\right)\right],$$

где $\vec{n}_a = [\vec{a} \times \vec{a}\,']$ и $\vec{n}_b = \left[\vec{b}\,' \times \vec{b}\right]$ — единичные вектора, построенные из векторных произведений (обратите внимание, как расставлены штрихи!).

Примем во внимание, что $\langle\, \hat{1} \,\rangle_\rho = \mathbf{Tr}\, \hat{\rho} = 1$ и $\langle\, (\vec{n}\,\vec{\sigma})\, \rangle_\rho \le 1$. Тогда

$$\langle\, S^{\,2} \,\rangle_\rho \;\le\; 4\,(1\,+\,1) \;=\; 8.$$

Поскольку квадрат дисперсии любого эрмитового оператора неотрицателен, то

$$\langle\, S \,\rangle_\rho^2 \;\le\; \langle\, S^{\,2} \,\rangle_\rho,$$

откуда опять следует известная граница Цирельсона

$$\Big|\langle\, S \,\rangle_\rho\Big| \;\le\; 2\sqrt{2}.$$

В этом нет ничего удивительного, поскольку мы, фактически, повторили доказательство из параграфа "Граница Цирельсона" на частном примере системы двух спинов $s = 1/2$.

Самостоятельно докажите, что равенство достигается только при условиях, которые были рассмотрены в параграфе "Запутанные состояния вступают в игру".

Локальный реализм и BCHSH-неравенства

Большинство исследователей считает, что BCHSH-неравенства выводятся в предположениях "Локального реализма" (по-английски "Local Realism" или сокращенно "LR"). Сформулируем, что физики чаще всего понимают под "Локальным реализмом":

1) Классический реализм (сокращенно "CR"): совокупность физических характеристик микросистемы существует совместно и независимо от наблюдателя, даже если наблюдатель не может измерить эти характеристики никаким макроприбором (см. параграф "Неравенства Белла. Основная идея").

2) Локальность: если два измерения выполнены при помощи макроприборов, разнесенных друг от друга на расстояние много больше, чем $c\tau$, где τ – время срабатывания макроприбора, то результат измерения одного макроприбора никак не влияет на результат измерения другого макроприбора.

3) Свобода воли (или в английском варианте "Freedom of choice"): экспериментатор совершенно свободно может выбрать любые параметры эксперимента из набора доступных параметров.

Поскольку считается, что при выводе BCHSH-неравенств используется исключительно предположения LR, то часто можно встретить утверждение, что нарушение BCHSH-неравенств экспериментально доказывает НЕвозможность CR на микроуровне. Покажем, что это не совсем корректный вывод.

Вспомним, что согласно теореме Эберхарда даже для нерелятивистской квантовой механики выполняется условие локальности или то, что мы в лекциях называем "локальностью на макроуровне" (см. параграф "Локальность нерелятивистской квантовой механики на макроскопическом уровне и теорема Эберхарда"). Теорема Эберхарда использовался нами при вычислении границы Цирельсона (см. параграф "Граница Цирельсона"). Эта граница превосходит верхнюю границу для BCHSH-неравенства. Поэтому на макроуровне нарушение BCHSH-неравенства не должно быть связано с нелокальностью.

В англоязычной литературе чтобы подчеркнуть, что условие локальности из определения LR и классической физики (которое не имеет отношения к квантовой теории!) и теорема Эберхарда из нерелятивистской квантовой механики (которая, в свою очередь, не имеет отношение к классике!) отражают одно и тоже универсальное свойство окружающего мира. Напомним, что это свойство называют NS–условием (см. параграф ”No–signaling conditions”).

Однако при выводе BCHSH-неравенства фактически использовалось другое условие локальности: отсутствие нелокальности на МИКРОскопическом уровне между любыми наборами элементов спектров четырех рассматриваемых наблюдаемых. Именно это допущение позволило корректно определить вероятностную меру и рассматривать совместные вероятности, отвечающие условию CR, суммировать вероятности и пользоваться условиями нормировки для вероятностей. Но, как уже обсуждалось раннее, условие локальности на микроуровне в НКМ нарушается по построению самой теории!

Действительно, во-первых, белловское состояние $|\Psi^-\rangle$ дает абсолютную (анти)корреляцию по проекциям спинов фермионов A и B на любое направление. Поэтому данные проекции и соответствующие им элементы спектров рассматриваемых наблюдаемых независимыми потенциально считать нельзя.

Во-вторых, вероятности некоторых совместных распределений, вычисленные в НКМ по состоянию $|\Psi^-\rangle$ оказываются отрицательными при углах, которые обеспечивают максимальное нарушение BCHSH-неравенства. Например

$$w(f_+^{(A)}, f'^{(A)}_-, g'^{(B)}_-) = \left\langle \Psi^- \middle| \hat{P}_{\vec{a}}^{(+)} \hat{P}_{\vec{a}'}^{(-)} \hat{P}_{\vec{b}'}^{(-)} \middle| \Psi^- \right\rangle = \frac{1}{8}\left(1-\sqrt{2}\right) \leq 0,$$

где $\hat{P}_{\vec{n}}^{(\pm)}$ – проекторы на состояния с проекцией спина $\pm 1/2$ на направление $\vec{n}$. Этот результат и аналогичные ему косвенно задают нелокальные ограничения для наборов значений спектров наблюдаемых F_A, F'_A, G_B и G'_B.

То есть, при наличии запутанности нелокальность НКМ на микроуровне необходимо рассматривать как главную причину нарушения BCHSH-неравенств, поскольку эти неравенства были выведены в предположении условия локальности, неявно распространенном на микроуровень.

Нарушение BCHSH-неравенств за счет неклокальности на микроуровне может конкурировать с нарушением BCHSH-неравенств за счет невозможности совместного существования различных физических характеристик микросистемы (условие CR).

Так о чем же тогда говорит нам нарушение BCHSH-неравенств в НКМ? О том, что можно выбирать из трех альтернатив:

а) хотя наблюдаемые F_A, F'_A, G_B и G'_B совместно существуют и выполняется CR, но на микроуровне присутствуют нело– кальные взаимодействия между этими наблюдаемыми, которые нарушают BCHSH-неравенства;

б) наблюдаемые F_A, F'_A, G_B и G'_B совместно НЕ существуют, то есть НЕ выполняется CR; в дополнение к этому на микроуровне имеют место нелокальные взаимодействия между наблюдаемыми; то есть оба условия LR ведут к нарушению BCHSH-неравенства;

в) наблюдаемые F_A, F'_A, G_B и G'_B совместно НЕ существуют (нарушается условие CR), однако нелокальные взаимо – действия между наблюдаемыми ОТСУТСТВУЮТ. Тогда только первое условие LR нарушает BCHSH-нер – во.

Чтобы делать уверенные суждения только о возможности выполнения/нарушения условия CR, следует исключить нелокальность на микроуровне. Возможно от нелокальности можно избавится перейдя к квантовой теории поля (КТП), которая локальна на микроуровне по построению (например, из-за принципа микропричинности Н.Н.Боголюбова).

Вычисление вероятности $w\left(f_+^{(A)},\, f'^{(A)}_-,\, g'^{(B)}_-\right)$

В предыдущем параграфе было упомянуто, что совместная вероятность $w(f_+^{(A)}, f'^{(A)}_-, g'^{(B)}_-) < 0$. Ввиду важности этого утверждения, дадим необходимые указания к его получению.

Если вектор $\vec{a}$ совпадает с осью z, то при максимальном нарушении BCHSH-неравенств в эксперименте из параграфа "Запутанные состояния вступают в игру" углы $\theta_a/2 = 0$, $\theta_b/2 = \pi/8$, $\theta_{a'}/2 = \pi/4$ и $\theta_{b'}/2 = 3\pi/8$. Кроме того $\varphi_a = \varphi_b = \varphi_{a'} = \varphi_{b'} = 0$. При помощи формул из параграфа "Явный вид матриц плотности спина $s = 1/2$ для его проекций $\pm 1/2$ на произвольную ось" можем записать

$$\hat{P}^{(+)}_{\vec{a}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{P}^{(-)}_{\vec{a}'} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

и

$$\hat{P}^{(-)}_{\vec{b}'} = \frac{1}{2\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \sqrt{2}+1 & -1 \\ -1 & \sqrt{2}-1 \end{pmatrix}.$$

Тогда операция перемножения матриц и вектора состояния $|\,\Psi^-\,\rangle$ после идейно простых, но несколько громоздких выкладок, дает, что

$$\left\langle\, \Psi^- \,\middle|\, \hat{P}^{(+)}_{\vec{a}} \hat{P}^{(-)}_{\vec{a}'} \hat{P}^{(-)}_{\vec{b}'} \,\middle|\, \Psi^- \,\right\rangle = \frac{1}{8}\left(1 - \sqrt{2}\right).$$

Элементы физической реальности, классический реализм и локальность

Вопрос: как соотносятся между собой понятие элементов физической реальности и концепция классического реализма (CR)?

Ответ: они дополняют друг друга. CR предполагает, что характеристики микросистемы существуют независимо от наблюдателя, но не дает рецепта, как экспериментально проверить это утверждение в микромире. В то время как эйнштейновское определение элементов физической реальности дает один из возможных способов, как это можно проверить на микроуровне, чтобы не вступить в противоречие с соотношением неопределенностей Гейзенберга. Для этого приходится привлекать специфическое свойство микрообъектов – запутанность.

Взаимоотношение запутанности и локальности следующее: запутанность противоречит локальности на микроуровне и согласуется с локальностью на макроуровне и условием NS.

Дискуссия: может быть НКМ все-таки локальна?

Процитируем отрывок из работы C.A. Fuchs, D. Mermin, R. Schack, "An Introduction to QBism with an Application to the Locality of Quantum Mechanics", Am. J. Phys. 82, pp.749-754 (2014):

«В квантовой теории нелокальность отсутствует. Существуют лишь некоторые нелокальные интерпретаций квантовой механики. Наиболее известной из них является Бомовская механика (D. Bohm, "A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of Hidden Variables, I and II", Phys. Rev. 85, p.166 (1952)), нелокальность которой вдохновила Джона Белла показать, что нелокальность должна быть включена в любую интерпретацию, которая "завершает" квантовую механику в духе работы Эйнштейна, Подольского и Розена.

Но имеется множество локальных интерпретаций. Многие авторы отмечали, что квантовая нелокальность не может возникать во многомировой интерпретации (D. Deutsch, P. Hayden, "Information Flow in Entangled Quantum Systems", Proc. R. Soc. Lond. A 456, 1759 (2000); F. J. Tipler, "Does Quantum Nonlocality

Exist? Bell's Theorem and the Many-Worlds Interpretation", arXiv: quant-ph/0003146 (2000)). Роберт Гриффитс утверждает, что квантовая механика является локальной в рамках подхода совместных историй (R. Griffiths, "Quantum locality", Found. Phys. 41, p.705 (2011))».

Комментарий. Из приведенного выше отрывка не вполне ясно, о каком из уровней локальности идет речь. Если о локальности на макроуровне, то утверждение Фукса и соавторов полностью соответствует теореме Эберхарда (см. параграф "Локальность нерелятивистской квантовой механики на макроскопическом уровне и теорема Эберхарда") и не привносит ничего нового в наше понимание структуры НКМ. Если же указанные авторы считают, что НКМ локальна именно на микроуровне, то подобное утверждение требует дополнительного осмысления, поскольку явно противоречит аргументам параграфа "Нелокальность нерелятивистской квантовой механики на микроскопическом уровне".

Таким образом мы имеем открытую проблему, которая нуждается в более детальном уточнении.

Локальность для BCHSH-неравенств и локальность в КТП — это одно и тоже, или это разные понятия?

Выше мы предположили, что нелокальность на микроуровне можно исключить при помощи перехода к КТП. Однако существует иная точка зрения, которая существенно опирается на концепцию скрытых параметров и утверждает, что локальность BCHSH-неравенств отличается от локальности КТП. Процитируем тут достаточно длинный отрывок из книги Francois David, "The Formalisms of Quantum Mechanics. An Introduction", "Springer", pp. 133-134 (2015), который пояснит сказанное:

"Концепция Локального реализма, которая несовместима с квантовой механикой и, как известно, была исключена экспериментально, на самом деле отличается от концепции локальности, используемой в квантовой теории поля. Как уже обсуждалось выше локальный реализм соответствует свойству "локальной контекстуальности" для моделей со скрытыми переменными. Эта идея пропагандировалась Альбертом Эйнштейном и продвигалась Эйнштейном, Подольским и Розеном

в их статье 1935 года. Это означает, что для двух причинно независимых систем могут быть назначены различные и индивидуальные (но локально зависимые) скрытые переменные (”элементы реальности”), и что классических корреляций между этими локальными скрытыми переменными достаточно, чтобы объяснить квантовые корреляции между двумя запутанными системами.

Локальность в квантовой теории поля подразумевает нечто иное и соответствует концепции локальных событий (локализованных в пространстве и времени) и причинно-следственных связей между этими событиями, зависящих от геометрии пространства-времени. В частности, независимость двух точек, которые разделены пространственно подобным интервалом. Такие концепции локальности и причинности были сформулированы А. Эйнштейном в 1905 году в рамках специальной теории относительности, а затем распространены на общую теорию относительности. Требования локальности и причинности необходимы в квантовой теории, чтобы сформулировать последовательную квантовую теорию поля. Эти требования являются ограничениями на наблюдаемые (на операторы) квантовой теории, а не ограничениями на квантовые состояния (которые гипотетически могли бы задаваться в терминах скрытых переменных). Они подразумевают, что никакая информация не может распространяться быстрее скорости света (эффекты причинно-следственной связи). По этой причине ЭПР-подобные эксперименты и нарушение любых неравенств Белла не следует рассматривать как проявление какого-то ”ужасного дальнодействия”, которое работает в составных запутанных системах.

$$\text{Локальность в КТП} \neq \text{Концепция локального реализма}.''$$

Комментарий от НВН. В КТП, и этим она отличается от НКМ, нет отдельно состояний и операторов. Любые состояния задаются при помощи действия операторов рождения и уничтожения на вакуум. А для этих операторв нет разницы между понятиями ”локального реализма” и "локальности СТО и ОТО". Например, аналог белловского состояния $|\,\Psi^-\,\rangle$ получается при действии на вакуум локального псевдоскалярного тока фермионов и двух локальных операторов рождения:

$$\big(\bar{\psi}(x)\gamma_5\psi(x)\big)_N \; a^\dagger_{p_2,s_2}\, b^\dagger_{p_1,s_1}\, |\,0\,\rangle.$$

Что такое ЭПР-парадокс?

В настоящее время так называемый парадокс Эйнштейна–Подольского–Розена или ЭПР–парадокс представляет интерес исключительно для историков науки. Но его часто и далеко не всегда корректно любят упоминать в различных ”высокоинтеллектуальных дискуссиях”, которые во множестве процветают на просторах интернета. Поэтому студенты–физики должны знать аргументацию ЭПР, понимать ее логику и недостатки.

Сущность ЭПР–парадокса заключается в том, что концепция локального реализма (”LR” – см. ”Локальный реализм и BCHSH–неравенства”) противоречит свойствам запутанных состояний в квантовой механике.

В ранее упоминавшейся работе A.Einstein, B.Podolsky, and N.Rosen ”Can quantum mechanical description of physical reality be considered complete?”, Phys. Rev.47, p.777 (1935) Эйнштейн, Подольский и Розен сильно опередив свое время впервые обратили внимание на свойства запутанных состояний в квантовой механике и на возможность проведения с их помощью косвенных измерений. Указанные свойства оказались столь необычными даже по меркам квантовой механики, не говоря уже о классической физике, что авторами статьи эти свойства интерпретировались в качестве доказательства несовершенства или ”неполноты” квантовой теории, а многими другими физиками рассматривались как парадокс, опровергающий квантовую механику.

Эйнштейн с соавторами начинает с анализа требований, которым должна удовлетворять "настоящая" физическая теория.

Прежде всего "настоящая" теория должна давать только такие предсказания, которые возможно экспериментально проверить (подтвердить или опровергнуть). По–видимому, данное условие универсально для любых научных теорий. Оно тесно перекликается с принципом "верификации" неопозитивистов (1920–е гг.) и принципом "фальсификации", предложенным К. Поппером в книге "Логика и рост научного знания" (1-е изд. 1934 г.).

Далее ЭПР вводят условие полноты для "настоящей" физической теории: каждая характеристика физической системы (иначе, элемент физической реальности, см. параграф "Понятие об элементах физической реальности"), которая может быть измерена прямо или косвенно, *должна иметь отражение в физической теории*. В определении полноты Эйнштейн с соавторами неявно подразумевают сугубо классический взгляд на характеристики физической системы, которые в реальном мире почему–то должны существовать совместно. Впоследствии условие полноты трансформировалось в понятие "CR" (см. параграф "Локальный реализм и BCHSH–неравенства").

После этого Эйнштейн и соавторы рассматривают две микросистемы "A" и "B", которые при $t < t_0$ взаимодействовали друг с другом и образовали *запутанное состояние*. При $t \geq t_0$ **взаимодействие** между микросистемами **прекратилось**, и квантовые системы разошлись на очень большое расстояние. Последующие интерпретаторы ЭПР–парадокса, такие как **Д. Бом**, образно говорили, что система "A" улетела в Париж, а система "B" – в Пекин. Тогда в координатном представлении (запутанное) состояние микросистемы может быть записано в виде

$$|\,\psi_{12}\,\rangle \;=\; \int\, dx_1\, dx_2\, \delta(x_1 - x_2 - d)\;|\,x_1\,\rangle^{(A)}\;|\,x_2\,\rangle^{(B)},$$

где d – некоторая константа размерности длины. В импульсном представлении тот же самый вектор состояния может быть записан в виде (см. параграф **"Функция $|\,\psi_{12}\,\rangle$ в импульсном представлении"**):

$$|\,\psi_{12}\,\rangle \;=\; \int\, dp_1\, dp_2\, \delta(p_1 + p_2)\, e^{-\,\frac{i}{\hbar}\, p_1\, d}\,|\,p_1\,\rangle^{(A)}\;|\,p_2\,\rangle^{(B)}.$$

Дальше ЭПР предлагают следующее рассуждение. Проведем измерение координаты микросистемы "A". Пусть измерение дало значение x_1'. Отсюда следует, что координата подсистемы "B" равна $x_2' = x_1' - d$. Поскольку при $t \geq t_0$ системы "A" и "B" **не взаимодействуют**, то *"в результате каких бы то ни было операций над первой системой, во второй системе уже не может получиться никаких реальных изменений"*. Поэтому согласно определению элемента физической реальности (см. параграф **"Понятие об элементах физической реальности"**) координата x_2' должна быть признана таким элементом. Но вместо координаты микросистемы "A" мы можем измерить импульс этой микросистемы. Тогда импульс микросистемы "B", о котором, по мнению ЭПР, без возмущения системы "B" известно,что он равен $p_2' = -p_1'$, тоже должен быть признан элементом физической реальности. Но состояние $|\,\psi_{12}\,\rangle$ **относится к одной** и той же **реальности**. Поэтому импульс и координата подсистемы "B" совместно должны быть элементами физической реальности. И, следовательно, "хорошая" физическая теория должна уметь их совместно описывать.

Однако в квантовой механике $[\hat{p}_2,\, \hat{x}_2] \neq 0$, поэтому координата x_2' и импульс p_2' *не могут* существовать одновременно, то есть *совместно быть элементами физической реальности*. Из этого Эйнштейн с соавторами делают вывод, что квантовая механика не удовлетворяет критерию полноты, то есть не является "хорошей" физической теорией. И надо искать новую "более правильную" теорию, которая заменит квантовую механику.

Чтобы понять, какой результат на самом деле получили Эйнштейн, Подольский и Розен заметим, что приняв тезис о невлиянии микросистем "A" и "B" друг на друга при $t \geq t_0$, авторы статьи неявно вводят *требование локальности*. А утверждая, что экспериментатор волен выбирать, измерять ли ему координату или импульс микросистемы "A", используют *понятие свободы воли*. Выше мы обсуждали, что ЭПР также придерживаются "CR". Поэтому можно определенно полагать, что Эйнштейн с соавторами в своей работе придерживается концепции "LR" и, фактически, утверждает, что "хорошими" являются только те физические теории, которые удовлетворяют условиям "LR". А квантовая механика из-за свойств запутанных состояний этим условиям не удовлетворяет.

Понятно, что в утверждении ЭПР не содержится никакого парадокса. Более того, это просто иной взгляд на причину нарушений неравенств Белла (которые будут сформулированы через 29 лет после статьи Эйнштейна с соавторами, а экспериментальная проверка нарушений неравенств Белла, свободная почти от всех "лазеек", будет выполнена только в 2015 году).

Функция $|\,\psi_{12}\,\rangle$ в импульсном представлении

Покажем, как получить $|\,\psi_{12}\,\rangle$ в импульсном представлении. Для этого вспомним, что собственные функции оператора $\hat{x}$ в импульсном представлении имеют вид

$$\langle\, p\,|\; x\,\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{-\,\frac{i}{\hbar}\,p\,x},$$

а проекторы на состояния с определенным импульсом образуют ортогональное разложение единицы. Тогда

$$|\,\psi_{12}\,\rangle = \int dx_1 dx_2\, \delta(x_1 - x_2 - d)\ |\,x_1\,\rangle^{(A)}\ |\,x_2\,\rangle^{(B)} =$$

$$= \int dp_1 dp_2 dx_1 dx_2\, \delta(x_1 - x_2 - d)\ \langle\, p_1\,|\ x_1\,\rangle^{(A)} \langle\, p_2\,|\ x_2\,\rangle^{(B)} |\,p_1\,\rangle^{(A)} |\,p_2\,\rangle^{(B)} =$$

$$= \int dp_1 dp_2\, \frac{dx_1 dx_2}{2\pi\hbar}\, \delta(x_1 - x_2 - d)\, e^{-\,\frac{i}{\hbar}\,p_1 x_1}\, e^{-\,\frac{i}{\hbar}\,p_2 x_2}\, |\,p_1\,\rangle^{(A)} |\,p_2\,\rangle^{(B)} =$$

$$= \int dp_1 dp_2\, \frac{dx_2}{2\pi\hbar}\, e^{-\,\frac{i}{\hbar}\,(p_1+p_2)\,x_2}\, e^{-\,\frac{i}{\hbar}\,p_1 d}\ |\,p_1\,\rangle^{(A)} |\,p_2\,\rangle^{(B)} =$$

$$= \int dp_1 dp_2\, \delta(p_1 + p_2)\, e^{-\,\frac{i}{\hbar}\,p_1\,d}\, |\,p_1\,\rangle^{(A)}\ |\,p_2\,\rangle^{(B)}.$$

На последнем шаге мы воспользовались интегральным представлением δ–функции в виде $\displaystyle\int \frac{dk}{2\pi}\, e^{-ik(x-\tilde{x})} = \delta(x - \tilde{x})$.

BCHSH-неравенство и сепарабельные состояния

Заметим, что запутанность квантовых состояний играет ключевую роль при нарушении BCHSH-неравенств. Ниже мы докажем, что сепарабельные состояния самого общего вида

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

никогда НЕ нарушают BCHSH-неравенство, в том числе, если

$$\left[\hat{F}_A, \, \hat{F}'_A\right] \neq 0 \quad \text{и} \quad \left[\hat{G}_B, \, \hat{G}'_B\right] \neq 0.$$

Замет, что это, тем не менее, не позволяет исключить из рассмотрения пункт "в)" предыдущего слайда, поскольку запутанность относится к состоянию квантовой системы, а НЕ к способу взаимодействия между наблюдаемыми.

Начнем доказательство. Для двойных корреляторов имеем

$$\langle \, F_A \, G_B \, \rangle_\rho = \mathbf{Tr}\left(\hat{\rho} \, \hat{F}_A \, \hat{G}_B\right) = \sum_{\ell} W_\ell \, f_\ell^{(A)} \, g_\ell^{(B)},$$

где $f_\ell^{(A)} = \mathbf{Tr}_A\left(\hat{\rho}_\ell^{(A)} \, \hat{F}_A\right)$ **и** $g_\ell^{(B)} = \mathbf{Tr}_B\left(\hat{\rho}_\ell^{(B)} \, \hat{G}_B\right)$**.**

Очевидно, что если операторы $\hat{F}_A$ и $\hat{G}_B$ являются операторами дихотомных наблюдаемых, то $|f_\ell| \le 1$ и $|g_\ell| \le 1$. Воспользуемся этим фактом и известным неравенством $|f+g| \le |f| + |g|$. Тогда

$$
\begin{aligned}
\left|\langle S \rangle_\rho\right| \quad &= \left|\langle F_A\, G_B \rangle_\rho - \langle F_A\, G'_B \rangle_\rho + \langle F'_A\, G_B \rangle_\rho + \langle F'_A\, G'_B \rangle_\rho\right| = \\
= \quad &\left|\sum_\ell W_\ell \left\{ f_\ell^{(A)} g_\ell^{(B)} - f_\ell^{(A)} {g'}_\ell^{(B)} + {f'}_\ell^{(A)} g_\ell^{(B)} + {f'}_\ell^{(A)} {g'}_\ell^{(B)} \right\}\right| \le \\
\le \quad &\sum_\ell W_\ell \left\{ \left| f_\ell^{(A)} g_\ell^{(B)} - f_\ell^{(A)} {g'}_\ell^{(B)} \right| + \left| {f'}_\ell^{(A)} g_\ell^{(B)} + {f'}_\ell^{(A)} {g'}_\ell^{(B)} \right| \right\} \le \\
\le \quad &\sum_\ell W_\ell \left\{ \left| f_\ell^{(A)} \right| \left| g_\ell^{(B)} - {g'}_\ell^{(B)} \right| + \left| {f'}_\ell^{(A)} \right| \left| g_\ell^{(B)} + {g'}_\ell^{(B)} \right| \right\} \le \\
\le \quad &\sum_\ell W_\ell \left\{ \left| g_\ell^{(B)} - {g'}_\ell^{(B)} \right| + \left| g_\ell^{(B)} + {g'}_\ell^{(B)} \right| \right\} \le 2 \sum_\ell W_\ell = 2.
\end{aligned}
$$

Все доказано. Кстати, попутно мы получили еще один критерий сепарабельности, ведь любое запутанное состояние должно нарушать BCHSH-неравенство. Это так называемый критерий сепарабельности по Беллу.

Нарушение BCHSH-неравенства при помощи ЛЮБОГО запутанного состояния

Теорема: почти любое запутанное состояние вида

$$|\Psi\rangle = C_1\,|+\rangle^{(A)}|-\rangle^{(B)} + C_2\,|-\rangle^{(A)}|+\rangle^{(B)}$$

с нормировкой $|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1$ нарушает BCHSH-неравенство. Максимальное нарушение достигается на состояниях Белла.

Для доказательства теоремы найдем $\langle F_A\, G_B\rangle_\Psi$ в условиях, которые были сформулированы в параграфе "Запутанные состояния вступают в игру". Идейно простые, но несколько громоздкие вычисления дают:

$$\langle F_A\, G_B\rangle_\Psi = -\cos\theta_a\cos\theta_b + 2\,\mathbf{Re}\left(C_1^*C_2\right)\sin\theta_a\,\sin\theta_b.$$

Остальные средние вычисляются аналогично.

Пусть теперь направление $\vec{a}$ совпадает с осью "z", а направление $\vec{a}\,'$ перпендикулярно оси "z". Это ведет к тому, что $\theta_a = 0$ и $\theta_{a'} = \pm\,\pi/2$.

Для унификации дальнейшего доказательства воспользуемся произволом в выборе знака угла $\theta_{a'}$. Именно, всякий раз, когда $\mathbf{Re}\,(C_1^* C_2) = -|\mathbf{Re}\,(C_1^* C_2)|$ будем полагать $\theta_{a'} = +\pi/2$, в то время, когда $\mathbf{Re}\,(C_1^* C_2) = +|\mathbf{Re}\,(C_1^* C_2)|$ будем брать $\theta_{a'} = -\pi/2$. Тогда: $\langle\, F_A\, G_B\,\rangle_\Psi = -\cos\theta_b$; $\langle\, F_A\, G'_B\,\rangle_\Psi = -\cos\theta_{b'}$; $\langle\, F'_A\, G_B\,\rangle_\Psi = -2\,|\mathbf{Re}\,(C_1^* C_2)|\,\sin\theta_b$ и $\langle\, F'_A\, G'_B\,\rangle_\Psi = -2\,|\mathbf{Re}\,(C_1^* C_2)|\,\sin\theta_{b'}$. Используя полученные выше результаты, находим:

$$|\langle\, F_A\, G_B\,\rangle_\Psi - \langle\, F_A\, G'_B\,\rangle_\Psi + \langle\, F'_A\, G_B\,\rangle_\Psi + \langle\, F'_A\, G'_B\,\rangle_\Psi| =$$

$$= \left|\cos\theta_b - \cos\theta_{b'} + 2\,|\mathbf{Re}\,(C_1^* C_2)|\,\Big(\sin\theta_b + \sin\theta_{b'}\Big)\right|.$$

Для нарушения BCHSH-неравенства выберем

$$\cos\theta_b = -\cos\theta_{b'} = \frac{1}{\sqrt{1 + 4\,|\mathbf{Re}\,(C_1^* C_2)|^2}} \geq 0$$

и

$$\sin\theta_b = \sin\theta_{b'} = \sqrt{1 - \cos^2\theta_b} = \frac{2\,|\mathbf{Re}\,(C_1^* C_2)|}{\sqrt{1 + 4\,|\mathbf{Re}\,(C_1^* C_2)|^2}} \geq 0.$$

Тогда

$$|\langle F_A G_B \rangle_\Psi - \langle F_A G'_B \rangle_\Psi + \langle F'_A G_B \rangle_\Psi + \langle F'_A G'_B \rangle_\Psi| =$$

$$= 2\sqrt{1 + 4\,|\mathbf{Re}\,(C_1^* C_2)|^2} \geq 2$$

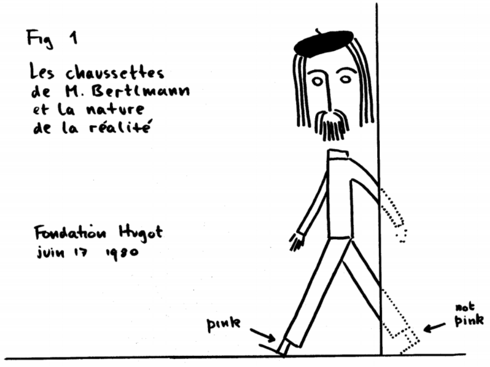
при любых ненулевых действительных значениях коэффициентов C_1 и C_2 и вполне очевидных условиях на комплексные коэффициенты. Максимальное значение $2\sqrt{2}$ достигается на состояниях Белла $|\,\Psi^\pm\,\rangle$. Теорема доказана.

Впервые данная теорема была доказана в работе N. Gisin, "Bell's inequality holds for all non-product states", Physycs Letters A154, pp.201-202 (1991). Однако эта статья в ключевых местах содержит две опечатки, которые чрезвычайно осложняют воспроизведение финального результата. Более общий и свободный от опечаток результат можно найти в работе S.Popescu, D.Rohrlich, "Generic quantum nonlocality", Physycs Letters A166, pp.293-297 (1992).

Носки профессора Бертлмана и BCHSH-неравенство

В своем докладе "Bertlmann's socks and the nature of reality" ("Носки Бертлмана и природа реальности"), прочитанном в Колледж де Франс 17 июня 1980 года и опубликованном в книге J.S. Bell, "Speakable and Unspeakable in Quantum Mechanics", "Cambridge University Press", Cambridge (1987), Джон Белл приводит красивый пример, который еще раз подчеркивает важность одновременной неизмеримости наблюдаемых характеристик микросистемы для нарушения BCHSH-неравенства.

Приведем тут вольный перевод основной идеи статьи: *"Дилетант, который не утруждал себя изучением квантовой механики, будет совершенно не впечатлен корреляционными свойствами запутанных состояний. Он сразу же укажет на множество примеров аналогичных корреляций, которые можно найти в повседневной жизни. Широко известен случай с носками профессора Бертлмана. Профессор Бертлман всегда носит носки разных цветов. Совершенно невозможно угадать какого цвета будет носок в данный день на данной ноге профессора.*



Но если Вы увидели (см. рисунок), что один носок Бертлмана розового цвета, то можете быть абсолютно уверены, что на другой ноге будет носок нерозового цвета, даже если Вы не видите эту ногу. Таким образом, наблюдение цвета первого носка и знание привычек профессора Бертлмана немедленно дает нам информацию о втором носке. Если не удивляться странному поведению профессора Бертлманна, то в носочной антикорреляции нет никакой тайны. И из этой привычки никак нельзя получить нарушение ”носочного BCHSH-неравенства”.

Носки профессора
Рейнхолда Бертлмана

и сам профессор
в 2010 году

Очевиден и ответ, почему ”носочное BCHSH-неравенство” не может быть нарушено. Сколько бы не было разноцветных носков у профессора Бертлмана, их всегда можно сложить в одну общую кучу. А потом эту кучу разделить на любое количество меньших куч. Таким образом все совместные вероятности существования носков разного цвета неотрицательны. А это, как мы видели выше, не может привести к нарушению BCHSH-неравенства.

Информационное неравенство Белла

При выводе BCHSH-неравенства основную роль играли совместные вероятности. Вспомним, что через вероятности определяются и энтропии. Поэтому возникает естественная идея, написать неравенство для энтропии Шеннона, которое бы нарушалось для квантовых коррелированных систем.

Сопоставим наблюдаемой F_A ансамбль $X_A = \left\{ f_i^{(A)}, w\left(f_i^{(A)}\right) \right\}$, где $f_i^{(A)}$ – спектр наблюдаемой F_A. Заметим, что при этом мы НЕ накладываем условие дихотомности на F_A! Аналогично наблюдаемым F'_A, G_B и G'_B сопоставим ансамбли $X_{A'} = \left\{ f'^{(A)}_j, w\left(f'^{(A)}_j\right) \right\}$, $Y_B = \left\{ g_k^{(B)}, w\left(g_k^{(B)}\right) \right\}$ и $Y_{B'} = \left\{ g'^{(B)}_m, w\left(g'^{(B)}_m\right) \right\}$ соответственно.

В параграфе "Доказательство субаддитивности" было написано неравенство

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

которое, очевидно, можно расширить до следующей цепочки:

$$H(X) \leq H(X, Y) \leq H(X, Y, V) \leq H(X, Y, V, W).$$

А из доказанного в параграфе "Классическая взаимная информация" неравенства для условной вероятности

$$H(X|Y) \le H(X)$$

без труда получается серия неравенств

$$H(X|Y,V,W) \le H(X|Y,V) \le H(X|Y) \le H(X).$$

Теперь можно доказать информационное неравенство Белла. Имеем:

$$\begin{aligned}
H(X_A|Y_{B'}) + H(Y_{B'}) &= H(X_A, Y_{B'}) \le H(X_A, X_{A'}, Y_B, Y_{B'}) = \\
= H(X_A|X_{A'}, Y_B, Y_{B'}) &+ H(X_{A'}, Y_B, Y_{B'}) = \\
= H(X_A|X_{A'}, Y_B, Y_{B'}) &+ H(Y_B|X_{A'}, Y_{B'}) + H(X_{A'}, Y_{B'}) = \\
= H(X_A|X_{A'}, Y_B, Y_{B'}) &+ H(Y_B|X_{A'}, Y_{B'}) + H(X_{A'}|Y_{B'}) + H(Y_{B'}) \le \\
\le H(X_A|Y_B) &+ H(Y_B|X_{A'}) + H(X_{A'}|Y_{B'}) + H(Y_{B'}).
\end{aligned}$$

Таким образом получаем неравенство на условные энтропии

$$0 \le H(X_A|Y_B) - H(X_A|Y_{B'}) + H(Y_B|X_{A'}) + H(X_{A'}|Y_{B'}),$$

которое в англоязычной литературе обычно называют "Information-Theoretic Bell Inequalitie". Впервые это неравенство было выведено в работе:
Samuel L. Braunstein and Carlton M. Caves, "Information-Theoretic Bell Inequalities", Phys. Rev. Lett. 61, p.662 (1988); Erratum Phys. Rev. Lett. 63, p.1896 (1989).

Информационное неравенство Белла более общее, чем BCHSH-неравенство, поскольку его нарушение, в принципе, можно было бы проверять не только для дихотомных наблюдаемых. Но в основе доказательства данного неравенства лежит тоже самое предположение, что и в основе доказательства BCHSH-неравенства. Именно, чтобы совместная энтропия $H(X_A, X_{A'}, Y_B, Y_{B'})$ имела смысл, необходимо выполнение условия:

$$1 \geq w\left(f_i^{(A)}, {f'}_j^{(A)}, g_k^{(B)}, {g'}_m^{(B)}\right) \geq 0.$$

Не существует прямых экспериментальных методов измерения энтропии квантовых систем. Поэтому информационное неравенство на эксперименте может быть проверено только косвенно, если измерить все возможные двойные *совместные вероятности*, а затем подставить их значения в формулы для энтропии.

Нарушение информационного неравенства Белла в квантовой механике

Вопрос: нарушается ли информационное неравенство Белла в квантовой механике?

Ответ: да, нарушается. Мы не будем искать максимальную степень нарушения, а просто приведем пример, когда нарушение имеет место.

Рассмотрим мысленный эксперимент из параграфа "Запутанные состояния вступают в игру", то есть отождествим наблюдаемые F_A, F'_A, G_B и G'_B с удвоенными проекциями спина $s = 1/2$ на четыре непараллельные оси. В этом случае очевидно, что

$$H\,(X_A\,|\,Y_B) \;=\; H\,(Y_B\,|X_{A'}) \;=\; H\,(X_{A'}|\,Y_{B'}) \;=\; f(\theta)$$

и

$$H\,(X_A\,|\,Y_{B'}) \;=\; f(3\,\theta),$$

а информационное неравенство Белла сводится к неравенству

$$0 \;\le\; 3\,f(\theta) \;-\; f(3\,\theta).$$

Осталось найти функцию $f(\theta)$, что эквивалентно вычислению условной энтропии $H\,(X_A\,|\,Y_B)$ как функции угла θ.

Простые вычисления вероятностей дают (не забудьте, что в белловском состоянии $\left|\,\Psi^-\right\rangle$ спины антикоррелированы!):

$$w\left(s_{\vec a}^{(A)}=+\frac{1}{2},\, s_{\vec b}^{(B)}=+\frac{1}{2}\right)\;=\;w\left(s_{\vec a}^{(A)}=-\frac{1}{2},\, s_{\vec b}^{(B)}=-\frac{1}{2}\right)\;=\;\frac{1}{2}\,\sin^2\frac{\theta}{2}$$

и

$$w\left(s_{\vec a}^{(A)}=+\frac{1}{2},\, s_{\vec b}^{(B)}=-\frac{1}{2}\right)\;=\;w\left(s_{\vec a}^{(A)}=-\frac{1}{2},\, s_{\vec b}^{(B)}=+\frac{1}{2}\right)\;=\;\frac{1}{2}\,\cos^2\frac{\theta}{2}.$$

Этот результат позволяет вычислить совместную энтропию

$$\begin{aligned} H\,(X_A,\,Y_B) \;&=\; -\sum_{s_{\vec a}^{(A)},\,s_{\vec b}^{(B)}} w\left(s_{\vec a}^{(A)},\,s_{\vec b}^{(B)}\right)\,\ln\,w\left(s_{\vec a}^{(A)},\,s_{\vec b}^{(B)}\right)\;= \\ &=\; -\,\sin^2\frac{\theta}{2}\,\ln\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\right)-\,\cos^2\frac{\theta}{2}\,\ln\left(\cos^2\frac{\theta}{2}\right)\,+\,\ln 2. \end{aligned}$$

Чтобы вычислить условную энтропию $H\,(X_A\,|\,Y_B)$, необходимо найти еще энтропию ансамбля Y_B.

Поскольку наблюдаемая G_B совпадает с $s^{(B)}_{\vec{b}}$, то $g_1^{(B)} = +1/2$ и $g_2^{(B)} = -1/2$. В силу симметрии задачи

$$w\left(g_1^{(B)} = +1/2\right) = w\left(g_2^{(B)} = -1/2\right) = \frac{1}{2}.$$

Таким образом, ансамбль Y_B задан. Тогда имеем

$$H\left(Y_B\right) = -\frac{1}{2}\ln\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\ln\frac{1}{2} = \ln 2.$$

Отсюда получаем, что

$$\begin{aligned} f(\theta) &= H\left(X_A \,|\, Y_B\right) = H\left(X_A,\, Y_B\right) - H\left(Y_B\right) = \\ &= -\sin^2\frac{\theta}{2}\ln\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\right) - \cos^2\frac{\theta}{2}\ln\left(\cos^2\frac{\theta}{2}\right). \end{aligned}$$

Выберем $\theta = \pi/8$. Прямые вычисления дают: $f(\pi/8) \approx 0,161$ и $f(3\pi/8) \approx 0,618$. Тогда информационное неравенство Белла

$$0 \leq 0,483 - 0,618 = -0,135$$

нарушается в квантовой механике. И это нарушение можно наблюдать при помощи косвенных экспериментов.

Какие еще бывают неравенства Белла?

Неравенства Белла для частиц с произвольным спином s, то есть неравенства НЕ только для дихотомных величин:

1) A. Peres, "Finite violation of a Bell inequality for arbitrarily large spin", Phys. Rev. A46, pp.4413 — 4414 (1992);

2) L. De Caro, A. Garuccio, "Bell's inequality, trichotomic observables, and supplementary assumptions", Phys.Rev.A54, pp.174 - 181 (1996);

3) X. A. Wu, H. S. Zong, H. R. Pang, and F. Wang, "A new bell inequality for a two spin-1 particle system", Phys. Lett. A281, 203206 (2001);

Неравенства Белла ... БЕЗ неравенства:

1) N. D. Mermin, "Quantum mysteries revisited", American Journal of Physics 58, pp.731—733 (1990).

2) L. Hardy, "Quantum mechanics, local realistic theories, and Lorentz-invariant realistic theories", Phys.Rev.Lett. 68, 2981 (1992);

3) L. Hardy, "Nonlocality for two particles without inequalities for almost all entangled states", Phys. Rev. Lett. 71, 1665 (1993);

4) S. Kunkri, S. K. Choudhary, "Nonlocality without inequality for spin-s systems", Phys. Rev. A72, 022348 (2005).

Эксперименты по проверке неравенств Белла

Самый первый — эксперимент в Беркли с коррелированными фотонами. BCHSH-неравенства нарушались на уровне $5\,\sigma$:
S. J. Freedman and J. F. Clauser, ”Experimental Test of Local Hidden-Variable Theories”, Phys. Rev. Lett. 28, p.938-941 (1972).

Эксперименты А.Аспе с коллегами в Орсэ: идея отложенного выбора Дж.Уиллера и случайная ориентация осей поляризаторов обеспечили пространственно-подобный интервал между выбором конфигурации обоих детекторов, то есть закрыта “лазейка локальности” измерения:
A. Aspect, J. Dalibard, G. Roger, ”Experimental Test of Bell’s Inequalities Using Time-Varying Analyzers”, Phys. Rev. Lett. 49, pp.1804-1807 (1982).

Рекорды пространственного сохранения корреляций:
пары фотонов — 143 км: A. Zeilinger et al., ”Quantum teleportation over 143 kilometres using active feed-forward”, Nature 489, pp.269–273 (2012);
пары электронов — 1.3 км: B. Hensen et al., ”Loophole-free Bell inequality violation using electron spins separated by 1.3 kilometres”, Nature 526, pp.682–686 (2015).

Дальнейшее развитие экспериментов

I) В экспериментах с коррелированными парами фотонов учитываются только те результаты, которые получаются при регистрации двух фотонов. Но обычно эффективность такого детектирования не превосходит 10%. Может быть какое-либо ”дополнительное” взаимодействие управляет отбором зарегистрированных событий и делает экспериментальную выборку нерепрезентативной (“лазейка измерения”)?

В работе P.H. Eberhard, Phys. Rev. A 47, R747 (1993) показано, что для опровержения этого утверждения необходимо иметь детекторы фотонов с эффективностью $\eta = 2/3 \approx 66,7$% и выше.

В настоящее время в эксперименте с фотонами получена максимальная эффективность детектирования $\eta_{max\ exp} \approx 78,6$% (см. A. Zeilinger et al., ”Bell violation using entangled photons without the fair-sampling assumption”, Nature 497, pp.227–230 (2013) и B. G. Christensen et al., “Detection-Loophole-Free Test of Quantum Nonlocality, and Applications”, Phys. Rev. Lett. 111, 130406 (2013)). Необходимый результат достигнут! Неравенства Белла по-прежнему нарушаются.

II) До недавнего времени в каждом из экспериментов по проверке неравенств Белла можно было закрыть только одну из двух лазеек, либо локальности, либо измерения. Однако в 2015 году были успешно проведены сразу три эксперимента (два с фотонными парами: M. Giustina et al., "Loophole-Free Test of Bell's Theorem with Entangled Photons", Phys. Rev. Lett. 115, 250401 (2015), L. K. Shalm et al., "Strong Loophole-Free Test of Local Realism", Phys. Rev. Lett. 115, 250402 (2015) и один на коррелированных спинах $1/2$: B. Hensen et al., "Loophole-free Bell inequality violation using electron spins separated by 1.3 kilometres", Nature 526, pp.682–686 (2015)), которые успешно смогли закрыть сразу обе лазейки.

III) Во всех экспериментах по проверке BCHSH-неравенств необходимо сделать четыре серии измерений, для получения величины каждого из корреляторов. Однако нет абсолютно никаких гарантий, что все четыре серии измерений проводятся при одних и тех же условиях ("лазейка контекстуальности"). Даже если используются одни и те же экспериментальные приборы, то все равно невозможно точно воспроизвести все внутренние физические параметры макроприбора и, вообще говоря, гарантировать идентичность квантовых ансамблей коррелированных частиц. Эта проблема не решена до сих пор.

Часть 9

ПРИНЦИП МАКРО-СКОПИЧЕСКОГО РЕАЛИЗМА И НЕРАВЕНСТВА ЛЕГГЕТТА-ГАРГА

Макроскопический реализм

Вопрос: Чем макроскопические системы отличаются от микроскопических?

В параграфе "Декогеренция и парадокс кота Шредингера" был дан один из возможных ответов: макроскопические системы, в отличии от микроскопических, могут находится только в смеси макроскопически различимых состояний, но не в их суперпозиции. Смесь состояний является следствием непрерывного измерения макросистемы ее термодинамическим окружением.

Однако, в повседневной жизни люди, как правило, пользуются *"более простыми и наглядными"* критериями макроскопичности, которые получили название "макроскопического реализма" или "классичности" (в англоязычной литературе для обозначения этой концепции применяется термины "Macroscopic realism" или "Macrorealism"; сокращенно "MR").

Концепцию макроскопического реализма не следует путать с концепцией локального реализма (см. параграф "Локальный реализм"). Это взаимосвязанные, но абсолютно не тождественные концепции!

В своей пионерской работе A. J. Leggett, A. Garg, ”Quantum Mechanics versus Macroscopic Realism: Is the Flux There when Nobody Looks?”, Phys.Rev.Lett. 54, p.857 (1985) Леггетт и Гарг конкретизировали наши интуитивные представления об окружающем классическом мире в виде двух (или трех, смотря, как считать :)) простых принципов, которые будут сформулированы ниже. Используя эти принципы авторы предложили неравенства, которым удовлетворяет любая физическая система, отвечающая привычной и каждодневно используемой ”макроскопической интуиции”. Эти неравенства получили название неравенств Леггетта-Гарга (Leggett-Garg inequalities или, сокращенно, LGIs).

Неравенства Леггетта-Гарга дают возможность в самом общем виде экспериментально проверить ошибочность любых концепций, основанных на классических представлениях, при переходе к микроскопическим масштабам. Для корректной реализации такой экспериментальной проверки требуются макроприборы, с помощью которых можно выполнить так называемые неразрушающие (или невозмущающие систему) измерения.

"MR" основывается на следующих принципах.

1) Первый принцип носит название принципа макроскопического реализма per se (MRps – Macroscopic realism per se – макроскопический реализм в чистом виде). Поскольку в англоязычной литературе применяется термин на смеси английского и латыни, то в лекциях мы тоже смешаем русский с латынью. MRps гласит, что макроскопическая система, обладающая двумя (или более) макроскопически различимыми состояниями, в каждый момент времени будет находиться в одном и только в одном из всех своих возможных состояний.

Например, в каждый момент времени кот Шредингера будет либо живым, либо мертвым, но не живомертвым или мертвоживым. Кроме того, принцип MRps предполагает, что измерение, выполненное над макроскопической системой, однозначно показывает, в каком состоянии эта система находится в момент измерения. Тут нельзя не заметить фундаментального различия между принципом MRps и проекционными постулатами Борна и Дирака – фон Неймана.

Кроме того, на знаменитый вопрос А.Эйнштейна "*Существует ли Луна, когда на нее никто не смотрит?*", принцип MRps однозначно дает положительный ответ.

2) Второй принцип утверждает, что можно определить состояние макроскопической системы и, при этом, сколь угодно мало повлиять на дальнейшую динамику этой макросистемы. Другими словами, на макроуровне всегда возможно измерить физические характеристики системы без ее разрушения или сильного изменения. Это так называемый **принцип неразрушающего измерения** (**NIM – Non-invasive measurability**).

3) К принципам **MRps** и **NIM** часто считают необходимым добавлять **принцип индукции** (**Induction**), который отражает "обывательское" понимание свободы воли экспериментатора: результат текущего измерения характеристик физической системы не может повлиять на то, какие измерения будут проводиться или не проводиться над системой в будущем. Только экспериментатор решает, как он будет действовать дальше.

Принципы MSps и NIM нарушаются в квантовой механике. Первый, поскольку в квантовом мире выполняется принцип суперпозиции или его аналоги. Второй, так как согласно проекционным постулатам Борна или Дирака-фон Неймана при измерении состояния микросистемы макроскопическим прибором происходит редукция состояния микросистемы. **Принцип индукции выполняется** как **в классической** физике, так **и в квантовой**, поскольку он является следствием принципа причинности.

Принцип **NIM** для концепции **MR** играет ту же роль, что и принцип **локальности** для **LR**. А принцип **индукции** в **MR** весьма похож на принцип **свободы воли** в **LR**.

Вывод простейшего неравенства Леггетта-Гарга

Рассмотрим некоторую физическую систему (специально не конкретизируя, микроскопическая это система или макроскопическая), которая удовлетворяет всем принципам "Макроскопического реализма". И пусть эта система обладает дихотомной наблюдаемой Q. Мы нарочно обозначили эту наблюдаемую другой буквой, чтобы не путать ее с наблюдаемыми F_A, ... G'_B, используемыми при получения BCHSH-неравенств.

Согласно MRps-принципу в каждый момент времени t_i, вне зависимости от того, измеряют эту величину или нет, наблюдаемая Q находится в одном из двух определенных значений: либо $Q(t_i) = +1$, либо $Q(t_i) = -1$. Для краткости будем писать, что $Q(t_i) = q_i$, где индекс "i" означает момент времени измерения. Пусть теперь измерение наблюдаемой Q проводилось в два разных момента времени t_i и t_j. Тогда для такого измерения можно ввести совместные двойные и тройные вероятности $w_{ij}(q_i, q_j)$ и $w_{ij}(q_i, q_j, q_k)$, $k \neq \{i, j\}$. Момент t_k – это какой-то момент, в который измерение не проводилось. Но физическая система в момент времени t_k находилась в состоянии q_k. Все вероятности, относящиеся ко временам измерения t_i и t_j, записываются при помощи нижних индексов как $w_{ij}(\ldots)$.

Подчеркнем, что совместные вероятности $w_{ij}(\ldots)$ ПРИНЦИПИАЛЬНО отличаются от совместных вероятностей $w\left(f_i^{(A)}, g_k^{(B)}\right)$ или $w\left(f_i^{(A)}, f'^{(A)}_j, g_k^{(B)}\right)$, которые использовались для доказательства BCHSH-неравенства, поскольку вероятности $w_{ij}(\ldots)$ относятся к корреляциям ОДНОЙ наблюдаемой в РАЗНЫЕ моменты времени. В то время как совместные вероятности для BCHSH-неравенств описывают корреляции РАЗНЫХ наблюдаемых в ОДИН момент времени.

Из MRps и NIM принципов сразу следует, что $w_{ij}(\ldots) = w_{ji}(\ldots)$. Поскольку измерения предполагаются неразрушающими, то совершенно неважно, в каком порядке следуют аргументы в тройных и более высоких совместных вероятностях $w_{ij}\left(q_i,\, q_j,\, q_k\right)$. Пусть промежутки времени удовлетворяют условию $t_3 > t_2 > t_1$. Тогда договоримся, что в вероятностях соответствующие им значения наблюдаемых всегда будут идти по возрастающей справа налево. То есть будем записывать вероятности в виде:

$$w_{ij}\left(q_3,\, q_2,\, q_1\right), \quad \text{где} \quad \{i,\, j\} = \{1, 2, 3\}.$$

Введем корреляционную функцию

$$C_{21} = \langle\, Q(t_2),\; Q(t_1)\,\rangle = \sum_{q_2=\pm 1,\; q_1=\pm 1} q_2\, q_1\, w_{21}\,(q_2,\; q_1).$$

Поскольку двойные вероятности можно следующим образом записать через тройные

$$w_{21}\,(q_2,\; q_1) = \sum_{q_3=\pm 1} w_{21}\,(q_3,\; q_2,\; q_1),$$

то корреляционная функция имеет вид

$$\begin{aligned} C_{21} &= \sum_{q_3=\pm 1,\; q_2=\pm 1,\; q_1=\pm 1} q_2\, q_1\, w_{21}\,(q_3,\; q_2,\; q_1) = \\ &= w_{21}\,(+,+,+) + w_{21}\,(-,+,+) + w_{21}\,(+,-,-) + w_{21}\,(-,-,-) - \\ &- w_{21}\,(+,+,-) - w_{21}\,(-,+,-) - w_{21}\,(+,-,+) - w_{21}\,(-,-,+). \end{aligned}$$

Аналогично можно ввести корреляционные функции

$$\begin{aligned} C_{32} &= \langle\, Q(t_3),\; Q(t_2)\,\rangle = \sum_{q_3=\pm 1,\; q_2=\pm 1,\; q_1=\pm 1} q_3\, q_2\, w_{32}\,(q_3,\; q_2,\; q_1) = \\ &= w_{32}\,(+,+,+) + w_{32}\,(+,+,-) + w_{32}\,(-,-,+) + w_{32}\,(-,-,-) - \\ &- w_{32}\,(-,+,+) - w_{32}\,(-,+,-) - w_{32}\,(+,-,+) - w_{32}\,(+,-,-). \end{aligned}$$

и

$$
\begin{aligned}
C_{31} &= \langle\, Q(t_3),\, Q(t_1)\,\rangle = \sum_{q_3=\pm 1,\, q_2=\pm 1,\, q_1=\pm 1} q_3\, q_1\, w_{31}\,(q_3,\, q_2,\, q_1) = \\
&= w_{31}\,(+,+,+) + w_{31}\,(+,-,+) + w_{31}\,(-,+,-) + w_{31}\,(-,-,-) - \\
&- w_{31}\,(+,+,-) - w_{31}\,(+,-,-) - w_{31}\,(-,+,+) - w_{31}\,(-,-,+).
\end{aligned}
$$

Поскольку согласно принципу NIM измерение не влияет на динамику системы, то вероятности $w_{ij}\,(q_3,\, q_2,\, q_1)$ не должны зависеть от того, в какие два из трех возможных моментов времени произведено измерение над рассматриваемой физической системой. Из этого сразу следует, что

$$
w_{21}\,(+,+,+) \;=\; w_{31}\,(+,+,+) \;=\; w_{32}\,(+,+,+) \;= w\,(+,+,+);
$$

$$
w_{21}\,(+,+,-) \;=\; w_{31}\,(+,+,-) \;=\; w_{32}\,(+,+,-) \;= w\,(+,+,-);
$$

и так далее для всех возможных значений вероятностей. При этом, вообще говоря, совершенно очевидно, что

$$
w\,(+,+,-) \;\neq\; w\,(+,-,+) \;\neq\; \ldots .
$$

Учитывая, что тройные вероятности удовлетворяют стандартному условию нормировки

$$\sum_{q_3=\pm 1,\, q_2=\pm 1,\, q_1=\pm 1} w\left(q_3,\, q_2,\, q_1\right) = 1,$$

найдем величину

$$K^{(3)} = C_{21} + C_{32} - C_{31}.$$

Индекс «(3)» означает, что величина $K^{(n)}$ содержит три корреляционные функции C_{ij}. Простые вычисления дают

$$K^{(3)} = 1 - 4\Big(w\left(+,-,+\right) + w\left(-,+,-\right)\Big).$$

Найдем интервал возможных значений $K^{(3)}$. В силу условия нормировки тройных вероятностей $w\left(+,-,+\right) + w\left(-,+,-\right) \leq 1$. Поэтому $K^{(3)} \geq -3$. С другой стороны, все совместные вероятности положительны, то есть $w\left(+,-,+\right) + w\left(-,+,-\right) \geq 0$. Это приводит к неравенству $K^{(3)} \leq 1$. Таким образом,

$$-3 \leq K^{(3)} \leq 1.$$

Получение семейства неравенств Леггетта-Гарга

Результат для $K^{(3)}$ можно обобщить, если ввести величину

$$K^{(n)} = C_{21} + C_{32} + C_{43} + \ldots + C_{n\,n-1} - C_{n1}.$$

Тогда для нечетных $n \geq 3$ имеем

$$-n \leq K^{(n)} \leq n - 2,$$

а для четных $n \geq 4$ можно записать, что

$$-(n-2) \leq K^{(n)} \leq n - 2 \quad \text{или} \quad \left|K^{(n)}\right| \leq n - 2.$$

В частности, при $n = 4$ легко написать неравенство Леггетта-Гарга, которое по виду очень похоже на BCHSH-неравенство

$$|C_{21} + C_{32} + C_{43} - C_{41}| \leq 2,$$

но имеет совершенно иной физический смысл. Именно последнее неравенство было получено в работе A. J. Leggett, A. Garg, Phys.Rev.Lett. 54, p.857 (1985).

Нарушение неравенств Леггетта-Гарга в квантовой теории

Рассмотрим дихотомную наблюдаемую

$$\hat{Q}_i \equiv \hat{Q}(t_i) = \left(\vec{a}(t_i)\,\vec{\sigma}\right) = a_{i\,\alpha}\sigma_\alpha,$$

где σ_α – матрицы Паули, $\vec{a}_i$ – единичные вектора. Следующим образом определим корреляционную функцию

$$C_{ij} = \frac{1}{2}\left\langle \hat{Q}_i\hat{Q}_j + \hat{Q}_j\hat{Q}_i \right\rangle_\psi.$$

Воспользовавшись основным соотношением алгебры матриц Паули

$$\sigma_\alpha\sigma_\beta = \delta_{\alpha\beta}\hat{1} + i\,\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\,\sigma_\gamma,$$

имеем для корреляционной функции

$$C_{ij} = (\vec{a}_i\,\vec{a}_j)\,\left\langle\,\hat{1}\,\right\rangle_\psi = (\vec{a}_i\,\vec{a}_j) = \cos\theta_{i,\,j}.$$

Тогда величина $K^{(n)}$ задается формулой

$$K^{(n)} = \sum_{m=1}^{n-1}\cos\left(\theta_{m,\,m+1}\right) - \cos\left(\sum_{m=1}^{n-1}\theta_{m,\,m+1}\right).$$

Для нахождения максимального значения величины $K^{(n)}$ выберем $\theta_{m,\, m+1} = \pi/n$. Тогда

$$K^{(n)}_{\mathbf{max}} \;=\; n \cos\left(\frac{\pi}{n}\right).$$

В самых простейших случаях

$$K^{(3)}_{\mathbf{max}} \;=\; \frac{3}{2}; \qquad K^{(4)}_{\mathbf{max}} \;=\; 2\sqrt{2};$$

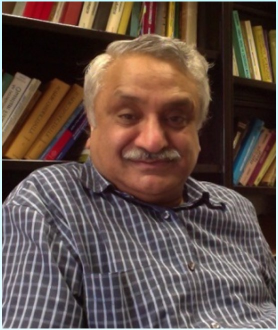
$$K^{(5)}_{\mathbf{max}} \;=\; \frac{5}{4}\,\left(1+\sqrt{5}\right); \qquad K^{(6)}_{\mathbf{max}} \;=\; 3\sqrt{3}.$$

Таким образом, например, в квантовой механике

$$|C_{21} \;+\; C_{32} \;+\; C_{43} \;-\; C_{41}| \;\le\; 2\sqrt{2},$$

Неравенства Леггетта-Гарга впервые были экспериментально проверены в работе C. Robens, W. Alt, D. Meschede, C. Emary, A. Alberti, "Ideal Negative Measurements in Quantum Walks Disprove Theories Based on Classical Trajectories", Phys.Rev.X5, 011003 (2015).

Люди, чьи фамилии носит неравенство Леггетта–Гарга



Профессор
Northwestern University
Анупам Гарг

Лауреат Нобелевской премии
по физике 2003 года
сэр Энтони Джеймс Леггетт

Неравенство Леггетта-Гарга считается одним из самых значительных достижений такого направления науки как "Science Foundations" в последней четверти XX века (см., например, G. A. D. Briggs, J. N. Butterfield, A. Zeilinger, "The Oxford Questions on the foundations of quantum physics", Proceedings of The Royal Society A 469, 20130299, 2013).

Сильный и слабый NIM

Часто можно встретить утверждение, что NIM уже содержится как необходимое условие в MRps. Поэтому NIM не следует выделять в отдельный принцип. Однако это не так. В качестве контрпримера можно привести теорию волны–пилота де Бройля–Бома. В этой теории MRps выполнен, поскольку в каждый момент времени состояние микрочастицы определено однозначно. Но измерение является разрушающим. Поэтому необходимо более четко сформулировать принцип NIM. В последнее время в литературе обсуждаются две формулировки NIM.

Слабый NIM (англ. ”Weak NIM” или wNIM). Если макроскопическая система находится в конкретном состоянии, это макросостояние можно определить без какого-либо воздействия на само состояние или на последующую динамику системы.

Понятно, что wNIM $\Leftrightarrow$ NIM.

Сильный NIM (англ. ”Strong NIM” или sNIM). Всегда можно измерить состояние макросистемы без какого-либо влияния на само это состояние или на последующую динамику системы.

Докажем, что sNIM уже содержит в себе MRps. Если предполагать справедливость sNIM, то гипотетическое неразрушающее измерение может быть выполнено в любой момент времени t. Тем самым в любой момент времени t возможно однозначно определить значение наблюдаемой $Q(t)$. Из-за неразрушающего характера измерения следует, что наблюдаемая $Q(t)$ должна иметь определенное значение еще ДО измерения. Это гарантирует, что наблюдаемая Q всегда имеет определенное значение, то есть система в каждый момент времени существует в одном и только в одном из своих состояний. Таким образом, sNIM $\Rightarrow$ MRps, ч.т.д. Заметим, что наше доказательство остается справедливым, даже если sNIM дается в менее строгой форме, которая позволяет измерениям менять последующую динамику системы, но, при этом, все еще однозначно определять значение наблюдаемой (состояния).

Если в приведенном выше рассуждении дополнительно (или неявно) подразумеваются наличие стрелы времени (англ. "Arrow of Time", сокращ. AoT) и свободы воли экспериментатора относительно выбора начальных состояний и времени проведения измерений (в том числе, проводить ли измерение вообще), то sNIM достаточно даже для обоснования MR, то есть

$$\text{sNIM (Induction, AoT)} \Leftrightarrow \Big(\text{MRps} \wedge \text{NIM}\Big) \Leftrightarrow \text{MR}.$$

No-signaling in time

В 2013 году было предложено так называемое условие "no signaling in time" (NSIT) (см. J. Kofler, C. Brukner, "Condition for macroscopic realism beyond the Leggett–Garg inequalities", Phys. Rev. A 87, 052115 (2013).). Это условие можно рассматривать как аналог NS-условия, используемого при выводе неравенств Белла (см. параграф "No-signaling conditions"). Также это условие можно рассматривать как альтернативную статистическую версию NIM. Данное условие требует, чтобы вероятность $w(q_j)$ измерения величины $Q(t)$ в момент времени t_j не зависела от того, было ли проведено измерение величины $Q(t)$ в момент времени $t_i < t_j$, то есть

$$NSIT_{(i)\,j}: \quad w_j(q_j) = w_{ij}(q_j) = \sum_{\tilde{q}_i=\pm 1} w_{ij}(\tilde{q}_i,\, q_j).$$

Отметим, что вероятности $w_j(q_j)$ и $w_{ij}(q_j)$ соответствуют различным постановкам физических экспериментов. Вероятность $w_j(q_j)$ получается из измерений, которые проводились только в момент времени t_j, в то время как вероятность $w_{ij}(q_j)$ получается из измерений, которые выполнялись как в момент времени t_j, так и в предшествующий ему момент времени t_i.

Часть 10

ПОЛЕЗНЫЕ ССЫЛКИ

- Как там звучит та песня про квантовую механику?
- Какая?
- Что-то про множественные реальности. И еще о том, что наблюдатель влияет на результат эксперимента...
- "Я оглянулся посмотреть,
не оглянулась ли она,
чтоб посмотреть,
не оглянулся ли я"?
- Точно!

Литература по матрице плотности на русском языке

1) **Блум К.**, «Теория матрицы плотности и ее приложения», М. «Мир», 1983.

2) **Балашов В.В.**, **Долинов В.К.**, «Курс квантовой механики», М. «Издательство МГУ», 1982. Нужно читать §§ 27, 28, 29, 30, 31, 45 и 50.

3) **Ландау Л.Д.**, **Лифшиц Е.М.**, «Квантовая механика. Нерелятивистская теория», М. «Наука», 1989. Нужно читать § 14.

4) **Белоусов Ю.М.**, **Манько В.И.**, «Матрица плотности. Представления и применения в статистической механике», Часть 1 и Часть 2, М. 2004.

5) **Блохинцев Д.И.**, «Квантовая механика. Лекции по избранным вопросам», М. «Атомиздат», 1981.

6) **Ландау Л.Д.**, **Лифшиц Е.М.**, «Статистическая физика. Часть 1», М. «Наука», 1995. Нужно читать §§ 5, 6, 7, 30.

7) **Фейнман Р.**, «Статистическая механика», М. «Мир», 1975. Нужно читать §§ 2.1, 2.2, 2.3, 2.4, 2.5 и 3.1.

8) **Нильсен М.**, **Чанг И.**, «Квантовые вычисления и квантовая информация», М. «Мир», 2006.

9) **«Теоретический практикум по ядерной и атомной физике»**, М. «Энергоатомиздат», 1984. Нужно читать Темы 3, 4 и 5.

10) Ермолаев А.М., Рашба Г.И., «Лекции по квантовой стати–стике и кинетике. 4. Матрица плотности», Х. «ХНУ», 2009.

11) Прескилл Дж., «Квантовая информация и квантовые вы–числения», Том 1, М. «РХД», 2008.

12) Стиб В.-Х., Харди Й., «Задачи и их решения в квантовых вычис-лениях и квантовой теории информации», М. «РХД», 2007.

13) Калачев А.А., «Квантовая информатика в задачах», К. «Казанский университет», 2012.

14) Борисенок С. В., Кондратьев А. С., «Квантовая статистичес-кая механика», М. «ФИЗМАТЛИТ», 2011. Глава 2.

15) Балашов В.В., «Квантовая теория столкновений», М. «Из–дательство МГУ», 1985. Нужно читать §§17.1, 17.2.

16) Ситенко А.Г., «Теория рассеяния», К. «Вища школа», 1975. Нужно читать §§14.1, 14.2, 14.3, 14.5, 14.6.

17) Балдин А.М., Гольданский В.И., Максименко В.М., Розен–таль И.Л., «Кинематика ядерных реакций», М. «Атомиз–дат», 1968. Нужно читать §§49 – 52.

18) Узиков Ю. Н., «Избранные главы теории столкновений», М. «КДУ», 2017. Нужно читать Главу 5.

19) Биленький С.М., Лапидус Л.И., Рындин Р.М., «Поляризо–ванная протонная мишень в опытах с частицами высоких энергий», УФН, т.LXXXIV, стр. 243, 1964.

Интерпретации квантовой механики

1) Статья «Копенгагенская интерпретация квантовой теории» в сборнике Гейзенберг В., «У истоков квантовой теории», М. «Тайдекс Ко», 2004.

2) Статья «Статистическая интерпретация квантовой механики» в сборнике Борн М., «Физика в жизни моего поколения», М. ИИЛ, 1963.

3) Гейзенберг В., «Физика и философия. Часть и целое», М. «Наука», 1989.

4) Марков М.А., «О трех интерпретациях квантовой механики», М. «Наука», 1991.

5) Уилер Дж., «Квант и Вселенная», статья в сборнике «Астрофизика, кванты и теория относительности», М. «Мир», 1982.

6) Садбери А., «Квантовая механика и физика элементарных частиц», М. « Мир», 1989. Нужно читать только §5.5 «Интерпретации квантовой теории».

7) Экстремальная многомировая интерпретация: Менский М.Б., «Квантовые измерения и декогеренция», М. «ФИЗМАТЛИТ», 2001.

8) Информационная интерпретация квантовой механики: Кадомцев Б. Б., «Динамика и информация», М. «Редакция УФН», 1999.

9) Сборник «Наука и предельная реальность. Квантовая теория, космология и сложность», составители Барроу Дж., Дэвис П., Харпер мл. Ч., М. «ИКИ», 2013. Нужно читать статьи из Части III.

10) Достаточно посредственная дискуссия в журнале «УФН».

Менский М Б, «Квантовая механика: новые эксперименты, новые приложения и новые формулировки старых вопросов», УФН 170, 631–648, 2000:

http://ufn.ru/ru/articles/2000/6/c/;

Панов А. Д., «О проблеме выбора альтернативы в квантовом измерении», УФН 171, 447–449, 2001:

http://ufn.ru/ru/articles/2001/4/j/;

Цехмистро И.З., «Импликативно-логическая природа квантовых корреляци», УФН 171, 452–458, 2001:

http://ufn.ru/ru/articles/2001/4/l/;

Липкин А.И., Нахмансон Р.С., Пилан А. М., Панов А. Д., Лесовик Г.Б., Цехмистро И. З., Менский М. Б., «Отклики читателей на статью М.Б. Менского «Квантовая механика: новые эксперименты, новые приложения и новые формулировки старых вопросов»», УФН, 171, 437–437, 2001:

http://ufn.ru/ru/articles/2001/4/f/;

Нахмансон Р.С., «Физическая интерпретация квантовой механики», УФН 171, 441–444, 2001:

http://ufn.ru/ru/articles/2001/4/h/;

Пилан А. М., «Действительность и главный вопрос о квантовой информации», УФН 171, 444–447, 2001:

http://ufn.ru/ru/articles/2001/4/i/;

Менский М. Б., «Квантовое измерение: декогеренция и сознание», УФН 171, 459–462, 2001:
http://ufn.ru/ru/articles/2001/4/m/;
Голохвастов А.И., «Квантовая механика глазами экспериментатора», УФН 172, 843–846, 2002:
http://ufn.ru/ru/articles/2002/7/i/.

11) Джеммер М., «Эволюция понятий квантовой механики», М. «Наука», 1985. Нужно читать Главу 6 и Главу 7.

12) Жизан Н., «Квантовая случайность», «Альпина нон-фикшн», 2016.

13) Аккарди Л., «Диалоги о квантовой механике», М. «РХД», 2004.

14) «Stanford Encyclopedia of Philosophy»
«Copenhagen Interpretation of Quantum Mechanics»:
http://plato.stanford.edu/entries/qm-copenhagen/;
«Many-Worlds Interpretation of Quantum Mechanics»:
http://plato.stanford.edu/entries/qm-manyworlds/;
«The Consistent Histories Approach to Quantum Mechanics»:
http://plato.stanford.edu/entries/qm-consistent-histories/;
«Modal Interpretations of Quantum Mechanics»:
http://plato.stanford.edu/entries/qm-modal/;
«Relational Quantum Mechanics»:
http://plato.stanford.edu/entries/qm-relational/.

15) Интерпретация КМ в терминах совместных историй:
Griffiths R.B., «Consistent Quantum Theory», «Cambridge U. P.», 2003.

16) Omnés R., «The Interpretation of Quantum Mechanics», «Princenton U. P.», 1994.

17) Bub J., «The Interpretation of Quantum Mechanics», «Springer», 1974.

18) Bub J., «Interpreting the Quantum World», «Cambridge U. P.», 1997.

19) Bub J., «Bananaworld. Quantum Mechanics for Primates», «Oxford U. P.», 2016.

20) Laloë F., «Do We Really Understand Quantum Mechanics?», «Oxford U. P», 2012.

21) «Энциклопедия» наиболее популярных интерпретаций КМ:
Cabello A., «Interpretations of quantum theory: A map of madness», `arXiv:1509.04711 [quant-ph]`.

22) Концепция квантовых ансамблей и «Московская интерпретация» КМ:
Блохинцев Д.И., «Принципиальные вопросы квантовой механики», М. «Наука», 1987.
Блохинцев Д.И., «Труды по методологическим проблемам физики», М. «Издательство МГУ», 1993.
Мандельштам Л.И., «Лекции по оптике, теории относительности и квантовой механике», М. «Наука», 1972.

23) Взгляды академика В.А.Фока на интерпретации квантовой механики:
Фок В.А., Эйнштейн А., Подольский Б., Розен Н., Бор Н., «Можно ли считать, что квантово-механическое описание физической реальности является полным?», УФН 16, 436–457, 1936:
http://ufn.ru/ru/articles/1936/4/b/;
Фок В.А., «Критика взглядов Бора на квантовую механику», УФН 45, 3–14, 1951:
http://ufn.ru/ru/articles/1951/9/a/;
Фок В.А., «Об интерпретации квантовой механики», УФН 62, 461–474, 1957:
http://ufn.ru/ru/articles/1957/8/f/;
Фок В.А., «Замечания к статье Бора о его дискуссиях с Эйнштейном», УФН 66, 599–602, 1958:
http://ufn.ru/ru/articles/1958/12/c/;
Фок В.А., «Квантовая физика и строение материи», «Издательство ЛГУ», 1965.

24) ак. Котельников В.А., «Модельная нерелятивистская квантовая механика. Размышления», М. «ФИЗМАТЛИТ», 2008.

Математические структуры квантовой механики

1) **Кострикин А.И., Манин Ю.И., «Линейная алгебра и геометрия», М. «Наука», 1980 или 1986 (2-е изд.).**

Несмотря на «простое» название, книга очень глубокая и современная. А в качестве приложения линейной алгебры авторы рассматривают математическую структуру нерелятивистской квантовой механики. Книга понятна для физика.

2) **Тарасов В.Е., «Квантовая механика. Лекции по основам теории», М., «Вузовская книга», 2000.**

Малоизвестная книга вменяемой сложности, в которой достаточно понятно для физиков (если при этом прочитать предыдущую книгу!) обосновывается необходимость использования C^*–алгебры, алгебры фон Неймана и супероператоров в квантовой теории. Книга очень плохо написана с педагогической точки зрения, но в ней правильно расставлены акценты. Автор – известный специалист в нелинейной квантовой теории.

3) **фон Нейман Дж., «Математические основы квантовой механики», М. «Наука», 1966.**

Классическая Книга (оба слова с большой буквы), на которую все ссылаются, но мало кто ее читал. Еще меньше, кто понял. В 1932 году была самой глубокой книгой по КМ. В настоящее время – безнадежно устарела.

4) Фаддеев Л.Д., Якубовский О.А., «Лекции по квантовой механике для студентов–математиков», Л. «ЛГУ», 1980.

Книга полезна математикам, но излишне занудна с точки зрения физиков. Устарела. Считается классической.

5) Тахтаджян Л.А., «Квантовая механика для математиков», М., «РХД», 2011.

Удачная попытка осовременить Фаддеева–Якубовского. В будущем претендует на звание классики.

6) Холево А.С., «Квантовые системы, каналы, информация», М., «МЦНМО», 2010.

Строгое математическое обоснование классической и квантовой теории информации от ведущего российского специалиста, чьи работы в этой области признаны во всем мире.

7) Хренников А.Ю., «Неколмогоровские теории вероятностей и квантовая физика», М., «ФИЗМАТЛИТ», 2003.

Спорная, но очень интересная книга. Заставляет по-новому взглянуть на квантовую механику. Неколмогоровские модели без теоремы Байеса, математическое опровержение неравенств Белла, контекстуальный реализм и т.д. Главное, что все математически строго!

Философские и методологические основания квантовой теории

1) **Гейзенберг В.**, «Физика и философия. Часть и целое», М. «Наука», 1989.

2) **Илларионов С. В.**, «Теория познания и философия науки», М. «РОССПЭН», 2007.

3) **Кант И.**, «Критика чистого разума», М. «Наука», 1998.

4) **Поппер К.**, «Логика и рост научного знания», М. «Прогресс», 1983.

5) **Алексеев И.С.**, **Овчинников Н.Ф.**, **Печенкин А.А.**, «Методология обоснования квантовой теории», М. «Наука», 1984.

6) **Алексеев И.С.**, «Деятельностная концепция познания и реальности. Избранные труды по методологии и истории физики», М. «Руссо», 1995.

7) **Прохоров Л. В.**, «Квантовая механика – проблемы и парадоксы», НИИХ СПбГУ, СПб, 2003.

Корреляции за пределами квантовой теории

Общее описание корреляций: ящики Попеску—Рорлиха
S. Popescu, D. Rohrlich, "Quantum Nonlocality as an Axiom", Found. Phys. 24, 379 (1994).

Краткий обзор того, что случилось после 1994-ого года (со всеми ключевыми ссылками):
S. Popescu, "Nonlocality beyond quantum mechanics", Nature Physics 10, pp.264–270 (2014).

Если корреляции сильнее, чем в НКМ, то, при получении одного бита информации от системы, о самой системе можно узнать более одного бита информации (протоколы ван Дама)
W. van Dam, "Implausible consequences of superstrong nonlocality", Preprint at `http://arxiv.org/abs/quant-ph/0501159` **(2005).**

Принцип информационной причинности: протоколы ван Дама не реализуются в природе. Тогда в природе НЕ возможны корреляции сильнее тех, которые можно получить в НКМ при помощи запутанных состояний.
M. Pawlowski et al., "Information causality as a physical principle", Nature 461, pp.1101–1104 (2009).

Видеолекции на русском языке по матрице плотности и смежным вопросам квантовой механики

1) Н. В. Никитин, "Матрица плотности. Вводный курс". Лекция N1 https://www.youtube.com/watch?v=DnQP6RQ-4Jo&t=3633s;

2) Н. В. Никитин, "Матрица плотности. Вводный курс". Лекция N2 https://www.youtube.com/watch?v=gJCOKlJyFFk&t=3863s;

3) Н. В. Никитин, "Матрица плотности. Вводный курс". Лекция N3 https://www.youtube.com/watch?v=ZSYgL5DNfNk&t=4248s;

4) А. Гринбаум, "Математические конструкции в квантовой логике и их современное применение". Лекция N1 https://www.youtube.com/watch?v=Yv3BGGdiufE;

5) А. Гринбаум, "Математические конструкции в квантовой логике и их современное применение". Лекция N2 https://www.youtube.com/watch?v=UbXrRMVtLd0;

6) А. Гринбаум, "Математические конструкции в квантовой логике и их современное применение". Лекция N3 https://www.youtube.com/watch?v=wjbv5yKgGF4;

7)А.С. Трушечкин, "Математика квантовой механики", https://www.youtube.com/watch?v=VSCqjOXNSp8.

Часть 11

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 $\mathbf{Tr}\,\hat{A}$ можно определить как след соответствующей матрицы, то есть

$$\mathbf{Tr}\,\hat{A} = \sum_{i=1}^{N} A_{ii}.$$

В определении следа содержится свойство линейности

$$\mathbf{Tr}\left(\lambda\hat{A} + \mu\hat{B}\right) = \lambda\,\mathbf{Tr}\hat{A} + \mu\,\mathbf{Tr}\hat{B},$$

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:

$$\mathbf{Tr}\left(\hat{P}_\psi \hat{A}\right) = \sum_{i=1}^{N} \langle\, n_i \,|\, \psi\,\rangle \left\langle \psi \middle| \hat{A} \middle| n_i \right\rangle = \sum_{i=1}^{N} \left\langle \psi \middle| \hat{A} \middle| n_i \right\rangle \langle\, n_i \,|\, \psi\,\rangle =$$

$$= \left\langle \psi \middle| \hat{A} \sum_{i=1}^{N} |\, n_i\,\rangle\langle\, n_i\,| \middle| \psi \right\rangle = \left\langle \psi \middle| \hat{A}\,\hat{1} \middle| \psi \right\rangle = \left\langle \psi \middle| \hat{A} \middle| \psi \right\rangle, \quad \text{ч .т. д.}$$

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**

$$
\begin{aligned}
\mathbf{Tr}\left(\hat{A} \otimes \hat{B}\right) &= a_{11}\, b_{11} + a_{11}\, b_{22} + a_{22}\, b_{11} + a_{22}\, b_{22} = \\
&= (a_{11} + a_{22})\,(b_{11} + b_{22}) = \left(\mathbf{Tr}\,\hat{A}\right)\left(\mathbf{Tr}\,\hat{B}\right).
\end{aligned}
$$

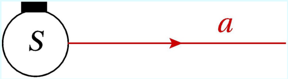
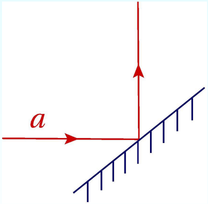
Доказательство общего случая проведите самостоятельно.

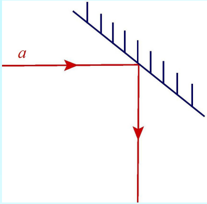
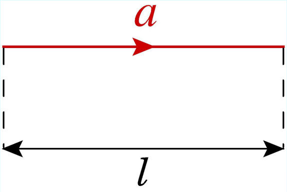
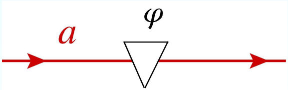
Часть 12

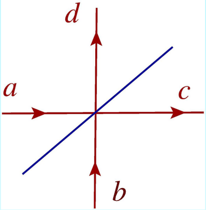
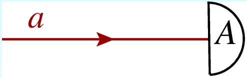
ПОЛЕЗНЫЕ ФИЗИЧЕСКИЕ ДОПОЛНЕНИЯ

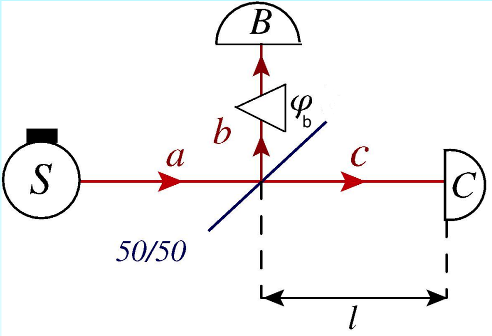
Конструктор для быстрого анализа процессов одно–фотонной интерференции

Этот конструктор в своих лекциях 2013/2014 годов предложил Люсьен Харди (Lucien Hardy). Мы воспроизводим его тут с минимальными изменениями. Еще раз заметим, что данный конструктор применим для анализа только процессов ОДНОФОТОННОЙ интерференции.

Название	Элемент	Вклад в амплитуду
Источник "S" – source		$\mid a \rangle$
Зеркало N1		$\mid a \rangle \to i \mid a \rangle$

Название	Элемент	Вклад в амплитуду
Зеркало N2		$\vert a\rangle \to i\,\vert a\rangle$
Набег фазы		$\vert a\rangle \to \vert a\rangle\, e^{i\,\frac{2\pi\ell}{\lambda}}$, где λ – длина волны фотона
Фазовый сдвиг		$\vert a\rangle \to e^{i\,\varphi}\,\vert a\rangle$

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:

$$
\begin{aligned}
&|\,a\,\rangle\,|\,B_0\,\rangle\,|\,C_0\,\rangle \to \left(\frac{i}{\sqrt{2}}\,|\,b\,\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\,c\,\rangle\right)|\,B_0\,\rangle\,|\,C_0\,\rangle \to \\
&\to \left(\frac{i\,e^{i\varphi_b}}{\sqrt{2}}\,|\,b\,\rangle + \frac{e^{2\pi i\ell/\lambda}}{\sqrt{2}}\,|\,c\,\rangle\right)|\,B_0\,\rangle\,|\,C_0\,\rangle \to \\
&\to \frac{i\,e^{i\varphi_b}}{\sqrt{2}}\,|\,B\,\rangle\,|\,C_0\,\rangle + \frac{e^{2\pi i\ell/\lambda}}{\sqrt{2}}\,|\,B_0\,\rangle\,|\,C\,\rangle.
\end{aligned}
$$

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

$$w\,(B\,C)\;=\;0,$$

вероятность, что ни один из детекторов не сработает

$$w\,(B_0\,C_0)\;=\;0$$

и, наконец, вероятность срабатывания хоть одного из детекторов

$$w\,(B\,C_0)\,+\,w\,(B_0\,C)\,+\,w\,(B\,C)=\,\frac{1}{2}\,+\,\frac{1}{2}\,+\,0\;=\;1.$$

Благодарности

Я с удовольствием благодарю всех, кто помогал мне обдумывать данный курс, вдохновлял, дискутировал со мной по поводу содержания, искал (и находил!) опечатки, помогал с оборудованием для съемок лекций весной 2018 г. Это: С.П. Баранов, Д.В. Гайдукевич, Е.М. Говоркова, А.В. Данилина, А.И. Демьянов, Л.В. Дудко, Н.В. Колотинский, Н.М. Курносов, В.А. Ларичев, М.Н. Смоляков, В.П. Сотников, К.С. Томс, О.В. Фотина, О.С. Чекерес (придумала Аленушку и Братцаиванушку), П.Р. Шарапова.

Отдельную благодарность хочется высказать фонду развития теоретической физики "Базис", который поддержал создание части данного курса грантом N 17-23-304-1(А).

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.