

Теоретичні основи квантових обчислень

Навчальний посібник

Доценко І.С. Теслик О.М. Теслик М.В.

6 грудня 2020 р.

Зміст

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Спін та спінові функції частинки зі спіном $s = \frac{1}{2}$ | 13 |
| 1.1 | Спін електрона | 13 |
| 1.2 | Абсолютно антисиметричний одиничний тензор | 14 |
| 1.3 | Спінові матриці | 16 |
| 1.4 | Матриці Паулі | 17 |
| 1.5 | Власні вектори матриць Паулі (власні функції операторів спіну) | 20 |
| 1.6 | Сходінкові оператори у спіновому просторі | 22 |
| 1.7 | Проекційний оператор | 23 |
| 1.8 | Деякі властивості матриць Паулі | 25 |
| 1.9 | Лінеаризація нелінійних комбінацій спінових операторів | 25 |
| 1.10 | Обчислення трейсу комбінацій матриць Паулі | 28 |
| 1.11 | Повний момент кількості руху частинки зі спіном $s = 1/2$ | 29 |
| 1.12 | Перетворення матричних елементів $\langle \chi_1 \hat{\sigma}_i \chi_2 \rangle$ при повороті системи координат | 33 |
| 1.13 | Вектор поляризації | 35 |
| 1.14 | Питання та задачі для самостійної роботи | 36 |
| 2 | Спінові стани системи частинок зі спіном $s = \frac{1}{2}$ | 39 |
| 2.1 | Оператор сумарного спіну та базисні вектори у спіновому просторі системи двох частинок | 39 |
| 2.2 | Оператори проектування на триплетні та синглетні стани | 41 |
| 2.3 | Базис Белла | 44 |
| 2.4 | Класифікація станів систем довільного числа частинок зі спіном $s = 1/2$ | 45 |
| 2.5 | Питання та задачі для самостійної роботи | 50 |
| 3 | Елементарні операції над кубітами | 51 |
| 3.1 | Однокубітові та багатокубітові квантові стани | 51 |
| 3.2 | Квантові вентиля. Універсальний набір квантових вентилів | 54 |
| 3.2.1 | Однокубітові квантові логічні елементи | 55 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 3.2.2 | Унітарні операції над багатокубітовими квантовими системами | 58 |
| 3.3 | Питання та задачі для самостійної роботи | 63 |
| 4 | Заплутаність квантових систем | 65 |
| 4.1 | Ознаки заплутаності та сепарабельності композитних квантових систем | 65 |
| 4.1.1 | Ознака сепарабельності чистих двокубітових станів | 66 |
| 4.1.2 | Розклад Шмідта | 69 |
| 5 | Квантові алгоритми | 81 |
| 5.1 | Квантовий паралелізм: ініціалізація регістра | 83 |
| 5.2 | Квантова інтерференція. Алгоритм Дойча-Джози | 87 |
| 5.2.1 | Алгоритм Дойча-Джози | 89 |
| 5.3 | Квантовий алгоритм вимірювання парності | 92 |
| 5.4 | Квантове (дискретне) перетворення Фур'є | 94 |
| 5.4.1 | Класичне дискретне перетворення Фур'є | 94 |
| 5.4.2 | Квантове перетворення Фур'є | 96 |
| 5.4.3 | Двійкова та десяткова система: цілі числа та дробові | 98 |
| 5.4.4 | Квантове перетворення Фур'є базисних станів обчислювального базису для системи n кубітів | 100 |
| 5.4.5 | Квантова схема перетворення Фур'є n -кубітових квантових станів | 101 |
| 5.4.6 | Задача. Довести унітарність квантового перетворення Фур'є | 105 |
| 6 | Повнота квантової механіки | 107 |
| 6.1 | Парадокс Ейнштейна-Подольського-Розена (ЕПР-парадокс) | 107 |
| 6.2 | Нерівність Белла | 115 |
| 6.3 | Приклад моделі, побудованої на основі локального реалізму | 124 |
| 6.4 | Питання та задачі для самостійної роботи | 128 |
| 7 | Операція вимірювання у квантовій механіці | 131 |
| 7.1 | Проективні вимірювання (PVM-вимірювання) | 134 |
| 7.1.1 | Постулат фон Неймана про вимірювання | 134 |
| 7.1.2 | Операція вимірювання над багатокomпонентними квантовими системами | 139 |
| 7.1.3 | Загальна схема проективного вимірювання для n -кубітових систем | 146 |
| 7.1.4 | Операції проективного вимірювання над змішаними станами | 148 |

| | | |
|-----|--|-----|
| 7.2 | POVM-вимірювання | 155 |
| 7.3 | Питання та задачі для самостійної роботи | 161 |

Вступ

У 1935 р. за авторства Альберта Ейнштейна, Бориса Подольського та Натана Розена вийшла стаття, яку, мабуть, можна прийняти за початок подій, що крок за кроком, через численні дискусії та суперечки, врешті-решт, після декількох десятиліть привели до ідеї про можливість створення квантового комп'ютера. “Чи можна квантовомеханічний опис фізичної реальності вважати повним? (Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?)” — питає Ейнштейн вже у самій назві статті. В самому тоні питання вгадується негативна відповідь на нього авторів статті. Робота була простимульована численними дискусіями Альберта Ейнштейна та Нільса Бора, в яких виявилися принципові розбіжності в їхніх поглядах щодо *тлумачення змісту* квантової механіки.

Ейнштейн з колегами (а також Ервін Шредінгер) звернули увагу фізиків на “жахливу особливість” (spooky feature) положення квантової механіки, яка полягає в можливості існування станів композитних (що складаються з двох і більшого числа підсистем) квантових систем, які неможливо представити у вигляді добутку станів окремих підсистем. Згодом цей феномен отримав назву “*заплутаність (entanglement)*”, а самі такі стани — “*заплутані стани (entangled states)*”.

“Жахливість” заплутаних станів особливо проглядається у ситуаціях, коли підсистеми вже не взаємодіють і знаходяться на великих відстанях одна від одної, а властивість заплутаності при цьому залишається. Феномен заплутаності, статистичний характер результатів вимірювання та деякі інші прояви квантової механіки приводять, на думку авторів роботи, до висновків, що суперечать здоровому глуздові, тобто приводять до парадоксу. Цей висновок згодом отримав стійку назву “Парадокс Ейнштейна-Подольського-Розена” (ЕПР-парадокс). Головний вирок, зроблений Ейнштейном у статті, полягає в тому, що квантова механіка не є повною наукою, оскільки вона враховує *не всі* визначені ним “елементи фізичної реальності” і, отже, неадекватно описує фізичну реальність.

ЕПР-робота протягом багатьох років була найбільш цитованою в наукових журналах і відіграла значну роль у стимулюванні подальших дискусій щодо тлумачення змісту квантової механіки.

Величезний авторитет Альберта Ейнштейна спонукав багатьох його прихильників шукати шляхи створення, на основі його ідей, “ нової теорії”, в якій “неповна квантова теорія” розглядалася б як деякий граничний, або частковий випадок. По суті, в таких нових теоріях, що отримали загальну назву “теорії на основі локального реалізму”, або “теорії з прихованими параметрами”, закладалася спроба зберегти класичний детермінізм і усунути поняття випадковості та невизначеності, що існують у квантовій механіці.

Ще майже три десятиліття тривали дискусії щодо правильності концепцій Альберта Ейнштейна та Нільса Бора. Проблема полягала ще в тому, що не існувало критерію, за яким можна було б надати перевагу одній із двох несумісних концепцій.

Нарешті у 1964 р. вийшла видатна робота Джона Белла, в якій довгоочікуваний критерій був сформульований у вигляді деякої нерівності, яка логічно отримала назву “нерівність Белла”. На основі свого критерію Белл зробив висновок, сформульований у вигляді теореми (теорема Белла): *“Жодна теорія, побудована на основі принципів локального реалізму (теорія з прихованими параметрами), не може відтворити всі кореляції, які виявляє квантова механіка”*.

Головна теза, що випливає з теореми Белла, полягає в тому, що квантову механіку не можна розглядати як частковий або граничний випадок *будь-якої* теорії, побудованої на основі локального реалізму, оскільки вона (квантова механіка) дає дещо таке, чого не може дати “нова теорія”.

Джон Белл переконливо довів, що:

- Всі теорії, побудовані на основі локального реалізму, задовольняють нерівність (Белла).
- У квантовій механіці існують такі стани, які порушують дану нерівність.

Ще декілька років пішло на пошуки можливості перевірки нерівності Белла у *реальному експерименті*. Нарешті у 1981-1982 рр. група Аспекта (Aspect) вперше в лабораторних умовах здійснила тест, який переконливо засвідчив порушення нерівності Белла, представленої у так званій формі Клаузера-Хорна-Шимоні-Холта (CHSH — Clause-Horn-Shimony-Holt). Для експеримента був використаний заплутаний стан пари фотонів, що отримується у феномені “вниз-конверсії (down-conversion)”. Згодом було проведено ще багато експериментів, і всі вони свідчили проти

концепції теорії з прихованими параметрами; результати цих дослідів узгоджувалися з висновками квантової механіки. Тим самим була поставлена крапка у багаторічних дискусіях Нільса Бора і Альберта Ейнштейна — перемогла концепція Бора, в якій він відстоював квантову механіку як таку, що адекватно описує фізичну реальність.

Саме в цей час (1981 р.) Річард Фейнман на “Першій конференції з фізики обчислень”, організованою фірмою ІВМ, запропонував ідею використання квантових ефектів для побудови нових алгоритмів обчислень. “Природа — квантова. Якщо ми хочемо імітувати її, нам знадобиться *квантовий комп’ютер*”, — сказав Фейнман.

Декілька років ще було витрачено на дослідження користі заплутаності для квантових обчислень. Було встановлено, що феномен заплутаності є ресурс природи, що не має відображення в класичній фізиці, і який можна створювати та знищувати, накопичувати і зберігати, розподіляти і передавати на відстань — який можна використати у принципово нових алгоритмах обчислень.

У 1989 р. Девід Дойч запропонував загальну концепцію квантового процесора, а в 1995 р. він сформулював принцип універсального логічного блоку, за допомогою якого можна виконувати будь-які квантові обчислення.

Однак, коли фізики перейшли від теоретичних концепцій до їх втілення на практиці, стало ясно, що між мріями та реальністю існує величезна прірва. Ще у 2005 р., навіть коли в лабораторіях вже почали працювати над створенням фізичних елементів для квантових комп’ютерів, все ще існували сумніви щодо можливості взагалі побудувати квантовий комп’ютер. Крім того, ще не було достатньо зрозумілим, які саме задачі можна вирішувати за допомогою такого комп’ютера. Згодом процес створення квантових комп’ютерів охопив усі науково розвинені країни. Стало зрозуміло, що створення надійного повномасштабного квантового комп’ютера приведе до справжньої революції в таких сферах науки та практики:

- прогнозування погоди
- обробка великих масивів інформації
- квантова хімія
- фармацевтика
- засоби зв’язку
- матеріалознавство

- глобальні фінансові операції
- керування господарством і транспортним трафіком мегаполісів
- квантова криптографія
- створення штучного інтелекту, здатного до самовдосконалення
- тощо.

Зважаючи на величезні перспективи, на створення квантових комп'ютерів держави витрачають значні фінансові ресурси.

Даний навчальний посібник слід сприймати як вступний курс з актуальної сучасної тематики, що стосується квантової інформатики та квантових обчислень і адресований, насамперед, студентам-фізикам.

Автори посібника намагалися об'єднати різні розділи в логічно пов'язаний єдиний курс, і тому пропонують опрацьовувати його послідовно від початку до кінця. Однак ми сподіваємося, що читачам, які добре засвоїли загальний університетський курс з квантової механіки, будуть зрозумілими й вибірково обрані розділи.

Фундаментальним базовим елементом у квантових обчисленнях є квантовий біт (кубіт). Наочною реалізацією кубіта, на нашу думку, є спінові стани частинок зі спіном $s = \frac{1}{2}$. Тому підготовка читача до розуміння подальших розділів починається саме з розділу, присвяченого властивостям спінових станів системи частинок і операціям над ними.

У наступних розділах вже використовується також термінологія і позначення, прийняті в квантовій інформатиці.

У розділі “Елементарні операції над кубітами” вводиться важливе для квантових обчислень поняття “універсальний набір квантових логічних елементів” і розглядаються властивості однокубітових квантових вентилів та двокубітового заплутуючого елемента *CNOT* (контрольована операція *NOT*).

Наступний розділ присвячено фундаментальному феномену композичних квантових станів — заплутаності (entanglement), який не має аналогу в класичній фізиці та який є необхідним ресурсом і джерелом потужності квантових обчислень.

У розділі “Квантові алгоритми” читач на конкретних прикладах ознайомиться зі специфікою задач і алгоритмів їх розв'язування, що принципово відрізняються від алгоритмів звичайних (не квантових) обчислень. Наведені приклади квантових схем сприятимуть наочному уявленню читачем послідовності виконання квантових операцій.

Розділ “Повнота квантової механіки” призначений, з одного боку, для ознайомлення з надзвичайно цікавою історичною дискусією Нільса Бора з Альбертом Ейнштейном, що врешті-решт навела на думку про можливість створення квантового комп’ютера, а з іншого — сприяє, на наш погляд, поглибленню розуміння квантової механіки.

Розділу “Операція вимірювання у квантовій механіці” у посібнику відводиться досить значне місце, оскільки в загальних курсах квантової механіки поняттю “вимірювання” зазвичай надається недостатньо уваги. Між тим це поняття відіграє фундаментальну роль для розуміння змісту хвильової функції та квантовій механіці в цілому.

На даному етапі навчальний посібник представлено в електронному варіанті, що дозволяє після апробації легко вдосконалювати, переробляти і доповнювати його.

Автори посібника сподіваються, що за наявності зацікавленості та зустрічних зусиль з боку читача, посібник виявиться корисним підґрунтям для можливості плідно опрацьовувати оригінальні роботи з тематики квантових обчислень, а також що він стане черговою сходинкою на шляху до поглиблення розуміння квантової механіки.

Розділ 1

Спін та спінові функції частинки зі спіном $s = \frac{1}{2}$

1.1 Спін електрона

Поняття спіну було введено у фізиці в 1925 р. Д. Уленбеком і С. Гоудсмітом. За своєю фізичною природою спін є моментом імпульсу (момент кількості руху). Висновки, що були зроблені з аналізу експериментальних (головним чином спектроскопічних) даних, полягають у наступному:

- Електрон має власний механічний момент (спін), проекція якого на довільний напрямок може приймати лише два значення, а саме

$$s_z = \pm \frac{\hbar}{2},$$

де \hbar — стала Планка.

- Зі спіном електрона пов'язаний його власний магнітний момент, проекція якого також може приймати два окремих значення

$$\mu_z = \pm \frac{e\hbar}{2m_e c},$$

де e — заряд електрона, m_e — маса електрона, c — швидкість світла.

Для електрона відношення спінового магнітного моменту до його механічного моменту (гіромагнітне відношення) дорівнює

$$\gamma = \frac{e}{m_e c},$$

і з погляду класичної електродинаміки є аномальним: для орбітального руху електрона, як і для будь-яких заряджених частинок, гіромагнітне відношення дорівнює $\frac{e}{2mc}$.

Врахування спіну електрона дозволило В. Паулі сформулювати відомий принцип заборони (принцип Паулі), на основі якого було пояснено порядок заповнення електронних оболонок в атомі, і, як наслідок, стала зрозумілою структура періодичної таблиці Менделєєва.

У квантовій механіці спін розуміють як первинну властивість елементарної частинки (поряд з масою спокою та електричним зарядом), що не має аналогу в класичній фізиці. Спін — це внутрішня ступінь вільності. Як правило, спін вимірюють в одиницях сталої Планка \hbar , формально називаючи при цьому безрозмірні одиниці — число таких одиниць у реальному значенні спіна. Отже, надалі вважаємо, що спін електрона (а також протона і нейтрона) дорівнює $s = \frac{1}{2}$.

Спіну частинки у квантовій механіці ставиться у відповідність лінійний самоспряжений оператор $\hat{\vec{s}}$. Алгебраїчно спін являє собою векторну (точніше, псевдовекторну) величину, декартові координати якої будемо позначати через s_x, s_y, s_z .

Спін частинок однозначно пов'язаний зі статистикою, якій вони підпорядковуються. Частинки з цілим спіном (бозони) підпорядковуються статистиці Бозе-Ейнштейна, а частинки з напівцілим спіном (ферміони) — статистиці Фермі-Дірака. Отже, електрон являє собою частинку-ферміон.

1.2 Абсолютно антисиметричний одиничний тензор

Для зручного викладення наступного матеріалу розглянемо спочатку властивості абсолютно антисиметричного одиничного тензора ε_{ijk} .

Тензор ε_{ijk} (кожний з індексів i, j, k може приймати значення x, y, z або $1, 2, 3$) однозначно визначається наступними властивостями:

1. $\varepsilon_{ijk} = 0$, якщо значення хоча б двох індексів збігаються;
2. $\varepsilon_{ijk} = 1$, якщо трійка чисел i, j, k має відповідне значення $1, 2, 3$, або послідовність значень цих індексів можна отримати з $1, 2, 3$ за допомогою циклічної перестановки;
3. $\varepsilon_{ijk} = -1$ у всіх інших випадках;

4. компоненти тензора ε_{ijk} не змінюються при обертанні та інверсії системи координат.

Компоненти тензора ε_{ijk} можна наочно подати у вигляді змішаного добутку трьох взаємно ортогональних ортів \vec{e}_i ($i = 1, 2, 3$) у тривимірному просторі

$$\varepsilon_{ijk} = [\vec{e}_i \times \vec{e}_j] \cdot \vec{e}_k. \quad (1.1)$$

За допомогою тензора ε_{ijk} будь-яку компоненту векторного добутку двох векторів можна подати у вигляді

$$[\vec{a} \times \vec{b}]_i = \sum_{jk} \varepsilon_{ijk} a_j b_k. \quad (1.2)$$

Нагадаємо також відому рівність

$$\det \hat{A} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = \sum_{ijk} \varepsilon_{ijk} a_{1i} a_{2j} a_{3k}. \quad (1.3)$$

Добуток компонентів тензора ε_{ijk} можна представити у вигляді визначників, побудованих із символів Кронекера

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{i'j'k'} &= \begin{vmatrix} \delta_{ii'} & \delta_{ij'} & \delta_{ik'} \\ \delta_{ji'} & \delta_{jj'} & \delta_{jk'} \\ \delta_{ki'} & \delta_{kj'} & \delta_{kk'} \end{vmatrix} \\ &= \delta_{ii'} (\delta_{jj'} \delta_{kk'} - \delta_{jk'} \delta_{kj'}) + \delta_{ij'} (\delta_{ki'} \delta_{jk'} - \delta_{ji'} \delta_{kk'}) \\ &\quad + \delta_{ik'} (\delta_{ji'} \delta_{kj'} - \delta_{jj'} \delta_{ki'}). \end{aligned} \quad (1.4)$$

Ця рівність є наслідком більш загального співвідношення:

$$([\vec{a} \times \vec{b}] \cdot \vec{c}) ([\vec{d} \times \vec{e}] \cdot \vec{f}) = \begin{vmatrix} \vec{a} \cdot \vec{d} & \vec{a} \cdot \vec{e} & \vec{a} \cdot \vec{f} \\ \vec{b} \cdot \vec{d} & \vec{b} \cdot \vec{e} & \vec{b} \cdot \vec{f} \\ \vec{c} \cdot \vec{d} & \vec{c} \cdot \vec{e} & \vec{c} \cdot \vec{f} \end{vmatrix}, \quad (1.5)$$

де $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}, \vec{d}, \vec{e}, \vec{f}$ — довільні вектори у тривимірному просторі.

Безпосередньо з (1.4) отримуються формули згорток двох тензорів:

$$\sum_k \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{i'jk} = \delta_{ii'} \delta_{jj'} - \delta_{ij'} \delta_{ji'}, \quad (1.6)$$

$$\sum_{jk} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{i'jk} = 2\delta_{ii'}, \quad (1.7)$$

$$\sum_{ijk} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ijk} = 6. \quad (1.8)$$

Абсолютно антисиметричний тензор ε_{ijk} також називають **тензором Леві-Чивіта**.

1.3 Спінові матриці

Згідно з загальними принципами квантової механіки, спіну електрона ставиться у відповідність лінійний самоспряжений оператор, що діє на спінові хвильові функції в специфічному спіновому просторі. За фізичною природою спін є моментом кількості руху (або кутовим моментом). Нагадаємо, що у квантовій механіці кутовий момент квантується, а оператори проєкцій кутового моменту задовольняють певним комутаційним співвідношенням. Природно вимагати, щоб оператори проєкції спіну $\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$ (надалі ми також будемо позначати їх як $\hat{s}_1, \hat{s}_2, \hat{s}_3$) задовольняють таким самим комутаційним співвідношенням, що й оператори проєкцій кутового моменту орбітального руху $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{s}_k, \quad [\hat{s}_i, \hat{s}^2] = 0. \quad (1.9)$$

Як правило, для частинок із спіном $1/2$ замість операторів \hat{s}_i використовують оператори $\hat{\sigma}_i$, які визначаються за допомогою співвідношення

$$\hat{s}_i = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_i. \quad (1.10)$$

На підставі (1.9) та (1.10) отримуємо комутаційні співвідношення для операторів

$$[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k. \quad (1.11)$$

Згідно з гіпотезою, яка спирається на експериментальний матеріал, проєкція спіну електрона на будь-який напрямок у просторі може мати два значення: $\pm\frac{1}{2}$. Відповідно до цього, оператори \hat{s}_i та $\hat{\sigma}_i$ можуть бути представлені у вигляді дворядних матриць. Власними значеннями операторів \hat{s}_i повинні бути числа $\pm\frac{1}{2}$, а операторів $\hat{\sigma}_i$ — відповідно ± 1 . Отже, власні значення операторів $\hat{\sigma}_i^2$ дорівнюють $+1$. Це означає, що $\hat{\sigma}_i^2$ є одиничними матрицями. Таким чином, у будь-якому представленні

$$\hat{\sigma}_i^2 = \hat{I}, \quad (1.12)$$

де \hat{I} — одиничний оператор.

Використовуючи комутаційні співвідношення (1.11) та враховуючи (1.12), можна показати, що оператори $\hat{\sigma}_i$ та $\hat{\sigma}_j$ при $i \neq j$ антикомутують. Дійсно, при $i \neq j$ рівність (1.11) можна переписати у вигляді

$$\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j - \hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i = \pm 2i\hat{\sigma}_k, \quad i \neq j, \quad k \neq i, \quad k \neq j.$$

Знак “+” відповідає випадку, коли трійка індексів i, j, k має відповідне значення 1, 2, 3 або отримується з них циклічною перестановкою.

Домножуючи ліву та праву частини співвідношення (1.11) на оператор $\hat{\sigma}_i$ спочатку справа, а потім зліва, будемо мати

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_i^2 \hat{\sigma}_j - \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_i &= \pm 2i \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_k, \\ \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_i - \hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_i^2 &= \pm 2i \hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_i, \end{aligned} \quad i \neq j, \quad k \neq i, \quad k \neq j.$$

Додаючи почленно ліві та праві частини цих рівностей та враховуючи (1.12), одержимо

$$\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_k + \hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_i = 0, \quad i \neq k.$$

Отримані співвідношення з врахуванням (1.12) можна подати у вигляді

$$\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j + \hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_i = \{\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\} = 2\delta_{ij}. \quad (1.13)$$

З формул (1.11) та (1.13) можна безпосередньо отримати важливу властивість спінових матриць

$$\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = \delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k. \quad (1.14)$$

Важливість формули (1.14) полягає в тому, що комбінація добутків будь-яких степенів матриць $\hat{\sigma}_i$ зводиться послідовним застосуванням (1.14) до їх лінійної комбінації. Це означає, що будь-яка функція операторів $\hat{\sigma}_i$ зводиться до лінійного по $\hat{\sigma}_i$ виразу. Нижче ми розглянемо деякі приклади лінеаризації по $\hat{\sigma}_i$ функцій, що залежать від спінових матриць.

Формула (1.14) містить у собі всю алгебру спінових матриць для спіну $s = 1/2$. Права частина цієї формули представляє собою суму симетричної і антисиметричної по індексах i, j частин. Зауважимо, що комутативне співвідношення (1.9) справедливе для довільного значення спіну, як і для моменту будь-якої природи, а вираз для антикомутатора (1.13) виконується лише для спіну $s = 1/2$.

1.4 Матриці Паулі

Явний вигляд спінових матриць $\hat{\sigma}_i$ залежить від представлення, в якому розглядаються спінові оператори. Прийнято матриці $\hat{\sigma}_i$ записувати в базисі, де $\hat{\sigma}_z$ (тобто $\hat{\sigma}_z$) діагональна (σ_z -представлення)

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.15)$$

Знайдемо тепер явний вигляд матриці $\hat{\sigma}_x$. Як і $\hat{\sigma}_z$, вона повинна бути матрицею розмірності 2×2

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}.$$

Беручи до уваги явний вигляд матриці $\hat{\sigma}_z$ (1.15), використовуємо антикомутаційне співвідношення $\hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x = -\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z$. Виявляється при цьому, що діагональні елементи $a_{11} = a_{22} = 0$. Таким чином, матриця $\hat{\sigma}_x$ набуває вигляду

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} \\ a_{21} & 0 \end{pmatrix}.$$

Далі, оскільки $\hat{\sigma}_x^2 = \hat{I}$, то $a_{12}a_{21} = 1$, а врахування самоспряженості $\hat{\sigma}_x$ дає $a_{12} = a_{21}^*$. Тепер матрицю $\hat{\sigma}_x$ можна переписати у вигляді

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & 0 \end{pmatrix}.$$

По аналогії можна отримати матрицю $\hat{\sigma}_y$:

$$\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\beta} \\ e^{-i\beta} & 0 \end{pmatrix}.$$

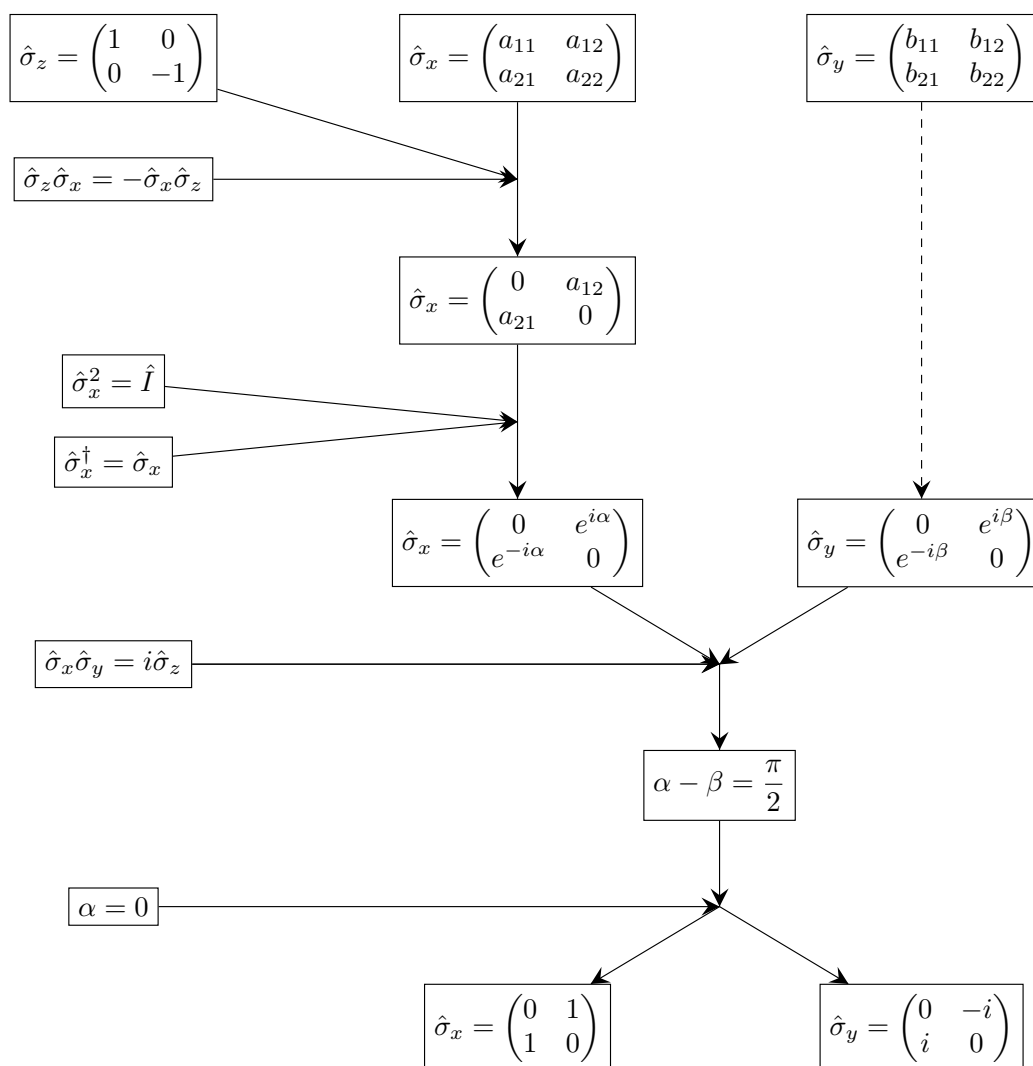
Параметри α та β поки що залишаються довільними. Умова (1.14) $\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y = i\hat{\sigma}_z$ зв'язує їх рівністю

$$\alpha - \beta = \frac{\pi}{2}. \quad (1.16)$$

За будь-якого вибору пари параметрів α та β , що задовольняють (1.16), всі умови на оператори $\hat{\sigma}_i$ будуть виконані, й подальший розвиток математичного формалізму спіну не залежатиме від цього вибору. Тому, не втрачаючи загальності, можна покласти $\alpha = 0$, $\beta = -\pi/2$. При цьому $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ набувають відомого вигляду

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.17)$$

Спінові матриці (1.17) звуться *матрицями Паулі*. Послідовність дій для отримання явного вигляду $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ наведена нижче у вигляді Схеми 1.



$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Схема 1. Отримання явного вигляду матриць $\hat{\sigma}_x$ і $\hat{\sigma}_y$

1.5 Власні вектори матриць Паулі (власні функції операторів спіну)

Вище було зазначено, що матриці Паулі (1.17) записано в представленні s_z . Це означає, що елементи матриць $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ в (1.17) є матричними елементами відповідних операторів, які обчислюються на нормованих власних функціях оператора $\hat{\sigma}_z$. Позначимо через $|\frac{1}{2}\rangle$ і $|\frac{1}{2}\rangle$ нормовані власні вектори оператора $\hat{\sigma}_z$, що відповідають власним значенням $+1$ і -1 ($\frac{1}{2}$ і $-\frac{1}{2}$ — це значення проекції спіну s_z):

$$\hat{\sigma}_z \left| \frac{1}{2} \right\rangle = +1 \left| \frac{1}{2} \right\rangle, \quad \hat{\sigma}_z \left| -\frac{1}{2} \right\rangle = -1 \left| -\frac{1}{2} \right\rangle. \quad (1.18)$$

Вектори $|\frac{1}{2}\rangle$ і $|\frac{1}{2}\rangle$ можна наочно зобразити у вигляді векторів-стовпчиків

$$\left| \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \left| -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1.19)$$

Тоді ліві частини співвідношень (1.18) можна тлумачити як множення матриць (1.17) на вектори-стовпчики (1.19).

Вектори $|\frac{1}{2}\rangle$ та $|\frac{1}{2}\rangle$ утворюють повний набір базисних векторів у просторі спінових станів однієї частинки. Тобто, за ними можна розкласти довільну спінову функцію $|\chi\rangle$ у цьому просторі

$$|\chi\rangle = \alpha \left| \frac{1}{2} \right\rangle + \beta \left| -\frac{1}{2} \right\rangle,$$

представляючи базисні стани у вигляді векторів-стовпчиків,

$$|\chi\rangle = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}. \quad (1.20)$$

Скалярний добуток двох довільних спінових функцій $|\chi_1\rangle$ та $|\chi_2\rangle$ визначається наступним чином:

$$\begin{aligned} \langle \chi_1 | \chi_2 \rangle &= \left(\alpha_1^* \left\langle \frac{1}{2} \right| + \beta_1^* \left\langle -\frac{1}{2} \right| \right) \left(\alpha_2 \left| \frac{1}{2} \right\rangle + \beta_2 \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \right) \\ &= \alpha_1^* \alpha_2 + \beta_1^* \beta_2. \end{aligned} \quad (1.21)$$

При одержанні (1.21) ми скористалися ортонормованістю базисних власних функцій $|\frac{1}{2}\rangle$ та $|\frac{1}{2}\rangle$

$$\langle \mu | \nu \rangle = \delta_{\mu\nu}, \quad \mu, \nu = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}. \quad (1.22)$$

1.5. Власні вектори матриць Паулі (власні функції операторів спіну) 21

Функції $\left\langle \frac{1}{2} \right|$ та $\left\langle -\frac{1}{2} \right|$ можна представити у вигляді векторів-рядків:

$$\left\langle \frac{1}{2} \right| = (1 \ 0), \quad \left\langle -\frac{1}{2} \right| = (0 \ 1).$$

Результат дії операторів $\hat{\sigma}_x$ і $\hat{\sigma}_y$ на функції $\left| \frac{1}{2} \right\rangle$ та $\left| -\frac{1}{2} \right\rangle$ можна отримати, скориставшись явним виглядом операторів спіну у вигляді матриць (1.17) та векторів стану (1.19). Наприклад,

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_x \left| \frac{1}{2} \right\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \hat{\sigma}_y \left| -\frac{1}{2} \right\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i \\ 0 \end{pmatrix} = -i \left| \frac{1}{2} \right\rangle. \end{aligned}$$

Аналогічно можна отримати результат дії будь-якого оператора, який визначено в просторі спіну та представлено у вигляді матриці.

Визначимо тепер власні функції операторів $\hat{\sigma}_x$ і $\hat{\sigma}_y$ у вигляді розкладу по базису $|\mu\rangle$

$$\left| \frac{1}{2}, x \right\rangle = c_1 \left| \frac{1}{2} \right\rangle + c_2 \left| -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}.$$

Для знаходження невідомих коефіцієнтів розкладу c_1 та c_2 будемо вимагати, щоб $\left| \frac{1}{2}, x \right\rangle$ була власною функцією оператора $\hat{\sigma}_x$, яка відповідає власному значенню $+1$:

$$\hat{\sigma}_x \left| \frac{1}{2}, x \right\rangle = +1 \left| \frac{1}{2}, x \right\rangle, \text{ тобто } \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_2 \\ c_1 \end{pmatrix}.$$

З останньої рівності маємо: $c_1 = c_2$. Це разом з умовою нормування $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$ визначає (з точністю до фазового множника), що $c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Провівши аналогічні розрахунки для визначення другої власної функції (яка відповідає власному значенню -1), запишемо остаточно власні вектори оператора $\hat{\sigma}_x$:

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2}, x \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \left| -\frac{1}{2}, x \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2} \right\rangle - \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{1.23}$$

Аналогічно знаходимо власні функції оператора $\hat{\sigma}_y$:

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2}, y \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2} \right\rangle + i \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \\ \left| -\frac{1}{2}, y \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2} \right\rangle - i \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{1.24}$$

Так само можна знайти спінові функції станів з певним значенням проекції спіну на будь-яку задану вісь. Такими функціями є власні функції оператора $\vec{\sigma} \cdot \vec{n}$, де \vec{n} — одиничний вектор, що визначає напрямок осі. Функції $|\frac{1}{2}, \vec{n}\rangle$ та $|\frac{1}{2}, \vec{n}\rangle$ відповідають орієнтаціям спіну вздовж осі \vec{n} та у протилежному напрямку відповідно. Вони мають вигляд

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2}, \vec{n} \right\rangle &= \cos(\theta/2) \left| \frac{1}{2} \right\rangle + \sin(\theta/2) e^{i\varphi} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| -\frac{1}{2}, \vec{n} \right\rangle &= \sin(\theta/2) \left| \frac{1}{2} \right\rangle - \cos(\theta/2) e^{i\varphi} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned} \quad (1.25)$$

де θ та φ є полярний та азимутальний кути вектора \vec{n} у сферичній системі координат.

Функції (1.23) є частинним випадком (1.25) при $\theta = \pi/2$, $\varphi = 0$; функції (1.24) — при $\theta = \pi/2$, $\varphi = \pi/2$. При перетворенні кутів $\theta \rightarrow \pi - \theta$, $\varphi \rightarrow \pi + \varphi$ стан $|\frac{1}{2}, \vec{n}\rangle$ переходить у $|\frac{1}{2}, \vec{n}\rangle$, оскільки ця операція змінює орієнтацію осі \vec{n} на протилежну.

Будь-яка пара функцій (1.23)-(1.25) утворює повний набір функцій (так само, як і пара $|\frac{1}{2}\rangle$ та $|\frac{1}{2}\rangle$) у просторі спінових станів $s = 1/2$. Усі ці функції є власними функціями операторів \hat{s}^2 , $\vec{s} \cdot \vec{n}$.

Простір спінових станів однієї частинки визначається базисом з двох функцій. Тому будь-який лінійний оператор, визначений у цьому просторі, може бути представлений за допомогою квадратної матриці розмірністю 2×2 . Повна система квадратних матриць другого рангу складається з чотирьох лінійно незалежних матриць. Безпосередньою перевіркою легко переконатися, що чотири матриці $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z, \hat{I}$ (\hat{I} — одинична матриця) є лінійно незалежними. Тому будь-який лінійний оператор \hat{A} , що визначений у спіновому просторі однієї частинки, може бути представлений у вигляді

$$\hat{A} = a\hat{I} + \vec{b} \cdot \vec{\sigma}, \quad (1.26)$$

де a та $\vec{b} = \{b_x, b_y, b_z\}$ — сукупність деяких коефіцієнтів. Базисні матриці (1.26) є зручними тому, що вони самоспряжені та мають прості алгебраїчні властивості.

1.6 Сходінкові оператори у спіновому просторі

Оператори, що визначаються за допомогою співвідношення

$$\hat{\sigma}_{\pm} = \hat{\sigma}_x \pm i\hat{\sigma}_y,$$

Табл. 1.1: сходянкові оператори

| | | Оператори | | | | | |
|-----------------|-----------------------|------------------------|-------------------------|--------------------|--------------------|--------------------------------|--------------------------------|
| | | $\hat{\sigma}_+$ | $\hat{\sigma}_-$ | $\hat{\sigma}_+^2$ | $\hat{\sigma}_-^2$ | $\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_-$ | $\hat{\sigma}_-\hat{\sigma}_+$ |
| Базисні функції | $ \frac{1}{2}\rangle$ | 0 | $2 -\frac{1}{2}\rangle$ | 0 | 0 | $4 \frac{1}{2}\rangle$ | 0 |
| | $ \frac{1}{2}\rangle$ | $2 \frac{1}{2}\rangle$ | 0 | 0 | 0 | 0 | $4 -\frac{1}{2}\rangle$ |

мають сходянкові властивості. З явного вигляду цих операторів

$$\hat{\sigma}_+ = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}$$

очевидно, що $\hat{\sigma}_+^\dagger = \hat{\sigma}_-$. Тобто вони не є самоспряженими операторами та їм не можуть відповідати жодні фізичні величини, що спостерігаються на досліді. Ці оператори є допоміжними і вводяться виключно з міркувань зручності. В Табл. 1.1 зведено результати дії операторів $\hat{\sigma}_\pm$ на базисні функції $|\frac{1}{2}\rangle$ і $|\frac{1}{2}\rangle$.

Задача на власні значення для сходянкових операторів не має сенсу, оскільки не існує унітарного перетворення, що робить їх діагональними.

Замість набору матриць $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_z$ можна користуватися набором $\hat{\sigma}_+$, $\hat{\sigma}_-$, $\hat{\sigma}_z$. Наприклад,

$$\hat{\vec{\sigma}}^2 = \hat{\sigma}_x^2 + \hat{\sigma}_y^2 + \hat{\sigma}_z^2 = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- + \hat{\sigma}_-\hat{\sigma}_+) + \hat{\sigma}_z^2.$$

1.7 Проекційний оператор

Нагадаємо, що проекційним оператором \hat{P} прийнято називати лінійний самоспряжений оператор, який задовольняє умові

$$\hat{P}^2 = \hat{P}. \quad (1.27)$$

У спіновому просторі частинки зі спіном $s = \frac{1}{2}$ будь-який оператор можна представити у вигляді (1.26)

$$\hat{P} = a\hat{I} + \vec{b} \cdot \hat{\vec{\sigma}}, \quad (1.28)$$

де a та \vec{b} — деякі сталі величини. Підносячи (1.28) до квадрату та лінеаризуючи по $\hat{\sigma}$, одержимо

$$\hat{P}^2 = (a^2 + b^2)\hat{I} + 2a\vec{b} \cdot \hat{\vec{\sigma}}.$$

Тут ми скористалися співвідношенням $\hat{I}^2 = \hat{I}$ та $\hat{\sigma}_i^2 = \hat{I}$. З умови (1.27) отримуємо

$$a^2 + b^2 = a, \quad 2a \vec{b} = \vec{b},$$

звідки $a = 1/2$, $\vec{b} = \frac{1}{2}\vec{n}$, де \vec{n} — одиничний вектор. Таким чином, проєкційний оператор у спіновому просторі має вигляд

$$\hat{P}_{\pm, \vec{n}} = \frac{1}{2} \left(\hat{I} \pm \vec{n} \cdot \hat{\vec{\sigma}} \right). \quad (1.29)$$

Зміст вектора \vec{n} можна з'ясувати, перевіривши дію операторів \hat{P}_{\pm} для певних напрямків \vec{n} . Нехай $\vec{n} = \vec{e}_z$ є одиничний вектор, спрямований вздовж осі z . В цьому випадку

$$\begin{aligned} \hat{P}_{+, z} &= \frac{1}{2} (\hat{I} + \hat{\sigma}_z) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{P}_{-, z} &= \frac{1}{2} (\hat{I} - \hat{\sigma}_z) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Дія цих операторів на довільний вектор $|\chi\rangle = \alpha \left| \frac{1}{2} \right\rangle + \beta \left| -\frac{1}{2} \right\rangle$ визначається за допомогою рівностей

$$\hat{P}_{+, z} |\chi\rangle = \alpha \left| \frac{1}{2} \right\rangle, \quad \hat{P}_{-, z} |\chi\rangle = \beta \left| -\frac{1}{2} \right\rangle.$$

Таким чином, оператори $\hat{P}_{+, z}$ та $\hat{P}_{-, z}$ проєктують стан $|\chi\rangle$ відповідно на стани $\left| \frac{1}{2} \right\rangle$ та $\left| -\frac{1}{2} \right\rangle$. Цей висновок легко узагальнити: оператори $\hat{P}_{\pm, \vec{n}}$ (1.29) проєктують на стани $\left| \frac{1}{2}, \vec{n} \right\rangle$ або $\left| -\frac{1}{2}, \vec{n} \right\rangle$ з певним значенням проєкції спіну ($\pm 1/2$) на вісь, що збігається з напрямком одиничного вектора \vec{n} . Функції $\left| \frac{1}{2}, \vec{n} \right\rangle$ та $\left| -\frac{1}{2}, \vec{n} \right\rangle$ є власними функціями оператора $\hat{P}_{+, \vec{n}}$ з власними значеннями 1 і 0 та власними функціями оператора $\hat{P}_{-, \vec{n}}$ з власними значеннями 0 і 1, відповідно.

Довільний оператор у лінійному просторі однозначно визначається правилом, за яким він діє на всі базисні вектори (функції) даного простору. Тому оператори проєктування, наприклад на вісь z , можна ввести як лінійні оператори, що визначаються за допомогою співвідношень:

$$\begin{aligned} \hat{P}_{+, z} \left| \frac{1}{2} \right\rangle &= \left| \frac{1}{2} \right\rangle, & \hat{P}_{+, z} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle &= 0, \\ \hat{P}_{-, z} \left| \frac{1}{2} \right\rangle &= 0, & \hat{P}_{-, z} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle &= \left| -\frac{1}{2} \right\rangle. \end{aligned}$$

1.8 Деякі властивості матриць Паулі

Вище вже було відмічено, що квадрати сходячих операторів $\hat{\sigma}_{\pm}^2 = 0$, тобто $\hat{\sigma}_{\pm}^2$ не мають обернених. Припустимо протилежне — що обернена матриця $\hat{\sigma}_{\pm}^{-1}$ існує:

$$\hat{\sigma}_{\pm}^{-1}\hat{\sigma}_{\pm} = \hat{I}.$$

Якщо ліву та праву частину цього співвідношення помножити на $\hat{\sigma}_{\pm}$ справа та врахувати, що $\hat{\sigma}_{\pm}^2 = 0$, то отримуємо очевидно невірний результат $\hat{\sigma}_{\pm} = 0$. Між іншим, відсутність матриць, обернених до $\hat{\sigma}_{\pm}$, безпосередньо впливає з виродженості цих матриць ($\det \hat{\sigma}_{\pm} = 0$), що можна бачити з їх явного вигляду.

Зробимо ще одне зауваження з приводу векторного позначення $\vec{\sigma}$. У різних алгебраїчних виразах та перетвореннях з оператором $\vec{\sigma}$ можна працювати як зі звичайним вектором з компонентами $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$. Однак, слід пам'ятати, що $\hat{\sigma}_i$ є оператори, які не комутують з іншими операторами у спіновому просторі та не комутують між собою. Тому формальне застосування алгебри простих векторів до $\vec{\sigma}$ може призвести до помилок. Наприклад, можна показати, що два вирази $(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b})$ та $(\vec{\sigma} \cdot \vec{b})(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})$ не є тотожними (тут \vec{a} і \vec{b} — вектори, що не є операторами у спіновому просторі). Покажемо є й інший приклад:

$$[\vec{\sigma} \times \vec{\sigma}] = 2i\vec{\sigma}. \quad (1.30)$$

Для звичайних векторів (не операторів) ліва частина (1.30), як відомо, дорівнює нулеві. Те, що $[\vec{\sigma} \times \vec{\sigma}]$ не дорівнює нулеві, безпосередньо пов'язано з некомутативністю операторів $\hat{\sigma}_i$ з різними значеннями індексу i . Підкреслимо, що $\hat{\sigma}_i$ є операторами у спіновому просторі та компонентами вектора (точніше псевдовектора) у звичайному просторі. Останнє твердження слід розуміти таким чином, що матричні елементи оператора $\hat{\sigma}_i$ перетворюються як i -та компонента вектора під час поворотів системи координат.

1.9 Лінеаризація нелінійних комбінацій спінових операторів

Послідовне використання формули (1.14) та врахування властивостей тензора ε_{ijk} (1.6), (1.7), (1.8) дозволяє звести будь-яку комбінацію добутків операторів $\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j$ до лінійної по $\hat{\sigma}_i$ форми. Наприклад, для добутку

трьох та чотирьох операторів будемо мати

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_k &= i \varepsilon_{ijk} \hat{I} + (\hat{\sigma}_i \delta_{jk} - \hat{\sigma}_j \delta_{ik} + \hat{\sigma}_k \delta_{ij}) \\ \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_l &= (\delta_{ij} \delta_{kl} - \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \hat{I} \\ &\quad + i (\varepsilon_{ijk} \hat{\sigma}_l + \delta_{ij} \varepsilon_{klm} \hat{\sigma}_m - \delta_{ik} \varepsilon_{jlm} \hat{\sigma}_m + \delta_{jk} \varepsilon_{ilm} \hat{\sigma}_m).\end{aligned}$$

У Табл. 1.2 наведено набір корисних співвідношень, ліві частини яких містять квадратичні (або більш високого степеня) вирази по $\vec{\hat{\sigma}}$, а у правій частині — лінійні. Через \vec{a} та \vec{b} позначено довільні вектори, що не є операторами у спіновому просторі.

Як приклад, розглянемо ланцюжок перетворень для доведення п. 3 з Табл. 1.2.

$$\begin{aligned}\vec{\hat{\sigma}} \cdot [\vec{\hat{\sigma}} \times \vec{a}] &= \sum_i \hat{\sigma}_i \sum_{kl} \varepsilon_{ikl} \hat{\sigma}_k a_l = \sum_{ikl} \varepsilon_{ikl} \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_k a_l \\ &= \sum_{ikl} \varepsilon_{ikl} \left(\delta_{ik} + i \sum_m \varepsilon_{ikm} \hat{\sigma}_m \right) a_l = i \sum_{iklm} \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{ikm} \hat{\sigma}_m a_l \\ &= 2i \sum_{lm} \delta_{lm} \hat{\sigma}_m a_l = 2i \sum_l \hat{\sigma}_l a_l = 2i (\vec{\hat{\sigma}} \cdot \vec{a}).\end{aligned}$$

Розглянемо задачу лінеаризації по $\vec{\hat{\sigma}}$ довільної функції $F(a + \vec{b} \cdot \vec{\hat{\sigma}})$. Перепишемо її у вигляді $F(a + b \vec{n} \cdot \vec{\hat{\sigma}})$, де $\vec{n} = \vec{b}/b$ є одиничний вектор. Приймаючи до уваги рівності 9 та 10 з Табл. 1.2, можна записати

$$F(a + b \vec{n} \cdot \vec{\hat{\sigma}}) = A + B \vec{n} \cdot \vec{\hat{\sigma}}, \quad (1.31)$$

де коефіцієнти A та B залежать в загальному випадку від a та b . Подіємо лівою та правою частинами операторної рівності (1.31) на власні функції $|\frac{1}{2}, \vec{n}\rangle$ та $|\frac{1}{2}, \vec{n}\rangle$ оператора $\vec{n} \cdot \vec{\hat{\sigma}}$ та врахуємо, що відповідні власні значення дорівнюють ± 1 :

$$F(a + b) = A + B, \quad F(a - b) = A - B.$$

Звідси

$$A = \frac{F(a + b) + F(a - b)}{2}, \quad B = \frac{F(a + b) - F(a - b)}{2}.$$

Отже:

$$\begin{aligned}F(a + \vec{b} \cdot \vec{\hat{\sigma}}) &= \frac{F(a + b) + F(a - b)}{2} \hat{I} \\ &\quad + \frac{F(a + b) - F(a - b)}{2b} \vec{b} \cdot \vec{\hat{\sigma}}.\end{aligned} \quad (1.32)$$

Табл. 1.2: Лінеаризація виразів з матрицями Паулі

| № | Операторні тотожності |
|----|---|
| 1 | $\left[\hat{\vec{\sigma}} \times \hat{\vec{\sigma}}\right] = 2i\hat{\vec{\sigma}}$ |
| 2 | $\hat{\vec{\sigma}} \cdot (\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{a}) = \hat{I}\vec{a} - i\left[\hat{\vec{\sigma}} \times \vec{a}\right]$ |
| 3 | $(\hat{\vec{\sigma}} \cdot [\hat{\vec{\sigma}} \times \vec{a}]) = 2i(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{a})$ |
| 4 | $\hat{\vec{\sigma}} \times [\hat{\vec{\sigma}} \times \vec{a}] = -2\hat{I}\vec{a} + i[\hat{\vec{\sigma}} \times \vec{a}]$ |
| 5 | $(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{a})(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{b}) = (\vec{a} \cdot \vec{b})\hat{I} + i(\hat{\vec{\sigma}} [\vec{a} \times \vec{b}])$ |
| 6 | $([\hat{\vec{\sigma}} \times \vec{a}] \cdot [\hat{\vec{\sigma}} \times \vec{b}]) = 2(\vec{a} \cdot \vec{b})\hat{I} + i(\hat{\vec{\sigma}} [\vec{a} \times \vec{b}])$ |
| 7 | $(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{a})[\hat{\vec{\sigma}} \times \vec{b}] = [\vec{a} \times \vec{b}]\hat{I} + i\{(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{b})\vec{a} - (\vec{a} \cdot \vec{b})\hat{\vec{\sigma}}\}$ |
| 8 | $[[\hat{\vec{\sigma}} \times \vec{a}] \times [\hat{\vec{\sigma}} \times \vec{b}]] = [\vec{a} \times \vec{b}]\hat{I} + i\{(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{b})\vec{a} + (\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{a})\vec{b}\}$ |
| 9 | $(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{n})^{2k} = \hat{I}, k — \text{ціле невід'ємне число, } \vec{n} — \text{одиничний вектор}$ |
| 10 | $(\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{n})^{2k+1} = (\hat{\vec{\sigma}} \cdot \vec{n}), k — \text{ціле невід'ємне число, } \vec{n} — \text{одиничний вектор}$ |

Формула (1.32) дозволяє провести лінеаризацію по $\hat{\vec{\sigma}}$ багатьох виразів. Так, наприклад, застосовуючи (1.32), можна записати

$$\begin{aligned}
 \exp(i\vec{a} \cdot \hat{\vec{\sigma}}) &= \hat{I} \cos a + i \frac{\vec{a} \cdot \hat{\vec{\sigma}}}{a} \sin a \\
 \exp(\alpha \hat{\sigma}_i) &= \hat{I} \cosh \alpha + \hat{\sigma}_i \sinh \alpha \\
 \cosh(\alpha \hat{\sigma}_i) &= \hat{I} \cosh \alpha \\
 \sinh(\alpha \hat{\sigma}_i) &= \hat{\sigma}_i \sinh \alpha \\
 \sin\left(a + \vec{b} \cdot \hat{\vec{\sigma}}\right) &= \hat{I} \sin a \cos b + \frac{\vec{b} \cdot \hat{\vec{\sigma}}}{b} \cos a \sin b.
 \end{aligned} \tag{1.33}$$

1.10 Обчислення трейсу комбінацій матриць Паулі

Під трейсом матриці розуміють суму її діагональних елементів. Значення трейсів одиничної матриці \hat{I} та матриць Паулі очевидні:

$$\text{Tr} \hat{I} = 2, \quad \text{Tr} \hat{\sigma}_i = 0, \quad i = 1, 2, 3.$$

Якщо деякий оператор \hat{A} містить матриці Паулі, то трейс цього оператора у спіновому просторі зручно знаходити після приведення його до вигляду, лінійного по $\hat{\sigma}_i$

$$\begin{aligned} \hat{A} &= a\hat{I} + \vec{b} \cdot \vec{\hat{\sigma}} \\ \text{Tr} \hat{A} &= 2a \end{aligned} \quad (1.34)$$

У свою чергу, коефіцієнти розкладу (1.34) обчислюються за формулами

$$a = \frac{1}{2} \text{Tr} \hat{A}, \quad b_i = \frac{1}{2} \text{Tr} (\hat{\sigma}_i \hat{A}), \quad i = 1, 2, 3.$$

У Табл. 1.3 наведено значення трейсів деяких операторів, які визначені у спіновому просторі.

При обчисленнях трейсу добутку великої кількості матриць Паулі зручно користуватися формулою зведення

$$\begin{aligned} \text{Tr} (\hat{\sigma}_{i_1} \hat{\sigma}_{i_2} \dots \hat{\sigma}_{i_n}) &= \delta_{i_1 i_2} \text{Tr} (\hat{\sigma}_{i_3} \hat{\sigma}_{i_4} \dots \hat{\sigma}_{i_n}) - \delta_{i_1 i_3} \text{Tr} (\hat{\sigma}_{i_2} \hat{\sigma}_{i_4} \hat{\sigma}_{i_5} \dots \hat{\sigma}_{i_n}) \\ &\quad + \delta_{i_1 i_4} \text{Tr} (\hat{\sigma}_{i_2} \hat{\sigma}_{i_3} \hat{\sigma}_{i_5} \dots \hat{\sigma}_{i_n}) - \dots + \delta_{i_1 i_n} \text{Tr} (\hat{\sigma}_{i_2} \hat{\sigma}_{i_3} \dots \hat{\sigma}_{i_{n-1}}). \end{aligned}$$

Величина трейсу добутку операторів не змінюється при їх циклічній перестановці. Доведемо це твердження для трьох операторів (спосіб доведення залишається незмінним для будь-якої кількості операторів)

$$\text{Tr} (\hat{A} \hat{B} \hat{C}) = \sum_{ijk} A_{ij} B_{jk} C_{ki} = \sum_{ijk} B_{jk} C_{ki} A_{ij} = \text{Tr} (\hat{B} \hat{C} \hat{A}) = \text{Tr} (\hat{C} \hat{A} \hat{B}).$$

Трейс оператора не залежить від представлення цього оператора. Дійсно, перехід від одного представлення до іншого реалізується за допомогою унітарних операторів

$$\hat{\tilde{A}} = \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U},$$

звідки, роблячи циклічну перестановку операторів під знаком трейсу, отримуємо

$$\text{Tr} \hat{\tilde{A}} = \text{Tr} (\hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U}) = \text{Tr} (\hat{U} \hat{U}^\dagger \hat{A}) = \text{Tr} (\hat{I} \hat{A}) = \text{Tr} \hat{A}.$$

Табл. 1.3: Трейси операторів

| № | Операторні тотожності |
|---|--|
| 1 | $\text{Tr} \hat{P}_{\pm} = 1$, \hat{P}_{\pm} — оператор проектування на стани $ \pm \frac{1}{2}\rangle$ |
| 2 | $\text{Tr} (\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j) = 2\delta_{ij}$ |
| 3 | $\text{Tr} (\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_k) = 2i\varepsilon_{ijk}$ |
| 4 | $\text{Tr} (\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_l) = 2(\delta_{ij}\delta_{kl} - \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})$ |
| 5 | $\text{Tr} (\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_l \hat{\sigma}_m) = 2i(\delta_{ij}\varepsilon_{klm} + \delta_{kl}\varepsilon_{ijm} + \delta_{km}\varepsilon_{ilj} + \delta_{lm}\varepsilon_{ijk})$ |
| 6 | $\text{Tr} \left[F \left(a + \vec{b} \cdot \vec{\hat{\sigma}} \right) \right] = F(a+b) + F(a-b)$ |

1.11 Повний момент кількості руху частинки зі спіном $s = 1/2$

Орбітальний момент частинки та її спін представляють фізичні величини однакової природи, а саме — момент кількості руху. Сума цих величин має зміст повного моменту імпульсу частинки

$$\vec{\hat{j}} = \vec{\hat{L}} + \vec{\hat{s}}. \quad (1.35)$$

Безпосередньою перевіркою можна переконаватися, що компоненти оператора повного моменту задовольняють тим самим комутаційним співвідношенням, що і компоненти орбітального моменту

$$[\hat{j}_i, \hat{j}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{j}_k, \quad \left[\hat{j}_i, \vec{\hat{j}}^2 \right] = 0. \quad (1.36)$$

При доведенні (1.36) слід враховувати, що оператори $\vec{\hat{L}}$ та $\vec{\hat{s}}$ діють у різних просторах і тому комутують між собою. Легко бачити також, що оператор $\vec{\hat{j}}^2$ комутує з операторами $\vec{\hat{L}}^2$, $\vec{\hat{s}}^2$. Тобто, існують стани частинки, в яких величини j^2 , L^2 , s^2 , а також одна з компонент j_i мають одночасно певні значення (ці величини можна виміряти одночасно).

Поставимо задачу знаходження системи власних функцій $|jm_j Ls\rangle$ операторів $\vec{\hat{j}}^2$, j_z , $\vec{\hat{L}}^2$, $\vec{\hat{s}}^2$, які задовольняють рівнянням на власні зна-

чення

$$\begin{aligned}\hat{j}^2 |jm_j Ls\rangle &= j(j+1) |jm_j Ls\rangle \\ \hat{j}_z |jm_j Ls\rangle &= m_j |jm_j Ls\rangle \\ \hat{l}^2 |jm_j Ls\rangle &= L(L+1) |jm_j Ls\rangle \\ \hat{s}^2 |jm_j Ls\rangle &= \frac{3}{4} |jm_j Ls\rangle\end{aligned}\quad (1.37)$$

Квантові числа L та s вважаються заданими (зараз розглядаємо випадок $s = 1/2$), а можливі значення квантових чисел j та m_j поки що є невизначеними.

Простір, у якому визначено оператор \hat{j} , є прямим добутком двох лінійних просторів, у кожному з яких визначені окремо оператори \hat{L} або \hat{s} . Тому для побудови станів $|jm_j Ls\rangle$ за базис природно взяти добуток власних функцій операторів \hat{L}^2, \hat{L}_z на власні функції операторів \hat{s}^2, \hat{s}_z

$$|jm_j Ls\rangle = \sum_{m_L \mu} C_{m_L \mu} |Lm_L\rangle |\mu\rangle, \quad (1.38)$$

де $|Lm_L\rangle$ є добуток радіальної функції на сферичну функцію $Y_{Lm}(\theta, \varphi)$:

$$|Lm_L\rangle = f_L(r) Y_{Lm}(\theta, \varphi),$$

а $|\mu\rangle$ ($\mu = \pm 1/2$) є власні функції оператора $\hat{\sigma}_z$. Нижче буде показано, що радіальна функція $f(r)$ не залежить від квантового числа m_j .

Подіємо оператором \hat{j}_z на ліву частину співвідношення (1.38) та рівним йому оператором $\hat{L}_z + \hat{s}_z$ на праву частину. В результаті будемо мати

$$m_j |jm_j Ls\rangle = \sum_{m_L \mu} C_{m_L \mu} (m_L + \mu) |Lm_L\rangle |\mu\rangle.$$

Це співвідношення узгоджується з (1.38) лише в тому випадку, якщо $m_j = m_L + \mu$. Таким чином, в (1.38) відмінні від нуля лише два коефіцієнти (при фіксованому L). Для простоти запису будемо надалі позначати їх через C_1 та C_2

$$|jm_j Ls\rangle = C_1 \left| L m_j - \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2} \right\rangle + C_2 \left| L m_j + \frac{1}{2} \right\rangle \left| -\frac{1}{2} \right\rangle.$$

Записуючи власні функції $\left| \frac{1}{2} \right\rangle$ та $\left| -\frac{1}{2} \right\rangle$ оператора $\hat{\sigma}_z$ у вигляді векторів-стовпчиків (1.19), одержимо

$$|jm_j Ls\rangle = \begin{pmatrix} C_1 \left| L m_j - \frac{1}{2} \right\rangle \\ C_2 \left| L m_j + \frac{1}{2} \right\rangle \end{pmatrix}. \quad (1.39)$$

Коефіцієнти C_1 і C_2 слід визначити з умови, що $|jm_j Ls\rangle$ є власною функцією оператора \hat{j}^2 , що відповідає власному значенню $j(j+1)$ (по аналогії з власними значеннями операторів \hat{L}^2 та \hat{s}^2). Можливі значення квантового числа j будуть визначені нижче. Зауважимо, що під \hat{L} в (1.35) слід розуміти добуток оператора орбітального кутового моменту на одиничну матрицю в спіновому просторі. Тоді

$$\begin{aligned}\hat{j}^2 &= \left(\hat{L}\hat{I} + \hat{s} \right)^2 = \hat{L}^2 \hat{I} + \hat{s}^2 + 2\hat{L} \cdot \hat{s} \\ &= \begin{pmatrix} \hat{L}^2 + \frac{3}{4} + \hat{L}_z & \hat{L}_- \\ \hat{L}_+ & \hat{L}^2 + \frac{3}{4} - \hat{L}_z \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (1.40)$$

При одержанні (1.40) враховано, що $\hat{s}^2 = \hat{s}_x^2 + \hat{s}_y^2 + \hat{s}_z^2 = \frac{3}{4}\hat{I}$.

Перепишемо перше рівняння (1.37), представивши оператор \hat{j}^2 у вигляді матриці (1.40), а хвильову функцію — у вигляді стовчика (1.39)

$$\begin{pmatrix} \hat{L}^2 + \frac{3}{4} + \hat{L}_z & \hat{L}_- \\ \hat{L}_+ & \hat{L}^2 + \frac{3}{4} - \hat{L}_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 |L m_j - \frac{1}{2}\rangle \\ C_2 |L m_j + \frac{1}{2}\rangle \end{pmatrix} = j(j+1) \begin{pmatrix} C_1 |L m_j - \frac{1}{2}\rangle \\ C_2 |L m_j + \frac{1}{2}\rangle \end{pmatrix}.$$

Враховуючи, що $|L m_j \pm \frac{1}{2}\rangle$ є власними функціями оператора \hat{L}^2 , та використовуючи вирази для сходинок операторів \hat{L}_\pm , перепишемо останню рівність у вигляді системи лінійних однорідних алгебраїчних рівнянь відносно коефіцієнтів C_1 і C_2

$$\begin{cases} C_1 \left[\left(L + \frac{1}{2} \right)^2 + m_j - j(j+1) \right] + C_2 \sqrt{\left(L + \frac{1}{2} \right)^2 - m_j^2} = 0 \\ C_1 \sqrt{\left(L + \frac{1}{2} \right)^2 - m_j^2} + C_2 \left[\left(L + \frac{1}{2} \right)^2 - m_j - j(j+1) \right] = 0. \end{cases}\quad (1.41)$$

Якщо припустити, що радіальна функція $f_L(r)$ залежить також від m_j , то в перший і другий доданки кожного з рівнянь системи (1.41) мають входити різні радіальні функції, при цьому коефіцієнти C_1 та C_2 будуть різними функціями, що залежать від r , чого бути не може.

Рівність нулю визначника системи рівнянь (1.41), тобто умова існування її нетривіального розв'язку, дає рівняння для визначення можливих значень квантового числа j

$$\begin{vmatrix} \left(L + \frac{1}{2} \right)^2 + m_j - j(j+1) & \sqrt{\left(L + \frac{1}{2} \right)^2 - m_j^2} \\ \sqrt{\left(L + \frac{1}{2} \right)^2 - m_j^2} & \left(L + \frac{1}{2} \right)^2 - m_j - j(j+1) \end{vmatrix} = 0.$$

Розв'язок цього рівняння (враховуючи, що j не може бути від'ємним числом) дає при кожному фіксованому L два значення квантового числа j

$$\begin{aligned} j &= L + \frac{1}{2} \quad \text{при} \quad L = 0, 1, 2, \dots \\ j &= L - \frac{1}{2} \quad \text{при} \quad L = 1, 2, 3, \dots \end{aligned}$$

При $L = 0$ маємо лише одне значення $j = 1/2$.

Підстановка знайдених значень квантового числа j , наприклад, у перше рівняння системи (1.41) дозволяє виразити коефіцієнт C_2 через C_1 :

$$\begin{aligned} C_2 &= -C_1 \sqrt{\frac{L + \frac{1}{2} - m_j}{L + \frac{1}{2} + m_j}}, \quad j = L + \frac{1}{2} \\ C_2 &= C_1 \sqrt{\frac{L + \frac{1}{2} + m_j}{L - \frac{1}{2} - m_j}}, \quad j = L - \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (1.42)$$

Коефіцієнт C_1 визначається з умови нормування хвильової функції (1.39), яка зводиться до

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

Запишемо остаточні вирази для хвильових функцій

$$\begin{aligned} |jm_j Ls\rangle &= \sqrt{\frac{L + m_j + \frac{1}{2}}{2L + 1}} \left| L m_j - \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{\frac{L - m_j + \frac{1}{2}}{2L + 1}} \left| L m_j + \frac{1}{2} \right\rangle \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \\ &\quad \text{для} \quad j = L + \frac{1}{2}, \quad s = \frac{1}{2}, \quad L = 0, 1, 2, \dots \\ |jm_j Ls\rangle &= \sqrt{\frac{L - m_j + \frac{1}{2}}{2L + 1}} \left| L m_j - \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{L + m_j + \frac{1}{2}}{2L + 1}} \left| L m_j + \frac{1}{2} \right\rangle \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \\ &\quad \text{для} \quad j = L - \frac{1}{2}, \quad s = \frac{1}{2}, \quad L = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (1.43)$$

При цьому радіальні функції повинні бути нормовані на одиницю

$$\int |f_L(r)|^2 r^2 dr = 1.$$

Зауважимо, що зі співвідношень (1.43) та властивостей сферичних функцій випливає, що квантове число m_j за модулем не може перевищувати значення j , тобто

$$-j \leq m_j \leq j.$$

1.12. Перетворення матричних елементів $\langle \chi_1 | \hat{\sigma}_I | \chi_2 \rangle$ при повороті системи координат 33

Конкретний вигляд радіальної функції $f_L(r)$ може бути визначений лише з додаткових умов. Наприклад, вона повинна бути розв'язком радіального рівняння Шредінгера, з конкретним потенціалом.

Підводячи підсумки, можна зробити деякі узагальнення. Співвідношення (1.38) фактично є ортогональне перетворення від базису $|Lm_L\rangle |\mu\rangle$, де певні значення мають величини L, L_z, s, s_z , до базису $|jm_j Ls\rangle$, елементи якого є власними станами операторів $\hat{j}^2, \hat{j}_z, \hat{L}^2, \hat{s}_z$.

Приклад, що розглянуто вище, є частковим випадком операції додавання кутового моменту. У квантовій теорії розроблено методи додавання кутових моментів довільної природи та величини. В загальному випадку ця задача ставиться наступним чином.

Нехай $|j_1 m_1\rangle$ є власні стани операторів квадрата кутового моменту \hat{j}_1^2 та його проекції на вісь z , а $|j_2 m_2\rangle$ — такі ж стани для оператора \hat{j}_2^2 . Тоді власні функції квадрата оператора сумарного кутового моменту $\hat{j} = \hat{j}_1 + \hat{j}_2$ та його проекції на вісь z можна записати у вигляді

$$|jm_j j_1 j_2\rangle = \sum_{m_1 m_2} (j_1 m_1 j_2 m_2 | jm_j) |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle,$$

де числа $(j_1 m_1 j_2 m_2 | jm_j)$ називаються коефіцієнтами векторного додавання, або ж коефіцієнтами Клебша-Гордона. Сукупність цих коефіцієнтів утворює матрицю ортогонального перетворення від одного базису до іншого. Справедливе також і обернене перетворення

$$|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle = \sum_{jm_j} (j_1 m_1 j_2 m_2 | jm_j) |jm_j j_1 j_2\rangle.$$

У вище наведеному прикладі коефіцієнти $C_{m_l \mu}$ є частковим випадком коефіцієнтів Клебша-Гордона, коли $j_2 = 1/2$.

1.12 Перетворення матричних елементів $\langle \chi_1 | \hat{\sigma}_i | \chi_2 \rangle$ при повороті системи координат

Доведемо, що матричні елементи $\langle \chi_1 | \hat{\sigma}_i | \chi_2 \rangle$ при повороті системи координат перетворюються як компоненти вектора. Нехай поворот відбувається навколо деякої вісі \vec{n} на кут φ . Тоді у новій системі координат радіус-вектор можна виразити через його координати у старій системі

$$\vec{r}' = \vec{r} \cos \varphi - [\vec{n} \times \vec{r}] \sin \varphi + 2\vec{n} (\vec{n} \cdot \vec{r}) \sin^2 \frac{\varphi}{2}. \quad (1.44)$$

Зміст (1.44) полягає в тому, що можна отримати співвідношення між компонентами одного і того ж вектора в старій та новій системах координат. Формулу (1.44) можна отримати безпосередньо з геометричних міркувань.

Відомо, що перетворення станів, які характеризуються кутовим моментом \vec{j} , при повороті системи координат здійснюється за допомогою унітарного оператора $\hat{R}_{\vec{n}}(\varphi) = e^{i\varphi(\vec{n} \cdot \vec{j})}$, де φ — кут повороту навколо осі, напрямком якої визначається одиничним вектором \vec{n} .

Позначимо через V_i та V'_i матричні елементи оператора $\hat{\sigma}_i$ в старій та новій системах координат, відповідно

$$\begin{aligned} V_i &= \langle \chi_1 | \hat{\sigma}_i | \chi_2 \rangle \\ V'_i &= \langle \chi'_1 | \hat{\sigma}_i | \chi'_2 \rangle, \end{aligned}$$

де $|\chi'_1\rangle = \hat{R}_{\vec{n}} |\chi_1\rangle$, $|\chi'_2\rangle = \hat{R}_{\vec{n}} |\chi_2\rangle$.

Далі, використовуючи $\langle \chi'_1 | = \langle \chi_1 | \hat{R}_{\vec{n}}^\dagger$, перепишемо матричний елемент V'_i

$$V'_i = \langle \chi_1 | \hat{R}_{\vec{n}}^\dagger \hat{\sigma}_i \hat{R}_{\vec{n}} | \chi_2 \rangle = \langle \chi'_1 | \hat{\sigma}'_i | \chi'_2 \rangle.$$

Лінеаризуємо по $\hat{\sigma}$ оператори $\hat{R}_{\vec{n}}$ і $\hat{R}_{\vec{n}}^\dagger$ за допомогою першого співвідношення (1.33)

$$\begin{aligned} \hat{R}_{\vec{n}} &= e^{i\frac{\varphi}{2}(\hat{\sigma} \cdot \vec{n})} = \hat{I} \cos \frac{\varphi}{2} + i \left(\hat{\sigma} \cdot \vec{n} \right) \sin \frac{\varphi}{2} \\ \hat{R}_{\vec{n}}^\dagger &= e^{-i\frac{\varphi}{2}(\hat{\sigma} \cdot \vec{n})} = \hat{I} \cos \frac{\varphi}{2} - i \left(\hat{\sigma} \cdot \vec{n} \right) \sin \frac{\varphi}{2}. \end{aligned}$$

Тоді

$$\hat{\sigma}'_i = \left[\hat{I} \cos \frac{\varphi}{2} - i \left(\hat{\sigma} \cdot \vec{n} \right) \sin \frac{\varphi}{2} \right] \hat{\sigma}_i \left[\hat{I} \cos \frac{\varphi}{2} + i \left(\hat{\sigma} \cdot \vec{n} \right) \sin \frac{\varphi}{2} \right].$$

Перетворимо окремі доданки правої частини цього співвідношення

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_i \left(\hat{\sigma} \cdot \vec{n} \right) - \left(\hat{\sigma} \cdot \vec{n} \right) \hat{\sigma}_i &= n_k (\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_k - \hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_i) = 2i \varepsilon_{ikl} n_k \hat{\sigma}_l = 2i \left[\vec{n} \times \hat{\sigma} \right]_i \\ \left(\hat{\sigma} \cdot \vec{n} \right) \hat{\sigma}_i \left(\hat{\sigma} \cdot \vec{n} \right) &= n_k n_l \hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_l = n_k n_l (i \varepsilon_{ikl} + \hat{\sigma}_k \delta_{il} - \hat{\sigma}_i \delta_{kl} + \hat{\sigma}_l \delta_{ki}) \\ &= 2 \left(\hat{\sigma} \cdot \vec{n} \right) n_i - \hat{\sigma}_i. \end{aligned}$$

Таким чином,

$$V'_i = \left\langle \beta \left| \hat{\sigma}_i \cos^2 \frac{\varphi}{2} - \left[\vec{n} \times \hat{\sigma} \right]_i \sin \varphi + \left[2 \left(\hat{\sigma} \cdot \vec{n} \right) n_i - \hat{\sigma}_i \right] \sin^2 \frac{\varphi}{2} \right| \alpha \right\rangle,$$

або остаточно

$$V'_i = V_i \cos \varphi - \left[\vec{n} \times \vec{V} \right]_i \sin \varphi + 2n_i \left(\vec{n} \cdot \vec{V} \right) \sin^2 \frac{\varphi}{2}.$$

Цей вираз з точністю до позначень збігається з i -ю компонентою співвідношення (1.44).

Таким чином, діагональні та недіагональні матричні елементи операторів $\hat{\sigma}_i$ на довільних базисних станах $|\chi_1\rangle$ і $|\chi_2\rangle$ при повороті системи координат перетворюються як компоненти вектора.

1.13 Вектор поляризації

Для опису просторової орієнтації спіну частинки застосовується поняття вектора поляризації \vec{P} , компоненти якого визначаються як середні значення відповідних матриць Паулі

$$P_i = \langle \mu | \hat{\sigma}_i | \mu \rangle, \quad i = x, y, z \quad (\text{або } i = 1, 2, 3). \quad (1.45)$$

На підставі (1.45) неважко знайти, що у стані $|\frac{1}{2}\rangle$ компоненти вектора поляризації приймають значення $P_x = 0$, $P_y = 0$, $P_z = 1$, а у стані $|\frac{1}{2}\rangle$ — відповідно $P_x = 0$, $P_y = 0$, $P_z = -1$. Це означає, що стани $|\frac{1}{2}\rangle$ і $|\frac{1}{2}\rangle$ характеризуються векторами поляризації, які за модулем дорівнюють одиниці та спрямовані відповідно вздовж і проти вісі z .

Розглянемо тепер більш загальний випадок, коли спіновий стан описується функцією $|\frac{1}{2}, \vec{n}\rangle$, яка є власною функцією оператора $\vec{\sigma} \cdot \vec{n}$. Запишемо її у вигляді вектора-стовпчика

$$\left| \frac{1}{2}, \vec{n} \right\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}.$$

Обчислюючи компоненти вектора поляризації за формулою (1.45), знайдемо

$$\begin{aligned} P_x &= \left(\cos \frac{\theta}{2} \quad e^{-i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \right) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = \sin \theta \cos \varphi \\ P_y &= \sin \theta \sin \varphi \\ P_z &= \cos \theta. \end{aligned} \quad (1.46)$$

З (1.46) очевидно, що параметри θ і φ можна трактувати як полярний та азимутальний кути вектора поляризації \vec{P} у сферичній системі координат. Для будь-яких значень цих кутів, модуль вектора поляризації

дорівнює одиниці. Це має місце для всіх так званих чистих спінових станів, коли стан системи можна описати за допомогою хвильової функції.

Більш загальним способом опису спінових станів є матриця густини. Формалізм матриці густини дозволяє розглядати так звані змішані спінові стани (чисті стани розглядаються як частковий випадок). У змішаних станах модуль вектора поляризації завжди менший за одиницю, $|\vec{P}| < 1$.

Зауважимо, що відповідним поворотом системи координат x', y', z' завжди можна спрямувати вісь z вздовж вектора поляризації \vec{P} . При такому виборі системи координат чистий спіновий стан буде описуватися хвильовою функцією $|\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$.

1.14 Питання та задачі для самостійної роботи

1. Одержати формули (1.23), (1.24), (1.25).
2. Показати, що матриці $\hat{I}, \hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ є лінійно незалежними.
3. Вектор поляризації частинки, що має спін $\frac{1}{2}$, складає однакові кути з віссю системи координат x, y, z . Записати спінову функцію відповідного стану.
4. Знайти власні функції та власні значення оператора

$$\hat{f} = a\hat{I} + \vec{b} \cdot \vec{\hat{\sigma}},$$

$a = \text{const}$, \vec{b} — сталий вектор.

5. Спін електрона орієнтовано вздовж осі z . Яка імовірність знайти електрон у станах з проекцією спіну $\frac{1}{2}$ на вісь $\vec{n}(\theta, \varphi)$?
6. З'ясувати, чи комутують оператори проектування на спінові стани $|\vec{n}_y\rangle$ та $|\vec{n}_x\rangle$.
7. Знайти власні функції та власні значення оператора $\vec{\hat{\sigma}} \cdot [\vec{\hat{\sigma}} \times \vec{\hat{\sigma}}]$.
8. Знайти матричні елементи $\langle \frac{1}{2} | \hat{\sigma}_+ \hat{\sigma}_- | -\frac{1}{2} \rangle$, $\langle \frac{1}{2} | \hat{\sigma}_+^2 | -\frac{1}{2} \rangle$.
9. Стан частинки зі спіном $s = \frac{1}{2}$ характеризується певним набором квантових чисел $j m_j l s$. Чому дорівнює імовірність знайти частинку у стані з проекцією спіну $\frac{1}{2}$ на вісь квантування?

10. Довести тотожності ($\vec{n} = \vec{r}/r$):

$$\begin{aligned}(\vec{n} \cdot \hat{\sigma}) (\hat{L} \cdot \hat{\sigma}) (\vec{n} \cdot \hat{\sigma}) &= -(\hat{L} \cdot \hat{\sigma} + 2) \\ (\hat{L} \cdot \hat{\sigma}) (\vec{n} \cdot \hat{\sigma}) + (\vec{n} \cdot \hat{\sigma}) (\hat{L} \cdot \hat{\sigma}) &= -2(\vec{n} \cdot \hat{\sigma}).\end{aligned}$$

11. Перевірити ортогональність функцій $|jm_j L \frac{1}{2}\rangle$ для різних значень m_j .

Розділ 2

Спінові стани системи частинок зі спіном $s = \frac{1}{2}$

2.1 Оператор сумарного спіну та базисні вектори у спіновому просторі системи двох частинок

Спін, як величина, що за природою являє собою момент імпульсу, є адитивною величиною. Тому оператор спіну *системи* двох частинок представляється у вигляді

$$\vec{\hat{S}} = \vec{\hat{s}}_1 + \vec{\hat{s}}_2. \quad (2.1)$$

Тут і далі спін вимірюється в одиницях сталої Планка \hbar , тобто величини $\vec{\hat{S}}, \vec{\hat{s}}_1, \vec{\hat{s}}_2$ вважатимемо безрозмірними.

Під скороченим виразом (2.1), яким ми будемо користуватися надалі, в дійсності слід розуміти оператор

$$\vec{\hat{S}} = \vec{\hat{s}}_1 \otimes \hat{I}_2 + \hat{I}_1 \otimes \vec{\hat{s}}_2, \quad (2.2)$$

де кожний із доданків суми представлено у вигляді тензорного добутку оператора спіну однієї частинки та одиничного оператора \hat{I} , визначеного у спіновому просторі іншої частинки. Така форма запису наочно показує, що кожний із доданків являє собою оператор, визначений у 4-вимірному спіновому просторі.

Праві частини виразів (2.1) та (2.2) можна переписати через матриці

Паулі:

$$\begin{aligned}\hat{\vec{S}} &= \frac{1}{2} \left(\hat{\vec{\sigma}}_1 + \hat{\vec{\sigma}}_2 \right), \text{ або} \\ \hat{\vec{S}} &= \frac{1}{2} \left(\hat{\vec{\sigma}}_1 \otimes \hat{I}_2 + \hat{I}_1 \otimes \hat{\vec{\sigma}}_2 \right).\end{aligned}\tag{2.3}$$

В якості базисних векторів у двочастинковому спіновому просторі можна обрати тензорні добутки векторів станів окремих частинок

$$|\chi_{12}\rangle \equiv |\mu\rangle_1 \otimes |\nu\rangle_2, \quad \mu = \pm \frac{1}{2}, \quad \nu = \pm \frac{1}{2}.\tag{2.4}$$

Надалі, де це не призводитиме до непорозумінь, індекси, що вказують на номери частинок, будемо опускати:

$$|\chi_{12}\rangle = |\mu\rangle \otimes |\nu\rangle = |\mu\nu\rangle.\tag{2.5}$$

З ортогональності та нормованості станів $|\mu\rangle$ та $|\nu\rangle$ випливає ортонормованість станів $|\mu\nu\rangle$:

$$\langle \mu\nu | \mu'\nu' \rangle = \delta_{\mu\mu'} \delta_{\nu\nu'}.\tag{2.6}$$

Кожний із чотирьох базисних станів (2.5) є власним станом системи операторів $\left\{ \hat{s}_1^2, \hat{s}_2^2, \hat{s}_{1z}, \hat{s}_{2z} \right\}$

$$\begin{aligned}\hat{s}_1^2 |\mu\nu\rangle &= s_1(s_1 + 1) |\mu\nu\rangle = \frac{3}{4} |\mu\nu\rangle \\ \hat{s}_2^2 |\mu\nu\rangle &= s_2(s_2 + 1) |\mu\nu\rangle = \frac{3}{4} |\mu\nu\rangle \\ \hat{s}_{1z} |\mu\nu\rangle &= \mu |\mu\nu\rangle \\ \hat{s}_{2z} |\mu\nu\rangle &= \nu |\mu\nu\rangle\end{aligned}\tag{2.7}$$

або, що те ж саме, системи операторів $\left\{ \hat{\vec{\sigma}}_1^2, \hat{\vec{\sigma}}_2^2, \hat{\sigma}_{1z}, \hat{\sigma}_{2z} \right\}$

$$\begin{aligned}\hat{\vec{\sigma}}_1^2 |\mu\nu\rangle &= 3 |\mu\nu\rangle \\ \hat{\vec{\sigma}}_2^2 |\mu\nu\rangle &= 3 |\mu\nu\rangle \\ \hat{\sigma}_{1z} |\mu\nu\rangle &= 2\mu |\mu\nu\rangle \\ \hat{\sigma}_{2z} |\mu\nu\rangle &= 2\nu |\mu\nu\rangle.\end{aligned}\tag{2.8}$$

Замість базисних станів $\{|\mu\nu\rangle\}$ у тому ж самому просторі можна обрати нескінченну множину інших базисів — комплектів з 4-х ортонормованих векторів. На практиці часто застосовується базис $\{|SM\rangle\}$, що складається з власних станів оператора квадрату повного спіну двочастинкової системи, та оператора проекції повного моменту на вісь Oz

$$\begin{aligned}\hat{S}^2 |SM\rangle &= S(S+1) |SM\rangle = \begin{cases} 2 |SM\rangle, & S = 1 \\ 0, & S = 0 \end{cases} \\ \hat{S}_z |SM\rangle &= M |SM\rangle.\end{aligned}\quad (2.9)$$

Три стани з $S = 1$ виражаються через стани $\{|\mu\nu\rangle\}$ як

$$\begin{cases} |S = 1, M = 1\rangle = \left|\frac{1}{2}\right\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}\right\rangle \\ |S = 1, M = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left|\frac{1}{2}\right\rangle \otimes \left|-\frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}\right\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}\right\rangle \right) \\ |S = 1, M = -1\rangle = \left|-\frac{1}{2}\right\rangle \otimes \left|-\frac{1}{2}\right\rangle \end{cases} \quad (2.10)$$

та утворюють т.зв. “триплет”, а четвертий стан

$$|S = 0, M = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left|\frac{1}{2}\right\rangle \otimes \left|-\frac{1}{2}\right\rangle - \left|-\frac{1}{2}\right\rangle \otimes \left|\frac{1}{2}\right\rangle \right) \quad (2.11)$$

має назву “синглет”.

Звичайно, стани $|SM\rangle$ є також власними станами операторів \hat{s}_1^2 та \hat{s}_2^2 :

$$\begin{aligned}\hat{s}_1^2 |SM\rangle &= s_1(s_1+1) |SM\rangle = \frac{3}{4} |SM\rangle \\ \hat{s}_2^2 |SM\rangle &= s_2(s_2+1) |SM\rangle = \frac{3}{4} |SM\rangle.\end{aligned}\quad (2.12)$$

Вважаючи цей факт тривіальним, у подальших позначеннях станів, як правило, квантові числа s_1 і s_2 опускаємо.

Зауважимо, що відносно перестановки номерів частинок всі триплетні стани є симетричними, а синглетний — антисиметричним.

2.2 Оператори проектування на триплетні та синглетні стани

Оператори, що діють у двочастинковому спіновому просторі системи частинок з $s = 1/2$, завжди можна виразити через одиничні оператори та оператори (матриці) Паулі $\hat{\sigma}_1$ та $\hat{\sigma}_2$.

Як вже було відзначено вище, будь-який оператор, визначений у спіновому просторі системи частинок, зводиться до лінійного виразу відносно операторів Паулі кожної частинки. Зважаючи також на те, що проєкційний оператор \hat{P} є скалярним виразом (він не змінює природу об'єкта, на який діє), його можна представити у вигляді

$$\hat{P} = a\hat{I} + b\vec{\hat{\sigma}}_1 \cdot \vec{\hat{\sigma}}_2, \quad (2.13)$$

де $\hat{I} = \hat{I}_1 \otimes \hat{I}_2$ — одиничний оператор у 4-вимірному спіновому просторі, а $\vec{\hat{\sigma}}_1 \cdot \vec{\hat{\sigma}}_2$ визначається як

$$\vec{\hat{\sigma}}_1 \cdot \vec{\hat{\sigma}}_2 = \hat{\sigma}_{1x} \otimes \hat{\sigma}_{2x} + \hat{\sigma}_{1y} \otimes \hat{\sigma}_{2y} + \hat{\sigma}_{1z} \otimes \hat{\sigma}_{2z}.$$

Виразимо $\vec{\hat{\sigma}}_1 \cdot \vec{\hat{\sigma}}_2$ через оператор повного спіну $\vec{\hat{S}}$, скориставшись (2.1):

$$\begin{aligned} \vec{\hat{S}}^2 &= \vec{\hat{s}}_1^2 + \vec{\hat{s}}_2^2 + 2\vec{\hat{s}}_1 \cdot \vec{\hat{s}}_2 \\ \left| \begin{array}{l} \vec{\hat{s}}_1^2 \rightarrow s_1(s_1 + 1) \\ \vec{\hat{s}}_2^2 \rightarrow s_2(s_2 + 1) \end{array} \right| &\Rightarrow \quad = [s_1(s_1 + 1) + s_2(s_2 + 1)] + \frac{1}{2}\vec{\hat{\sigma}}_1 \cdot \vec{\hat{\sigma}}_2 \quad (2.14) \\ &= \frac{3}{2} + \frac{1}{2}\vec{\hat{\sigma}}_1 \cdot \vec{\hat{\sigma}}_2, \end{aligned}$$

звідки

$$\vec{\hat{\sigma}}_1 \cdot \vec{\hat{\sigma}}_2 = 2\vec{\hat{S}}^2 - 3\hat{I}. \quad (2.15)$$

Тоді:

$$\begin{aligned} \vec{\hat{\sigma}}_1 \cdot \vec{\hat{\sigma}}_2 |\chi_t\rangle &= \vec{\hat{\sigma}}_1 \cdot \vec{\hat{\sigma}}_2 |S = 1, M\rangle \\ &= \left(2\vec{\hat{S}}^2 - 3\hat{I} \right) |S = 1, M\rangle \\ &= [2S(S + 1) - 3] |S = 1, M\rangle \\ &= |S = 1, M\rangle \\ \vec{\hat{\sigma}}_1 \cdot \vec{\hat{\sigma}}_2 |\chi_s\rangle &= \vec{\hat{\sigma}}_1 \cdot \vec{\hat{\sigma}}_2 |S = 0, M = 0\rangle \\ &= (0 - 3) |S = 0, M = 0\rangle \\ &= -3 |S = 0, M = 0\rangle. \end{aligned}$$

Отже, триплетні стани є власними станами оператора $\vec{\hat{\sigma}}_1 \cdot \vec{\hat{\sigma}}_2$ із власним значенням “1”, а синглетний стан — власним вектором із власним значенням “−3”:

$$\begin{aligned} \vec{\hat{\sigma}}_1 \cdot \vec{\hat{\sigma}}_2 |\chi_t\rangle &= |\chi_t\rangle \\ \vec{\hat{\sigma}}_1 \cdot \vec{\hat{\sigma}}_2 |\chi_s\rangle &= -3 |\chi_s\rangle. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Тепер знайдемо коефіцієнти a і b (2.13) для оператора проектування на триплетні стани \hat{P}_t :

$$\begin{aligned} \begin{cases} \hat{P}_t |\chi_t\rangle = |\chi_t\rangle \\ \hat{P}_t |\chi_s\rangle = 0 \end{cases} &\Rightarrow \begin{cases} (a_t \hat{I} + b_t \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2) |\chi_t\rangle = |\chi_t\rangle \\ (a_t \hat{I} + b_t \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2) |\chi_s\rangle = 0 \end{cases} \\ &\Rightarrow \begin{cases} a_t + b_t = 1 \\ a_t - 3b_t = 0 \end{cases} \\ &\Rightarrow \begin{cases} a_t = \frac{3}{4} \\ b_t = \frac{1}{4}. \end{cases} \end{aligned}$$

Аналогічно отримуємо, що

$$\begin{cases} \hat{P}_s |\chi_t\rangle = 0 \\ \hat{P}_s |\chi_s\rangle = |\chi_s\rangle \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a_s = \frac{1}{4} \\ b_s = -\frac{1}{4}. \end{cases}$$

Отже, маємо явний вигляд операторів проектування на триплетні та на синглетний стани:

$$\begin{aligned} \hat{P}_t &= \frac{1}{4} \left(3\hat{I} + \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2 \right) = \frac{1}{2} \hat{S}^2 \\ \hat{P}_s &= \frac{1}{4} \left(\hat{I} - \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2 \right) = \hat{I} - \frac{1}{2} \hat{S}^2. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Оператори $\{\hat{P}_t, \hat{P}_s\}$ утворюють повну ортогональну систему проєктивних операторів:

$$\begin{cases} \hat{P}_t + \hat{P}_s = \hat{I} \\ \hat{P}_t \hat{P}_s = \hat{P}_s \hat{P}_t = 0. \end{cases} \quad (2.18)$$

Довільний двочастинковий спіновий стан можна представити у вигляді розкладу за триплетними і синглетними базисними станами:

$$\begin{aligned} |\chi\rangle &= \alpha |S=1, M=1\rangle + \beta |S=1, M=0\rangle \\ &\quad + \gamma |S=1, M=-1\rangle + \delta |S=0, M=0\rangle. \end{aligned}$$

Тоді:

$$\begin{aligned} \hat{P}_t |\chi\rangle &= \alpha |S=1, M=1\rangle + \beta |S=1, M=0\rangle + \gamma |S=1, M=-1\rangle \\ \hat{P}_s |\chi\rangle &= \delta |S=0, M=0\rangle, \end{aligned}$$

тобто оператор \hat{P}_t виділяє зі стану $|\chi\rangle$ частину в підпросторі триплетних станів, а \hat{P}_s — синглетну частину.

2.3 Базис Белла

У спіновому просторі системи двох частинок особливе місце займає так званий *базис Белла*, що складається з системи наступних ортонормованих векторів:

$$\begin{aligned} |\Phi^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \right) \\ |\Phi^-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2} \right\rangle - \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \right) \\ |\Psi^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2} \right\rangle \right) \\ |\Psi^-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| -\frac{1}{2} \right\rangle - \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2} \right\rangle \right). \end{aligned} \quad (2.19)$$

Стани Белла часто називають також ЕПР-парами, оскільки вони мають специфічні властивості, про які йдеться у “Парадоксі Ейнштейна-Подольського-Розена” (див. нижче).

Виявляється, що всі 4 стани Белла можна трактувати як власні вектори пари операторів, з яких один оператор — це оператор квадрату повного спіну системи \hat{S}^2 , а другий — оператор проекції повного спіну на вісь або Ox , або Oy , або Oz :

$$\begin{aligned} |\Phi^+\rangle &\equiv |S = 1, M_y = 0\rangle \\ |\Phi^-\rangle &\equiv |S = 1, M_x = 0\rangle \\ |\Psi^+\rangle &\equiv |S = 1, M_z = 0\rangle \\ |\Psi^-\rangle &\equiv |S = 0, M_x = 0\rangle \equiv |S = 0, M_y = 0\rangle \equiv |S = 0, M_z = 0\rangle. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Всі 4 стани Белла, як було зазначено вище, нормовані на 1 та взаємно ортогональні.

Система векторів станів Белла (2.20) інваріантна відносно перестановки індексів x, y, z . Повний базис розпадається на два підпростори відносно операції перестановки. До першого підпростору відносяться 3 стани з $S = 1$. Окремий підпростір утворює синглетний стан з $S = 0$.

Відносно перестановки індексів частинок стани $|\Phi^+\rangle$ та $|\Psi^+\rangle$ є симетричними, а стани $|\Phi^-\rangle$ та $|\Psi^-\rangle$ — антисиметричними.

Про деякі інші важливі властивості станів Белла мова піде нижче, у розділі “Заплутані стани”.

2.4 Класифікація станів систем довільного числа частинок зі спіном $s = 1/2$

Повний ортогональний базис системи n частинок зі спіном $s = 1/2$ налічує $N = 2^n$ векторів станів.

У найпростішому такому базисі n -частинкові базисні стани представляються у вигляді тензорного добутку одночастинкових спінових станів із певним значенням проекції спіну кожної частинки

$$|\chi_n\rangle \equiv |\mu_1\rangle \otimes |\mu_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\mu_n\rangle \equiv |\mu_1\mu_2\ldots\mu_n\rangle, \quad \mu_i = \pm\frac{1}{2}, \quad i = \overline{1, n}. \quad (2.21)$$

Базис, що складається з векторів (2.21), прийнято називати *стандар-тним* або *обчислювальним базисом*. Будь-який інший базис завжди можна представити з векторів у вигляді лінійної комбінації станів (2.21).

У різних розділах квантової фізики застосовуються базиси з певним значенням квантового числа S повного спіну системи n частинок

$$\vec{\hat{S}} = \vec{\hat{s}}_1 + \vec{\hat{s}}_2 + \cdots + \vec{\hat{s}}_n \quad (2.22)$$

та певним значенням проекції M повного спіну на вісь квантування (як правило, на вісь Oz). Такі стани є власними станами операторів $\vec{\hat{S}}^2$ та \hat{S}_z :

$$\begin{cases} \vec{\hat{S}}^2 |SM\rangle = S(S+1) |SM\rangle \\ \hat{S}_z |SM\rangle = M |SM\rangle. \end{cases} \quad (2.23)$$

Оскільки $|SM\rangle$ можна представити у вигляді лінійної комбінації векторів (2.21), то, очевидно, вони (стани $|SM\rangle$) є також власними станами сукупності операторів $\vec{\hat{s}}_i^2$, $i = \overline{1, n}$:

$$\begin{aligned} \vec{\hat{s}}_1^2 |SM\rangle &= s_1(s_1+1) |SM\rangle = \frac{3}{4} |SM\rangle \\ \vec{\hat{s}}_2^2 |SM\rangle &= s_2(s_2+1) |SM\rangle = \frac{3}{4} |SM\rangle \\ &\dots \\ \vec{\hat{s}}_n^2 |SM\rangle &= s_n(s_n+1) |SM\rangle = \frac{3}{4} |SM\rangle. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Зауважимо, що в загальному випадку у станах $|SM\rangle$ проекції спінів окремих частинок не мають певного значення.

Оскільки будь-які n -частинкові стани є власними станами операторів \hat{s}_i^2 з однаковими власними значеннями $s_i(s_i + 1) = \frac{3}{4}$, то, пам'ятаючи про це, надалі вказувати квантові числа s_1, s_2, \dots, s_n не будемо.

У випадку $n = 2$ квантових чисел S та M достатньо (див. (2.10) та (2.11)), щоб однозначно визначити всі вектори повного базису.

Однак, при $n > 2$ для однозначної ідентифікації станів необхідно залучати додаткові квантові числа. Вже при $n = 3$ пара чисел $\{(S, M)\}$ може приймати всього лиш 6 різних значень:

$$\{(S, M)\} = \left\{ \left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right), \left(\frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right), \left(\frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right), \left(\frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right), \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right), \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right) \right\},$$

в той час як число базисних векторів рівне $N = 2^3 = 8$. Зі зростанням числа частинок у системі відмінність між кількістю базисних станів $N = 2^n$ та кількістю можливих значень $\{(S, M)\}$ збільшується.

Для доповнення $\{(S, M)\}$ іншими квантовими числами до повного набору з метою однозначної ідентифікації всіх векторів повного базису системи n частинок можна застосувати наступну схему.

Спочатку будуємо всі можливі вектори станів першої пари частинок, що відповідають певному значенню сумарного спіну (стани $|S_{12}M_{12}\rangle$ зі значеннями $S_{12} = 1, M_{12} = \{1, 0, -1\}$; $S_{12} = 0, M_{12} = 0$). Потім, використовуючи правила додавання моментів імпульсу в квантовій механіці, до перших двох частинок додаємо третю частинку та за допомогою коефіцієнтів Клебша-Гордана отримуємо всі можливі стани зі значеннями повного спіну та його проекцій для системи трьох частинок

$$|S_{12}S_{123}M_{123}\rangle = \sum_{M_{12}, \mu_3} \langle S_{12}S_3M_{12}\mu_3 | S_{123}M_{123} \rangle |S_{12}M_{12}\rangle \otimes |\mu_3\rangle.$$

Якщо $n > 3$, то продовжимо процедуру приєднання до системи наступних частинок, і таким чином отримуємо всі можливі стани

$$|S_{12}S_{123} \dots S_{12\dots n-1}SM\rangle, \quad (2.25)$$

де S — квантове число повного спіну системи n частинок, а M — його проекція.

Квантові числа $S_{12}, S_{123}, \dots, S$ в (2.25) приймають всі можливі значення, що допускаються правилами додавання моментів імпульсу, а проекція M для кожного S може приймати $2S + 1$ різних значень в інтервалі $-S \leq M \leq S$.

Наведений спосіб побудови повного базису для спінових станів системи n частинок з певним значенням сумарного спіну S і його проекції M

2.4. Класифікація станів систем довільного числа частинок зі спіном $S = 1/2$

не є єдиним можливим. Можна, наприклад, n частинок розбити на дві підсистеми з числом частинок n_1 і n_2 ($n_1 + n_2 = n$), і зазначеним вище способом побудувати стани для кожної підсистеми, а потім, за правилами додавання моментів імпульсу, побудувати всі стани об'єднаної системи з певними значеннями квантових чисел S та M . При достатньо великих значеннях n_1 і n_2 відповідні підсистеми частинок можна також, у свою чергу, розбити на підсистеми.

За будь-якого зі вказаних способів побудови базису у спіновому просторі системи n частинок завжди отримується рівно $N = 2^n$ ортонормованих векторів. Звичайно, базиси, отримані різними способами, відрізнятимуться один від одного. Однак, оскільки вектори кожного з цих базисів утворюють *повну систему* в n -частинковому спіновому просторі, то довільний стан $|\chi\rangle$ з цього простору можна розкласти в ряд за довільно обраним таким базисом. У свою чергу, кожний базисний стан (а, отже, і стан $|\chi\rangle$) можна представити у вигляді лінійної комбінації станів (2.21) стандартного обчислювального базису.

В якості прикладу наведемо схему побудови базисних станів із певним значенням повного спіну S і його проекції M для системи з чотирьох частинок ($n = 4$), див. Табл. 2.1.

Як видно з таблиці, згідно наведених схем можна побудувати два окремих альтернативних базиси, кожний з яких налічує систему з 16 ортонормованих векторів:

| Схема 1 | Схема 2 | |
|--|---|--------|
| $\{ S_{12}S_{123}SM\rangle\} :$ | $\{ S_{12}S_{34}SM\rangle\} :$ | |
| $\left 0\frac{1}{2}00\right\rangle$ | $ 0000\rangle$ | |
| $\left 0\frac{1}{2}1M\right\rangle, M = \{1, 0, -1\}$ | $ 011M\rangle, M = \{1, 0, -1\}$ | |
| $\left 1\frac{1}{2}00\right\rangle$ | $ 101M\rangle, M = \{1, 0, -1\}$ | (2.26) |
| $\left 1\frac{1}{2}1M\right\rangle, M = \{1, 0, -1\}$ | $ 1100\rangle$ | |
| $\left 1\frac{3}{2}1M\right\rangle, M = \{1, 0, -1\}$ | $ 111M\rangle, M = \{1, 0, -1\}$ | |
| $\left 1\frac{3}{2}2M\right\rangle, M = \{2, 1, 0, -1, -2\}$ | $ 112M\rangle, M = \{2, 1, 0, -1, -2\}$ | |

Кожний базисний вектор окремого базису відрізняється від інших 15 векторів значенням принаймні одного квантового числа. Отже, значення

Табл. 2.1: Схема побудови базису для системи з чотирьох частинок ($n = 4$)

Схема 1

| S_{12} | S_{123} | S | M |
|----------|---------------|-----|-----|
| 0 | $\frac{1}{2}$ | 0 | 0 |
| | | 1 | 1 |
| | | | 0 |
| | | | -1 |
| 1 | $\frac{1}{2}$ | 0 | 0 |
| | | 1 | 1 |
| | | | 0 |
| | | | -1 |
| | $\frac{3}{2}$ | 2 | 2 |
| | | | 1 |
| | | | 0 |
| | | | -1 |
| | | 1 | 1 |
| | | | 0 |
| | | | -1 |
| | | | -1 |

Схема 2

| S_{12} | S_{34} | S | M |
|----------|----------|-----|-----|
| 0 | 0 | 0 | 0 |
| | 1 | 1 | 1 |
| | | | 0 |
| | | | -1 |
| 1 | 0 | 1 | 1 |
| | | | 0 |
| | | | -1 |
| | 1 | 2 | 2 |
| | | | 1 |
| | | | 0 |
| | | | -1 |
| | | | -2 |
| | | 1 | 1 |
| | | | 0 |
| | | | -1 |
| | | 0 | 0 |

2.4. Класифікація станів систем довільного числа частинок зі спіном $S = 1/2$

сукупності наведених квантових чисел однозначно ідентифікує вектори базису.

Кожний вектор базису можна представити у вигляді лінійної комбінації векторів стандартного (обчислювального) базису (2.21). Однак, цей процес являє собою значну одноманітну роботу, і для великих значень числа n числа частинок у системі її можна виконати лише за допомогою спеціалізованих комп'ютерних програм.

Розглянемо, наприклад, як виглядає стан $|S_{12}S_{34}SM\rangle \equiv |1100\rangle$, представлений у вигляді лінійної комбінації векторів стандартного базису (2.21). Для скорочення, тензорний добуток одночастинкових станів $|\mu_1\rangle \otimes |\mu_2\rangle \otimes |\mu_3\rangle \otimes |\mu_4\rangle$ позначатимемо у вигляді $|\mu_1\mu_2\mu_3\mu_4\rangle$. Врахуємо також, що

$$\begin{aligned}
 |S_{12}S_{34}SM\rangle &\equiv |1100\rangle \\
 &= \sum_{M_{12}=-1}^1 \langle 11M_{12}, -M_{12} | 00 \rangle |S_{12} = 1, M_{12}\rangle \\
 &\quad \otimes |S_{34} = 1, M_{34} = -M_{12}\rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(|S_{12} = 1, M_{12} = -1\rangle \otimes |S_{34} = 1, M_{34} = 1\rangle \right. \\
 &\quad \left. - |S_{12} = 1, M_{12} = 0\rangle \otimes |S_{34} = 1, M_{34} = 0\rangle \right. \\
 &\quad \left. + |S_{12} = 1, M_{12} = 1\rangle \otimes |S_{34} = 1, M_{34} = -1\rangle \right). \tag{2.27}
 \end{aligned}$$

Стани $|S_{ij} = 1, M_{ij} = \{1, 0, -1\}\rangle$ являють собою триплетні стани (2.10). Підставляючи їх вирази через добуток одночастинкових станів у (2.27), остаточно отримаємо:

$$\begin{aligned}
 |S_{12}S_{34}SM\rangle &\equiv |1100\rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left| -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle - \frac{1}{2\sqrt{3}} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\
 &\quad - \frac{1}{2\sqrt{3}} \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle - \frac{1}{2\sqrt{3}} \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\
 &\quad - \frac{1}{2\sqrt{3}} \left| -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle. \tag{2.28}
 \end{aligned}$$

Проста перевірка показує, що даний вектор стану нормований на 1.

2.5 Питання та задачі для самостійної роботи

1. Перевірити, чи дійсно система станів (2.20) тотожна системі станів Белла (2.19).
2. Враховуючи властивості матриць Паулі, безпосередньо перевірити взаємну ортогональність ($\hat{P}_t \hat{P}_s = 0$) операторів проектування на триплетні та синглетні стани.
3. Представити довільний стан $|S_{12}S_{34}SM\rangle$ з набору (2.26) у вигляді лінійної комбінації векторів стандартного базису та безпосередньо перевірити його ортогональність до вектора (2.28).
4. Двочастинкові оператори $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$ з (2.2) представити у вигляді матриць 4×4 .
5. Перевірити, чи задовольняють оператори проектування \hat{P}_t та \hat{P}_s у вигляді (2.17) основній властивості проєкційних операторів $\hat{P}^2 = \hat{P}$.

Розділ 3

Елементарні операції над кубітами

3.1 Однокубітові та багатокубітові квантові стани

У класичних обчисленнях елементарна одиниця інформації отримала назву “біт” (bit). У кожний момент часу біт може знаходитися в одному з двох фіксованих *станів*, які прийнято позначати символами “0” та “1”. На практиці під даними символами розуміють два взаємовиключні стани деякого реального фізичного об’єкту.

У квантових обчисленнях аналогом класичного біта є поняття “квантовий біт”, який зазвичай називають “кубіт” (quantum bit \Rightarrow qubit). Як і класичний біт, кубіт може існувати у двох альтернативних квантових станах $|0\rangle$ та $|1\rangle$, які ортогональні між собою та нормовані на одиницю:

$$\begin{aligned}\langle 0 | 0 \rangle &= \langle 1 | 1 \rangle = 1 \\ \langle 0 | 1 \rangle &= \langle 1 | 0 \rangle = 0.\end{aligned}\tag{3.1}$$

Принципова відмінність між бітом та кубітом полягає в тому, що кубіт може знаходитися не лише у базисних станах $|0\rangle$ та $|1\rangle$, але також у станах їх лінійної суперпозиції:

$$|\chi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle.\tag{3.2}$$

Параметри α та β в загальному випадку можуть бути комплексними числами, на які накладається єдине обмеження — умова нормування:

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1.\tag{3.3}$$

Фізична можливість реалізації станів (3.2) безпосередньо впливає з фундаментального положення квантової теорії, що має назву “принцип суперпозиції квантових станів”. Розгорнутий зміст цього принципу дається в наступних розділах.

Під назвою “кубіт” розуміють, в залежності від контексту, або безпосередньо квантовий стан (3.2), або фізичний елемент — носій даного стану. В якості таких носіїв для одного й того самого стану можуть виступати різноманітні об’єкти: фотон, нейтральний атом, іон, молекула деякої речовини тощо.

За базисні стани $|0\rangle$ та $|1\rangle$ у фотона можна прийняти два взаємно ортогональні стани його поляризації, у атома або іона — основний та один зі збуджених станів, у молекули — два різних стани коливальних збуджень.

Математичний апарат опису операцій над кубітами не залежить від їх конкретної фізичної реалізації. Тому можна ввести поняття “абстрактний кубіт”, як будь-якої дворівневої квантової системи. Стан абстрактного кубіту, як математичне поняття, описується вектором стану (хвильовою функцією) у двовимірному гільбертовому просторі. Але для наочного представлення кубітів та операцій над ними завжди можна прийняти деяку зручну конкретну фізичну модель. Оскільки в попередніх розділах було детально розглянуто саме спінові стани, то цілком логічно далі уявляти кубіт як спіновий стан частинки зі спіном $s = \frac{1}{2}$. З метою поєднання попередньо вживаних позначень із загальноприйнятими позначеннями у квантових обчисленнях та квантовій інформатиці відзначимо тотожність деяких виразів:

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2} \right\rangle &\equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv |0\rangle \\ \left| -\frac{1}{2} \right\rangle &\equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv |1\rangle, \end{aligned} \quad (3.4)$$

що для суперпозиції (3.2) дає

$$|\chi\rangle = \alpha \left| \frac{1}{2} \right\rangle + \beta \left| -\frac{1}{2} \right\rangle \equiv \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \equiv \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle. \quad (3.5)$$

Базисні вектори стандартного (обчислювального) базису n -кубітових систем представляються у вигляді тензорного добутку базисних станів окремих кубітів:

$$|\chi_j\rangle = |\mu_1\rangle \otimes |\mu_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\mu_n\rangle \equiv |\mu_1\mu_2\ldots\mu_n\rangle, \quad j = \overline{0, 2^n - 1}, \quad (3.6)$$

де кожне μ_i може приймати значення “0” або “1”, а індекс j позначає номер базисного стану.

Як правило, стани $|\chi_j\rangle$ впорядковують згідно зростання чисел, записаних двійковим кодом:

$$\begin{aligned} |\chi_0\rangle &= |00 \dots 00\rangle \\ |\chi_1\rangle &= |00 \dots 01\rangle \\ |\chi_2\rangle &= |00 \dots 10\rangle \\ &\dots \\ |\chi_{2^n-1}\rangle &= |11 \dots 11\rangle. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Базисні вектори можна також представити у вигляді векторів-стовпчиків. Наприклад, базис двокубітової системи має вигляд:

$$\begin{aligned} |00\rangle &\equiv |0\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ 0 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ |01\rangle &\equiv |0\rangle \otimes |1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ 0 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ |10\rangle &\equiv |1\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ 1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ |11\rangle &\equiv |1\rangle \otimes |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ 1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Будь-який стан $|\psi\rangle$ в n -кубітовому просторі можна представити у вигляді розкладу за базисом (3.6)

$$|\psi\rangle = \sum_{\mu_1 \mu_2 \dots \mu_n \in \{0;1\}^n} \alpha_{\mu_1 \mu_2 \dots \mu_n} |\mu_1 \mu_2 \dots \mu_n\rangle. \quad (3.9)$$

3.2 Квантові вентиля. Універсальний набір квантових вентилів

Формально кажучи, під квантовим обчисленням розуміють послідовне унітарне перетворення стану кубітів регістру квантового комп'ютера та вимірювання проміжних і кінцевого станів регістру.

Операція вимірювання у квантовій механіці являє собою фундаментальне поняття, повний зміст якого буде розкрито далі, в окремому розділі. Проте ми сподіваємося, що читач ознайомлений із початковим курсом квантової механіки, що дозволяє йому зрозуміти прості операції з вимірювання, які зустрічатимуться в даному та наступних розділах.

Переходимо тепер до обговорення ролі унітарних перетворень у квантових обчисленнях.

Нагадаємо, що оператор \hat{U} називається унітарним, якщо він задовольняє умову

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{I} \quad \Leftrightarrow \quad \hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}. \quad (3.10)$$

Унітарне перетворення залишає незмінним скалярний добуток векторів

$$\langle \hat{U}\psi | \hat{U}\phi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle$$

і, зокрема, не змінює норму векторів стану:

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

що дозволяє говорити про унітарне перетворення як про поворот вектора у гільбертовому просторі.

Прийнято вважати, що над станами системи кубітів можна здійснити будь-яку унітарну операцію. Але слід пам'ятати, що у квантовому комп'ютері таку операцію виконуватиме деякий *реальний фізичний пристрій*. Очевидно, що створити їх окремо для кожної можливої унітарної операції на практиці неможливо: для цього потрібно мати незлічену множину таких пристроїв.

Як вихід, була прийнята концепція, за якою довільну унітарну операцію над системою кубітів можна було б реалізувати послідовним застосуванням елементарних операцій — *квантових вентилів* (quantum gates) з деякого фіксованого *скінченного* набору.

Означення. Множина елементів має назву “універсальний набір квантових вентилів”, якщо для будь-якого $n \geq 1$ довільний n -кубітовий унітарний оператор можна апроксимувати із наперед визначеною точністю квантовою схемою, побудованою лише на елементах з даної множини.

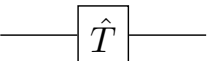
Звичайно, універсальний набір можна укомплектувати різними способами. Отже, пошук *оптимального* набору для певного класу задач містить у собі творчу складову.

Квантові вентиля позначаються на квантових схемах деякими літерами. Окремі елементи з'єднуються на схемі лініями — *дротами*.

3.2.1 Однокубітові квантові логічні елементи

Універсальний набір, насамперед, повинен включати в себе всі необхідні квантові вентиля, що забезпечують можливість виконання будь-якої унітарної операції над окремими кубітами. Загальноприйняті приклади таких однокубітових вентилів приведені у Таблиці 3.1.

Табл. 3.1: Однокубітові логічні вентиля

| Назва вентиля | Позначення на схемі | Матричне представлення вентиля |
|---------------------------|---|--|
| Вентиль Паулі \hat{X} |  | $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ |
| Вентиль Паулі \hat{Y} |  | $\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ |
| Вентиль Паулі \hat{Z} |  | $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ |
| Вентиль Адамара \hat{H} |  | $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ |
| Фазовий вентиль \hat{S} |  | $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$ |
| Вентиль $\frac{\pi}{8}$ |  | $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/8} \end{pmatrix}$ |

Всі ці вентиля є унітарними операторами, визначеними у гільбертовому просторі станів окремих кубітів. Перші три вентиля, очевидно, співпадають з операторами (матрицями) Паулі

$$\hat{X} \equiv \hat{\sigma}_x, \quad \hat{Y} \equiv \hat{\sigma}_y, \quad \hat{Z} \equiv \hat{\sigma}_z, \quad (3.11)$$

звідки й походять їх назви.

Вентиль \hat{X} часто називають також оператором *NOT*, оскільки він переводить базисний стан $|0\rangle$ в ортогональний до нього вектор $|1\rangle$ і нав-

паки:

$$\hat{X} |0\rangle = |1\rangle, \quad \hat{X} |1\rangle = |0\rangle. \quad (3.12)$$

Не слід, однак, вважати, що оператор NOT переводить будь-який вектор стану кубіта в ортогональний до нього вектор. Взагалі кажучи, не існує такого універсального *фіксованого* оператора, що пов'язує між собою два довільних ортогональних стани.

Вентилі $\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z}$ діють на довільний стан кубіта за правилами:

$$\begin{aligned} \hat{X}(\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle) &= \beta |0\rangle + \alpha |1\rangle \\ \hat{Y}(\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle) &= i(-\beta |0\rangle + \alpha |1\rangle) \\ \hat{Z}(\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle) &= \alpha |0\rangle - \beta |1\rangle. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Оператори $\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z}$ разом з одиничним оператором \hat{I} утворюють повний базис, за яким можна розкласти будь-який оператор \hat{U} , визначений у двовимірному гільбертовому просторі:

$$\hat{U} = \alpha \hat{I} + \beta \hat{X} + \gamma \hat{Y} + \delta \hat{Z}. \quad (3.14)$$

Оператор Адамара \hat{H} перетворює обчислювальний базис кубіта $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ у так званий *базис Адамара* $\{|+\rangle, |-\rangle\}$

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), \quad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle), \quad (3.15)$$

і навпаки.

Всі чотири квантові вентилі $\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z}, \hat{H}$ є не лише унітарними, але також і ермітовими операторами. Крім того, оскільки

$$\hat{X}^2 = \hat{Y}^2 = \hat{Z}^2 = \hat{H}^2 = \hat{I}, \quad (3.16)$$

то кожний із них співпадає зі своїм оберненим оператором, а власні значення даних операторів також однакові та рівні $\lambda_{1,2} = \pm 1$.

Однокубітовий фазовий вентиль \hat{S} змінює відносну фазу стану кубіта на величину $\Delta\phi = \frac{\pi}{2}$:

$$\hat{S}(\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle) = \alpha |0\rangle + i\beta |1\rangle = \alpha |0\rangle + e^{i\pi/2}\beta |1\rangle. \quad (3.17)$$

Квантовий вентиль \hat{T} змінює відносну фазу стану кубіта на величину $\Delta\phi = \frac{\pi}{8}$:

$$\hat{T}(\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle) = \alpha |0\rangle + e^{i\pi/8}\beta |1\rangle. \quad (3.18)$$

Наявність \hat{T} -оператора в універсальному наборі відіграє важливу роль, оскільки він сприяє досягненню заданої точності апроксимації потрібного в обчисленнях унітарного оператора.

Важливим оператором у квантових обчисленнях є також оператор повороту $\hat{R}_{\vec{n}}(\varphi)$, де \vec{n} — одиничний вектор ($|\vec{n}| = 1$), який визначає вісь повороту, а φ — кут повороту. У гільбертовому просторі векторів станів з певним значенням кутового моменту \vec{J} оператор повороту $\hat{R}_{\vec{n}}(\varphi)$ має вигляд

$$\hat{R}_{\vec{n}}(\varphi) = e^{-i\varphi\vec{n}\cdot\vec{J}} = \exp\left[-i\varphi\left(n_x\hat{J}_x + n_y\hat{J}_y + n_z\hat{J}_z\right)\right]. \quad (3.19)$$

Отже, в однокубітовому просторі (уявляємо його як спіновий простір станів частинки зі спіном $s = \frac{1}{2}$) оператор (3.19) представляється як

$$\begin{aligned} \hat{R}_{\vec{n}}(\varphi) &= e^{-i\varphi\vec{n}\cdot\vec{\sigma}} = \exp\left(-i\frac{\varphi}{2}\vec{n}\cdot\vec{\sigma}\right) \\ &= \exp\left[-i\frac{\varphi}{2}(n_x\hat{\sigma}_x + n_y\hat{\sigma}_y + n_z\hat{\sigma}_z)\right] \\ &= \exp\left[-i\frac{\varphi}{2}(n_x\hat{X} + n_y\hat{Y} + n_z\hat{Z})\right]. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Зокрема, оператори повороту навколо осей Ox, Oy, Oz на кут φ мають вигляд:

$$\begin{aligned} \hat{R}_x(\varphi) &= e^{-i\frac{\varphi}{2}\hat{X}} = \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right)\hat{I} - i\sin\left(\frac{\varphi}{2}\right)\hat{X} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\varphi}{2} & -i\sin\frac{\varphi}{2} \\ -i\sin\frac{\varphi}{2} & \cos\frac{\varphi}{2} \end{pmatrix} \\ \hat{R}_y(\varphi) &= e^{-i\frac{\varphi}{2}\hat{Y}} = \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right)\hat{I} - i\sin\left(\frac{\varphi}{2}\right)\hat{Y} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\varphi}{2} & -\sin\frac{\varphi}{2} \\ \sin\frac{\varphi}{2} & \cos\frac{\varphi}{2} \end{pmatrix} \\ \hat{R}_z(\varphi) &= e^{-i\frac{\varphi}{2}\hat{Z}} = \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right)\hat{I} - i\sin\left(\frac{\varphi}{2}\right)\hat{Z} = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\varphi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Звичайно, оператор повороту є унітарним оператором, а його визначник рівний 1.

Нагадаємо, що кожному вектору стану кубіта можна поставити у взаємно однозначну відповідність певну точку на поверхні сфери Блоха. Отже, поворот кубіта можна уявляти як переміщення точки на поверхні сфери одиничного радіусу.

Виявляється, що будь-який поворот є тотожним послідовним поворотам на певні кути навколо двох *фіксованих* осей, що перетинаються у центрі сфери Блоха. Наприклад, операцію $\hat{R}_{\vec{n}}(\varphi)$ можна представити як сукупність поворотів навколо осей Oz та Oy (ZY -розклад):

$$\hat{R}_{\vec{n}}(\varphi) = e^{i\alpha}\hat{R}_z(\beta)\hat{R}_y(\gamma)\hat{R}_z(\delta) \quad (3.22)$$

Послідовність дій у правій частині (3.22) слід виконувати справа наліво. Зв'язок між параметрами повороту у лівій та правій частинах (3.22) легко встановити, якщо їх представити у матричній формі та поелементно порівняти матриці.

Зауважимо, що сам поворот, з одного боку, є операцією у тривимірному евклідовому просторі, а з іншого — він представляється унітарною матрицею у двовимірному гільбертовому просторі. Загальне унітарне перетворення у просторі станів кубіта можна параметризувати наступною унітарною матрицею \hat{U} розмірності 2×2 :

$$\hat{U} = e^{i\alpha} \begin{pmatrix} ae^{-iu} & -be^{iv} \\ be^{-iv} & ae^{iu} \end{pmatrix}, \quad (3.23)$$

де α, a, b, u, v — дійсні величини, причому $a^2 + b^2 = 1$. Порівнюючи (3.23) з (3.22), представленим у матричній формі (3.21), можна легко встановити зв'язок між параметрами двох представлень одного й того ж самого перетворення:

$$\begin{aligned} \beta &= u - v & \gamma &= 2 \arctan \frac{b}{a} & \delta &= u + v \\ a &= \cos \frac{\gamma}{2} & b &= \sin \frac{\gamma}{2} & u &= \frac{\delta + \beta}{2} & v &= \frac{\delta - \beta}{2}. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Доведення співвідношень (3.24) пропонуємо читачеві виконати самостійно.

3.2.2 Унітарні операції над багатокубітовими квантовими системами

Перейдемо тепер до унітарних перетворень багатокубітових систем. Але спочатку зробимо декілька пояснень, що стосуються не лише кубітів, а й довільних квантових систем.

Якщо дві системи, стани яких описуються у гільбертових просторах H_1 та H_2 , розглядаються як одна об'єднана система, то простір станів H об'єднаної системи є результатом тензорного добутку просторів підсистем:

$$H = H_1 \otimes H_2. \quad (3.25)$$

Розмірність простору H дорівнює $N = n_1 n_2$, де n_1 та n_2 — розмірності просторів H_1 та H_2 відповідно.

Якщо деякий стан першої системи описується вектором $|\varphi_1\rangle$, а другої — вектором $|\varphi_2\rangle$, то стан об'єднаної системи є тензорний добуток

$$|\psi\rangle = |\varphi_1\rangle \otimes |\varphi_2\rangle. \quad (3.26)$$

Так само, методом індукції, можна об'єднати n окремих квантових підсистем в одну систему:

$$\begin{aligned} H &= H_1 \otimes H_2 \otimes \cdots \otimes H_n \\ |\psi\rangle &= |\varphi_1\rangle \otimes |\varphi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\varphi_n\rangle. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Якщо на стани кожної підсистеми діють оператори $\hat{U}_1, \hat{U}_2, \dots, \hat{U}_n$, то перетворення об'єднаної системи відбувається під дією оператора

$$\begin{aligned} \hat{U} &= \hat{U}_1 \otimes \hat{U}_2 \otimes \cdots \otimes \hat{U}_n \\ |\psi'\rangle &= \hat{U} |\psi\rangle = \hat{U}_1 |\varphi_1\rangle \otimes \hat{U}_2 |\varphi_2\rangle \otimes \cdots \otimes \hat{U}_n |\varphi_n\rangle. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Слід, однак, відзначити, що існують стани об'єднаної системи, які не можна представити у вигляді тензорного добутку станів окремих підсистем (3.27). В такому разі кажуть, що стани підсистем *заплутані* (entangled states). Незаплутані стани, тобто ті, які представляються у вигляді тензорного добутку (3.27) станів окремих підсистем, мають назву “сепарабельні стани” (separable states). Отже, щодо термінології:

- заплутані стани \equiv несепарабельні стани
- сепарабельні стани \equiv незаплутані стани.

Поняттю заплутаності та властивостям заплутаних станів далі буде присвячено окремий розділ.

Подібно тому, як існують квантові стани, які не можна представити у вигляді добутку станів окремих підсистем, існують також оператори, які не можна представити у вигляді тензорних добутків операторів, що діють на окремі підсистеми.

Тепер від загальних квантових станів знову повернемося до систем, що складаються з кубітів.

Означення. *Двокубітовий логічний елемент (оператор) вважається заплутуючим, якщо для деякого сепарабельного стану $|\chi\rangle = |\chi_1\rangle \otimes |\chi_2\rangle$ на вході вентиля, вихід вентиля виявляється заплутаним.*

На квантові комп'ютери покладаються сподівання, що вони (комп'ютери) будуть здатні розв'язувати задачі, які не під силу навіть найпотіжнішим сучасним звичайним (не квантовим) суперкомп'ютерам. Число n кубітів регістру такого комп'ютера має досягати значення багатьох десятків, сотень, а може й тисяч одиниць. Розмірність простору станів

такого регістру рівна $N = 2^n$. Отже, оператори, що діють у такому просторі, повинні бути представлені матрицями розмірністю $2^n \times 2^n$. Як вже було зазначено вище, неможливо навіть уявити *реальні фізичні вентиля*, що відповідають таким операторам.

Означення. Множина елементів, що складається з усіх видів однокубітових вентилів і довільного двокубітового заплутуючого оператора, утворює універсальну множину квантових елементів.

Вище було зазначено, що довільний однокубітовий вентиль можна з будь-якою точністю апроксимувати добутком скінченного числа операторів з фіксованого набору однокубітових вентилів. Отже, якщо до цих операторів додати ще один двокубітовий заплутуючий елемент, то отримаємо скінченну сукупність квантових операторів, за допомогою яких можна виконати будь-яку унітарну операцію у просторі станів n кубітів.

Серед двокубітових заплутаних вентилів найбільш перспективним, у сенсі його реального фізичного створення, виявився оператор, що має назву “кероване *NOT*” (controlled *NOT*), який часто позначають \widehat{CNOT} або ж *CNOT*. Незалежно від числа кубітів $n \geq 2$ у системі, задіяними в операції *CNOT* завжди є лише два кубіти, номери яких позначаються індексами біля вентиля: $CNOT_{ij}$. Один із задіяних кубітів, вказаний першим (під номером “ i ”), називають *керуючим* (control) кубітом, а другий (під номером “ j ”) — *керованим* (target) кубітом.

Дія оператора \widehat{CNOT}_{ij} полягає в наступному. Якщо керуючий кубіт знаходиться у стані $|0\rangle$, то стан керованого кубіта не змінюється. Якщо ж керуючий кубіт перебуває у стані $|1\rangle$, то стан керованого кубіта змінюється на протилежний (в обчислювальному базисі), тобто $|0\rangle$ переходить у $|1\rangle$, а $|1\rangle$ — у $|0\rangle$. Отже, в залежності від стану керуючого кубіту, над керованим кубітом не виконується або ж виконується операція *NOT*. При цьому стан керуючого кубіта ніколи не змінюється. Зокрема, застосування \widehat{CNOT}_{12} до двокубітового базису призводить до наступних перетворень векторів:

$$|00\rangle \rightarrow |00\rangle \quad |01\rangle \rightarrow |01\rangle \quad |10\rangle \rightarrow |11\rangle \quad |11\rangle \rightarrow |10\rangle. \quad (3.29)$$

В обчислювальному базисі оператор \widehat{CNOT} представляється матрицею

$$\widehat{CNOT}_{12} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.30)$$

а самі базисні стани представляються векторами-стовпчиками (3.8).

Наступний приклад показує, що \widehat{CNOT} дійсно є заплутуючим оператором:

$$\begin{aligned} \widehat{CNOT}_{12} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_1 + |1\rangle_2) \otimes |0\rangle_2 \right] &= \widehat{CNOT}_{12} \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |10\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |11\rangle), \end{aligned} \quad (3.31)$$

тобто він перетворює сепарабельний стан $|\chi_1\rangle \otimes |\chi_2\rangle$, де $|\chi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle)$, $|\chi_2\rangle = |0\rangle$, у заплутаний стан $|\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |11\rangle)$.

Оператор \widehat{CNOT} є лінійним унітарним ермітовим оператором, який співпадає зі своїм оберненим оператором. Отже, $(\widehat{CNOT})^2 = \hat{I}$.

На Рис. 3.1 представлено варіанти загальновживаних позначень оператора \widehat{CNOT}_{ij} на квантових схемах.



Рис. 3.1: Варіанти позначення вентиля $CNOT_{ij}$

Приведемо ще приклади застосування вентиля $CNOT$ до трикубітової системи:

$$\widehat{CNOT}_{13} \frac{1}{\sqrt{3}} (|001\rangle + |100\rangle + |111\rangle) = \frac{1}{\sqrt{3}} (|001\rangle + |101\rangle + |110\rangle) \quad (3.32)$$

$$\widehat{CNOT}_{31} \frac{1}{\sqrt{3}} (|001\rangle + |100\rangle + |111\rangle) = \frac{1}{\sqrt{3}} (|101\rangle + |100\rangle + |011\rangle). \quad (3.33)$$

Виразу (3.32) на схемі відповідає Рис. 3.2а, а виразу (3.33) — Рис. 3.2б.

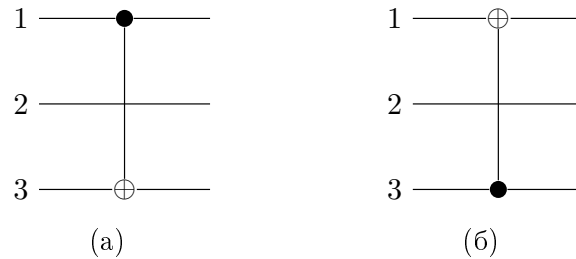


Рис. 3.2: Вентилі (а) $CNOT_{13}$ та (б) $CNOT_{31}$

Як бачимо з (3.32) та (3.33), результат дії $CNOT$ залежить від того, який кубіт є керуючим.

Узагальненням оператора \widehat{CNOT}_{ij} є оператор, зображений на Рис. 3.3. Зміст даної операції полягає в наступному. Якщо керуючий кубіт (i) знаходиться у стані $|0\rangle$, то над керованим кубітом (j) жодних дій не виконується. Якщо ж кубіт i перебуває в стані $|1\rangle$, то над кубітом j виконується унітарна операція \hat{U} . В якості оператора \hat{U} на схемі вказується деяка конкретна унітарна операція (наприклад, $\hat{U} \rightarrow \hat{Z}$ або $\hat{U} \rightarrow \hat{S}$).

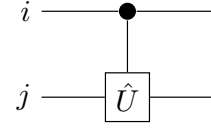


Рис. 3.3: Оператор контрольоване \hat{U}

Створення *реального фізичного* надійного вентиля $CNOT$, який із високою точністю виконував би свою функцію, є нетривіальною проблемою для фізиків-експериментаторів. Однак, зважаючи на велике значення даного елемента у квантових обчисленнях, над цією проблемою працюють у багатьох лабораторіях світу.

На квантових схемах можуть зустрічатися також вентиля, в яких задіяно більше двох кубітів. Наприклад, трикубітовий вентиль Тоффолі, який зображений на Рис. 3.4. Даний оператор функціонує наступним чином. Два кубіти (i та j) вважаються у ньому керуючими, а третій кубіт (k) — керованим. Якщо обидва керуючі кубіти знаходяться у стані $|1\rangle$, то стан керованого кубіта змінюється на протилежний ($|0\rangle_k \rightarrow |1\rangle_k$ та $|1\rangle_k \rightarrow |0\rangle_k$). Якщо ж хоча б один із двох керуючих кубітів знаходиться у стані $|0\rangle$, то ніякі дії за даною схемою не виконуються. Вентиль Тоффолі змінює базисні стани трикубітового обчислювального базису за наступними правилами:

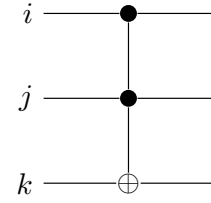


Рис. 3.4: Логічний вентиль Тоффолі

$$\begin{array}{ll}
 |000\rangle \rightarrow |000\rangle & |100\rangle \rightarrow |100\rangle \\
 |001\rangle \rightarrow |001\rangle & |101\rangle \rightarrow |101\rangle \\
 |010\rangle \rightarrow |010\rangle & |110\rangle \rightarrow |111\rangle \\
 |011\rangle \rightarrow |011\rangle & |111\rangle \rightarrow |110\rangle.
 \end{array} \tag{3.34}$$

Трикубітовий вентиль Фредкіна, який зображений на Рис. 3.5, виконує функцію, що має назву “керований обмін” ($CSWAP$). Суть даного вентиля полягає в наступному: якщо керуючий кубіт (i) перебуває у стані $|1\rangle$, то керовані кубіти (j та k) обмінюються станами. Якщо ж керуючий кубіт знаходиться у стані $|0\rangle$, то ніякі дії не відбуваються. Зміна

базисних векторів трикубітового обчислювального базису внаслідок дії вентиля Фредкіна відбувається за правилами:

$$\begin{aligned}
 |000\rangle &\rightarrow |000\rangle & |100\rangle &\rightarrow |100\rangle \\
 |001\rangle &\rightarrow |001\rangle & |101\rangle &\rightarrow |110\rangle \\
 |010\rangle &\rightarrow |010\rangle & |110\rangle &\rightarrow |101\rangle \\
 |011\rangle &\rightarrow |011\rangle & |111\rangle &\rightarrow |111\rangle.
 \end{aligned} \tag{3.35}$$

Очевидно, що функції операцій Тоффолі та Фредкіна можна також виконати, використовуючи універсальний набір квантових вентилів, який складається лише з однокубітових вентилів і одного заплутуючого двокубітового квантового вентиля. Дане твердження впливає безпосередньо з самого означення універсального набору.

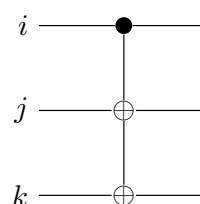


Рис. 3.5: Логічний вентиль Фредкіна *CSWAP*

3.3 Питання та задачі для самостійної роботи

1. Виходячи з означення оператора повороту для однокубітового стану, отримати матричне представлення (3.21).
2. Знайти результат перетворення базису Адамара (3.15) в результаті повороту на кут $\varphi = \frac{\pi}{2}$ навколо осі, що задається одиничним вектором $\vec{n} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0\right)$.
3. Отримати співвідношення (3.24) для параметрів представлень (3.22) та (3.23) оператора повороту.
4. Представити базисні вектори обчислювального базису трикубітового регістру у вигляді векторів-стопчиків.
5. Знайти матричне представлення вентилів Тоффолі та Фредкіна в обчислювальному базисі.

Розділ 4

Заплутаність квантових систем

4.1 Ознаки заплутаності та сепарабельності КОМПОЗИТНИХ КВАНТОВИХ СИСТЕМ

Квантові системи, що складаються з двох або більшої кількості підсистем, і які надалі ми будемо називати “компонентними квантовими системами”, можуть знаходитися у станах, які прийнято називати *заплутаними*, або несепарабельними (entangled). Отже, термін “заплутаний стан” та “несепарабельний стан” слід вважати синонімами; аналогічно, синонімами є протилежні поняття “не заплутаний стан” та “сепарабельний стан”. В заплутаних станах існують суто квантові кореляції між ступенями вільності підсистем, які не мають аналогів у класичній фізиці.

Зміст заплутаних станів довгий час був темою численних дискусій. Проте згодом з’ясувалося, що заплутаність є ресурсом, який можна використовувати у практичних цілях (створення квантових комп’ютерів та надійних засобів зв’язку).

Означення заплутаного (несепарабельного) стану є доволі простим та наочним. Для чистих квантових станів, які описуються вектором стану $|\psi\rangle$ у гільбертовому просторі, та для змішаних станів, які описуються матрицею густини $\hat{\rho}$, дані поняття формуються окремо.

Чистий стан квантової системи, що складається з підсистем A, B, C, \dots , називається сепарабельним (не заплутаним), якщо вектор стану $|\psi\rangle$ композитної системи можна представити у вигляді тензорного добутку векторів станів окремих підсистем:

$$|\psi\rangle = |\psi^A\rangle \otimes |\psi^B\rangle \otimes |\psi^C\rangle \otimes \dots \quad (4.1)$$

Стани, які не можна представити у вигляді (4.1), називаються заплутаними, або несепарабельними. Термін “сепарабельність” походить від ан-

глійського слова “separable”, тобто такий, що може бути відокремленим. Дійсно, в сепарабельному стані кожна підсистема зберігає свою ідентичність, описується своїм вектором стану, і в чистому композитному стані залишається чистим станом.

За означенням, змішаний стан композитної системи називається сепарабельним, якщо його матрицю густини можна представити у вигляді суміші тензорних добутоків матриць густини підсистем:

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i \hat{\rho}_i^A \otimes \hat{\rho}_i^B \otimes \hat{\rho}_i^C \otimes \dots, \quad (4.2)$$

де $\{p_i\}$ — набір додатніх чисел, таких, що $0 \leq p_i \leq 1$, $\sum_i p_i = 1$. Змішані стани, матрицю густини яких не можна представити у вигляді (4.2), називаються заплутаними (несепарабельними) станами.

Властивостям заплутаності та застосуванню заплутаних станів в алгоритмах квантових обчислень і в квантовій криптографії в даному посібнику приділяється досить значна увага. А в даному розділі ми зосередимося саме на ознаках заплутаності та сепарабельності.

Справа в тому, що сформульовані вище прості означення понять заплутаності та сепарабельності квантових станів, взагалі кажучи, не дають простого способу визначити, чи є заданий стан $|\psi\rangle$ або $\hat{\rho}$ заплутаним. Якщо для простих двокомпонентних систем на сьогодні вже відомі способи виявлення заплутаності, то для багатоконпонентних (в тому числі, для найбільш цікавих з практичної точки зору), багатокубітових систем, взагалі кажучи, задача залишається не вирішеною. Про масштаби труднощів на цьому шляху можна скласти уявлення про те, що *проблема сепарабельності* в квантовій інформатиці розглядається як одна з окремих фундаментальних задач. Повне вирішення цієї проблеми означає знаходження таких практичних критеріїв, за якими можна встановити заплутаність або сепарабельність для будь-якого наперед заданого стану композитної системи. Проблема ускладнюється ще й тим, що в багатоконпонентних системах існують різні типи заплутаності. Отже, додатково виникає питання про їхню класифікацію.

Перейдемо тепер до розгляду відомих ознак заплутаності (несепарабельності) для деяких окремих квантових систем.

4.1.1 Ознака сепарабельності чистих двокубітових станів

Будь-який вектор стану двокубітової системи в обчислювальному базисі можна записати у вигляді

$$|\psi\rangle = \alpha |00\rangle + \beta |01\rangle + \gamma |10\rangle + \delta |11\rangle, \quad (4.3)$$

4.1. Ознаки заплутаності та сепарабельності композитних квантових систем 67

з умовою нормування $|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\gamma|^2 + |\delta|^2 = 1$.

Ознака сепарабельності: будь-який двокубітовий стан (4.3) є сепарабельним тоді і тільки тоді, якщо виконується наступна рівність

$$\alpha\delta = \beta\gamma. \quad (4.4)$$

Доведення. Припустимо, що стан (4.3) є сепарабельним. Тоді його можна представити у вигляді тензорного добутку станів окремих кубітів:

$$|\psi\rangle = (\alpha_1 |0\rangle + \beta_1 |1\rangle) \otimes (\alpha_2 |0\rangle + \beta_2 |1\rangle) \quad (4.5)$$

з умовою нормування $|\alpha_1|^2 + |\beta_1|^2 = 1$, $|\alpha_2|^2 + |\beta_2|^2 = 1$.

В результаті почленного перемножування виразів у дужках отримаємо:

$$|\psi\rangle = \alpha_1\alpha_2 |00\rangle + \alpha_1\beta_2 |01\rangle + \beta_1\alpha_2 |10\rangle + \beta_1\beta_2 |11\rangle. \quad (4.6)$$

Порівнюючи (4.6) з (4.3), знаходимо:

$$\alpha = \alpha_1\alpha_2, \quad \beta = \alpha_1\beta_2, \quad \gamma = \beta_1\alpha_2, \quad \delta = \beta_1\beta_2.$$

З даних рівностей отримуємо $\alpha\delta = \alpha_1\alpha_2\beta_1\beta_2$, $\beta\gamma = \alpha_1\beta_2\beta_1\alpha_2 = \alpha_1\alpha_2\beta_1\beta_2$, звідки випливає (4.4).

Висновок 1. Якщо стан (4.3) сепарабельний, то завжди має місце рівність (4.4).

Тепер поставимо обернене питання: Нехай для стану (4.3) має місце рівність (4.4). Чи випливає з цього, що стан (4.3) є сепарабельним?

Наслідком рівності (4.4) є співвідношення

$$\frac{\beta}{\alpha} = \frac{\delta}{\gamma} = k \quad \Rightarrow \quad \beta = \alpha k, \quad \delta = \gamma k.$$

Тоді (4.3) можна переписати у вигляді

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \alpha |00\rangle + \alpha k |01\rangle + \gamma |10\rangle + \gamma k |11\rangle \\ &= (\alpha |0\rangle + \gamma |1\rangle) \otimes (|0\rangle + k |1\rangle) \quad \Rightarrow \quad \text{стан сепарабельний.} \end{aligned}$$

Висновок 2. Якщо має місце рівність (4.4), то стан (4.3) — сепарабельний.

Висновки 1 і 2 разом підтверджують ознаку сепарабельності, сформульовану вище. \square

Спираючись на ознаку сепарабельності двокубітових станів, можна легко переконатися в тому, що всі 4 стани Белла є несепарабельними

(заплутаними):

$$\begin{aligned}
 |\Psi^-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle - |10\rangle) \Rightarrow \alpha = \delta = 0, \quad \beta = -\gamma = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow \alpha\delta \neq \beta\gamma \\
 |\Psi^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle + |10\rangle) \Rightarrow \alpha = \delta = 0, \quad \beta = \gamma = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow \alpha\delta \neq \beta\gamma \\
 |\Phi^-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle - |11\rangle) \Rightarrow \alpha = -\delta = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \beta = \gamma = 0 \Rightarrow \alpha\delta \neq \beta\gamma \\
 |\Phi^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |11\rangle) \Rightarrow \alpha = \delta = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \beta = \gamma = 0 \Rightarrow \alpha\delta \neq \beta\gamma
 \end{aligned}$$

Задача. Гамільтоніан диполь-дипольної магнітної взаємодії системи двох частинок зі спіном $s = \frac{1}{2}$ можна представити у вигляді

$$\hat{H} = \frac{a}{r^3} \left(\hat{\vec{\sigma}}^A \otimes \hat{\vec{\sigma}}^B - 3\hat{\sigma}_z^A \otimes \hat{\sigma}_z^B \right),$$

де символи A та B позначають взаємодіючі частинки, $\hat{\sigma}_i$ — матриці Паулі, r — відстань між частинками.

Визначити, які з власних векторів даного гамільтоніану є заплутаними.

Розв'язок. Враховуючи явний вигляд матриць Паулі, гамільтоніан \hat{H} можна представити у матричній формі

$$\hat{H} = \frac{a}{r^3} \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}.$$

Власні вектори та власні значення гамільтоніана \hat{H} є розв'язком звичайного рівняння Шредінгера

$$\hat{H} |\chi\rangle = \lambda' |\chi\rangle. \quad (4.7)$$

Оскільки гамільтоніан заданий у формі матриці, то власні вектори слід шукати у вигляді вектора-стовпчика

$$|\chi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \\ \delta \end{pmatrix}.$$

Вважаючи відстань між частинками параметром, покладемо $\lambda' = \frac{a}{r^3} \lambda$, де λ — безрозмірне власне значення. Тоді рівняння (4.7) набуває вигляду

$$\begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \\ \delta \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \\ \delta \end{pmatrix}. \quad (4.8)$$

4.1. Ознаки заплутаності та сепарабельності композитних квантових систем 69

Розв'язавши рівняння (4.8), знаходимо власні значення λ_i та відповідні ортонормовані власні вектори $|\chi_i\rangle$:

$$\begin{aligned}\lambda_1 = 4 & \Rightarrow |\chi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle + |10\rangle), \\ \lambda_2 = 0 & \Rightarrow |\chi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle - |10\rangle), \\ \lambda_3 = -2 & \Rightarrow |\chi_3\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |00\rangle, \\ \lambda_4 = -2 & \Rightarrow |\chi_4\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |11\rangle.\end{aligned}$$

За критерієм сепарабельності (4.4) встановлюємо, що стани $|\chi_1\rangle$ та $|\chi_2\rangle$ є заплутаними, в той час як $|\chi_3\rangle$ та $|\chi_4\rangle$ — сепарабельними.

Зауваження. Оскільки власне значення $\lambda = -2$ є виродженим, то відповідні власні вектори встановлюються неоднозначно. Замість $|\chi_3\rangle$ і $|\chi_4\rangle$ в якості власних векторів гамільтоніана \hat{H} можна прийняти

$$\begin{aligned}|\chi'_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\chi_3\rangle + |\chi_4\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |11\rangle), \\ |\chi'_4\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\chi_3\rangle - |\chi_4\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle - |11\rangle),\end{aligned}$$

тоді всі чотири власних вектори гамільтоніана \hat{H} будуть заплутаними. Зазначимо, що сукупність векторів $|\chi_1\rangle$, $|\chi_2\rangle$, $|\chi'_3\rangle$, $|\chi'_4\rangle$ утворюють відомий базис Белла.

Перейдемо тепер до ознаки заплутаності двокомпонентних квантових систем довільної розмірності.

4.1.2 Розклад Шмідта

Розглянемо квантову систему, що складається з двох підсистем A та B . Найпростішим прикладом такої системи є двокубітова система, кожний

окремий кубіт якої можна вважати підсистемою. Але в даному випадку мається на увазі більш загальний випадок: кожна з підсистем визначена в просторі довільної розмірності. Надалі будемо вважати, що підсистема A визначена в просторі розмірності m , а підсистема B — в просторі розмірності n .

Позначимо через H_A та H_B гільбертові простори відповідних підсистем. Тоді гільбертів простір об'єднаної квантової системи визначається як тензорний добуток гільбертових просторів підсистем:

$$H = H_A \otimes H_B. \quad (4.9)$$

Очевидно, розмірність простору об'єднаної системи має розмірність $N = mn$.

У кожному з підпросторів завжди можна обрати повний ортонормований базис, наприклад, $\{|\mu_i\rangle\}$, $i = \overline{1, m}$ для підсистеми A , та $\{|\nu_j\rangle\}$, $j = \overline{1, n}$ — для підсистеми B . Тоді в якості ортонормованого базису об'єднаної системи можна обрати тензорний добуток $\{|\mu_i\rangle \otimes |\nu_j\rangle\}$, $i = \overline{1, m}, j = \overline{1, n}$. Отже, довільний вектор стану $|\psi_{AB}\rangle$ композитної системи можна представити у вигляді лінійної суперпозиції таких базисних станів:

$$|\psi_{AB}\rangle = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n a_{ij} |\mu_i\rangle \otimes |\nu_j\rangle. \quad (4.10)$$

Очевидно, що максимальне число доданків у правій частині (4.10) рівне $N = mn$. Звідси видно, що дане число швидко зростає зі зростанням розмірностей просторів підсистем. Однак, виявляється, що спеціальним підбором ортонормованих базисів в H_A та H_B розклад станів $|\psi_{AB}\rangle$ за цим базисом суттєво спрощується у порівнянні з (4.10). Такий розклад має назву “розклад Шмідта”.

Теорема Шмідта. Якщо $|\psi_{AB}\rangle$ — вектор простору тензорного добутку $H_A \otimes H_B$, то існує такий ортонормований базис $\{\varphi_{i|A}\}$ підпростору H_A і ортонормований базис $\{\chi_{i|B}\}$ підпростору H_B , а також існують додатні числа $\{p_i\}$, що задовольняють співвідношенню

$$|\psi_{AB}\rangle = \sum_{i=1}^r \sqrt{p_i} |\varphi_{i|A}\rangle \otimes |\chi_{i|B}\rangle, \quad (4.11)$$

де r , що має назву *число Шмідта*, задовольняє умову

$$r \leq \min \{m, n\}. \quad (4.12)$$

Коефіцієнти $\sqrt{p_i}$ називаються коефіцієнтами Шмідта. Надалі, також, базиси $\{\varphi_{i|A}\}$ та $\{\chi_{i|B}\}$ будемо називати *базисом Шмідта*.

Порівняємо між собою розклади (4.10) та (4.11). Очевидно, що у розкладі Шмідта число доданків може бути значно меншим, аніж у розкладі за звичайним базисом. Наприклад, якщо $m = 4$, $n = 10$, то у правій частині (4.10) число доданків може досягати значення $N = mn = 40$, в той час як у розкладі Шмідта дане число не перевищуватиме 4. У певному сенсі розклад за базисом Шмідта можна вважати “оптимальним способом розкладу”.

На даному етапі приймемо справедливість теореми Шмідта без доведення. Для нас важливішим є практичне застосування розкладу Шмідта. Для цього, насамперед, слід знайти спосіб побудови базису Шмідта, та визначення коефіцієнтів Шмідта. Наведемо міркування, як можна вирішити цю задачу.

Візьмемо до уваги, що розклад (4.11) існує. Введемо такі позначення:

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_{AB} &= |\psi_{AB}\rangle \langle \psi_{AB}| && \text{— оператор густини об'єднаної системи,} \\ \hat{\rho}_A &= \text{Tr}_B \hat{\rho}_{AB} && \text{— приведений оператор густини підсистеми } A, \\ \hat{\rho}_B &= \text{Tr}_A \hat{\rho}_{AB} && \text{— приведений оператор густини підсистеми } B.\end{aligned}$$

Тут під Tr_A та Tr_B слід розуміти частковий трейс по базисних станах підсистем A та B відповідно. Обчислення, приміром, Tr_B у базисі Шмідта дає наступне:

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_A &= \sum_k \langle \chi_{k|B} | \hat{\rho}_{AB} | \chi_{k|B} \rangle = \sum_k \langle \chi_{k|B} | \psi_{AB} \rangle \langle \psi_{AB} | \chi_{k|B} \rangle \\ &= \sum_k \left\langle \chi_{k|B} \left| \left(\sum_i \sqrt{p_i} |\varphi_{i|A}\rangle \otimes |\chi_{i|B}\rangle \right) \left(\sum_j \sqrt{p_j} \langle \varphi_{j|A}| \otimes \langle \chi_{j|B}| \right) \right| \chi_{k|B} \right\rangle \\ &= \sum_{k,i,j} \sqrt{p_i} \sqrt{p_j} \langle \chi_{k|B} | \chi_{i|B} \rangle \langle \chi_{j|B} | \chi_{k|B} \rangle |\varphi_{i|A}\rangle \langle \varphi_{j|A}| \\ &= \sum_{k,i,j} \sqrt{p_i} \sqrt{p_j} \delta_{ik} \delta_{jk} |\varphi_{i|A}\rangle \langle \varphi_{j|A}| = \sum_k p_k |\varphi_{k|A}\rangle \langle \varphi_{k|A}|,\end{aligned}$$

де було враховано ортонормованість базису Шмідта:

$$\langle \chi_{k|B} | \chi_{i|B} \rangle = \delta_{ik}, \quad \langle \chi_{j|B} | \chi_{k|B} \rangle = \delta_{jk},$$

де δ_{ik}, δ_{jk} — символи Кронекера.

Аналогічним чином можна отримати і вираз для приведенного оператора густини $\hat{\rho}_B$.

Отже, остаточно маємо:

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_A &= \sum_k p_k |\varphi_{k|A}\rangle \langle \varphi_{k|A}| \\ \hat{\rho}_B &= \sum_k p_k |\chi_{k|B}\rangle \langle \chi_{k|B}|.\end{aligned}\tag{4.13}$$

З (4.13) видно, що в базисі Шмідта матриці густини $\hat{\rho}_A$ і $\hat{\rho}_B$ мають діагональний вигляд, причому $|\varphi_{k|A}\rangle$ є власними векторами матриці $\hat{\rho}_A$, а $|\chi_{k|B}\rangle$ — власними векторами $\hat{\rho}_B$. Числа p_k є власними числами як матриці $\hat{\rho}_A$, так і матриці $\hat{\rho}_B$.

Висновок. Базисні вектори $|\varphi_{k|A}\rangle$ в розкладі Шмідта (4.11) мають сенс власних векторів приведенного оператора (матриці) густини $\hat{\rho}_A$, а числа p_k мають зміст відповідних власних значень. Так само $|\chi_{k|B}\rangle$ — це власні вектори оператора (матриці) $\hat{\rho}_B$, що відповідають власним значенням p_k .

Даний висновок є основою для формулювання послідовності конкретних дій, що приводять до побудови базису Шмідта, а отже і до формули розкладу Шмідта.

Отже, нехай спочатку ми маємо вираз для стану $|\psi_{AB}\rangle$ у вигляді суперпозиції довільних базисних станів (4.10). На практиці в якості базисів $\{|\mu_i\rangle\}$ та $\{|\nu_j\rangle\}$ часто використовується обчислювальний (стандартний) базис:

$$\{\mu_i\} = \{|0\rangle; |1\rangle\} \quad \{\nu_j\} = \{|0\rangle; |1\rangle\}.$$

Наводимо послідовність наступних дій:

1. З оператора густини $\hat{\rho}_{AB} = |\psi_{AB}\rangle \langle \psi_{AB}|$ вже відомою процедурою (шляхом взяття часткового трейсу) будуємо приведені оператори (а потім і матриці) густини $\hat{\rho}_A$ і $\hat{\rho}_B$ підсистем A і B в тому ж відомому базисі $\{|\mu_i\rangle\}$ та $\{|\nu_j\rangle\}$. В загальному випадку, отримані таким чином $\hat{\rho}_A$ та $\hat{\rho}_B$ не мають діагонального виду.
2. Загальновідомим способом, шляхом діагоналізації матриць $\hat{\rho}_A$ та $\hat{\rho}_B$, знаходимо власні числа та відповідні їм ортонормовані власні вектори. Ненульові власні значення матриць $\hat{\rho}_A$ та $\hat{\rho}_B$ завжди однакові.
3. Згідно вище сформульованого висновку, отримані ненульові власні значення матриць $\hat{\rho}_A$ та $\hat{\rho}_B$ є саме числами p_k , а власні вектори є базисними векторами Шмідта $|\varphi_{k|A}\rangle$ і $|\chi_{k|B}\rangle$, що входять у розклад (4.11).

Щойно сформульвану процедуру надалі будемо називати “стандартний метод розкладу Шмідта”.

Зробимо декілька зауважень.

Перше. Базис Шмідта $\{\varphi_k\}$ і $\{\chi_k\}$ отримується у вигляді лінійної комбінації базисних векторів старого базису:

$$|\varphi_k\rangle = \sum_i \alpha_{ki} |\mu_i\rangle, \quad |\chi_k\rangle = \sum_j \beta_{kj} |\nu_j\rangle. \quad (4.14)$$

Це дозволяє просто перевірити правильність отриманої формули розкладу Шмідта. Для цього достатньо в (4.11) замість $|\varphi_k\rangle$ і $|\chi_k\rangle$ підставити праві частини співвідношень (4.14), і отриманий вираз порівняти з (4.10).

Друге. В загальному випадку розмірність m простору H_A може відрізнятися від розмірності n простору H_B . Як наслідок, число власних значень і власних векторів матриці $\hat{\rho}_A$ буде відрізнятися від відповідного числа матриці $\hat{\rho}_B$. Але, як видно з (4.11), у розклад Шмідта входить однакове число базисних векторів двох підсистем. Це можна пояснити наступним чином. В (4.11) входять тільки такі власні вектори, які відповідають *ненульовим* власним значенням, а число ненульових власних значень у матриці $\hat{\rho}_A$ і $\hat{\rho}_B$ завжди однакове, незалежно від розмірності m та n .

Третє. Якщо розмірності просторів H_A і H_B суттєво відрізняються (наприклад, $n \gg m$), то запропонований вище стандартний метод отримання розкладу Шмідта не є оптимальним для практичного застосування, оскільки задача на власні числа і власні вектори для великорозмірних матриць є досить громіздкою процедурою. У зазначеному випадку ефективнішою виявляється наступна послідовність дій. Спочатку знаходимо лише власні значення і власні вектори матриці малої розмірності (матриці $\hat{\rho}_A$, якщо $m \ll n$):

$$|\varphi_k\rangle = \sum_{i=1}^m \alpha_{ki} |\mu_i\rangle, \quad k = 1, 2, \dots, m. \quad (4.15)$$

Далі, формально розглядаючи (4.15) як систему неоднорідних алгебраїчних рівнянь відносно невідомих $|\mu_i\rangle$, розв’язуємо її та виражаємо $|\mu_i\rangle$ через новий базис $\{|\varphi_k\rangle\}$:

$$|\mu_i\rangle = \sum_k \gamma_{ik} |\varphi_k\rangle. \quad (4.16)$$

Наступний крок: підставляємо праву частину рівності (4.16) в (4.10) і переписуємо отриманий вираз у вигляді

$$|\psi_{AB}\rangle = \sum_k \sqrt{p_k} |\varphi_k\rangle \otimes \left(\sum_j \eta_{kj} |\nu_j\rangle \right), \quad (4.17)$$

де η_{kj} — певні відомі числа.

Виявляється, що вираз у дужках в (4.17) якраз і є базисними векторами Шмідта підсистеми B :

$$|\chi_k\rangle = \sum_j \eta_{kj} |\nu_j\rangle.$$

Отже, ми отримали розклад Шмідта (4.11).

Четверте. Якщо серед ненульових власних значень матриць $\hat{\rho}_A$ і $\hat{\rho}_B$ немає вироджених, то розклад Шмідта даного стану $|\psi_{AB}\rangle$ визначається однозначно. Якщо деяке ненульове власне значення вироджене (наприклад, двократно), то, як завжди в таких випадках, власні вектори знаходяться неоднозначно: одну пару відповідних виродженому власному значенню власних векторів можна замінити на іншу пару ортонормованих векторів. При заміні базисних станів у підсистемі A зміняться і базисні стани в підсистемі B .

Розклад Шмідта у квантовій механіці сам по собі виявляється корисним, оскільки, як було зазначено вище, це є розкладом за “оптимальним базисом” у тому сенсі, що число доданків у такому виразі є мінімальним з усіх можливих.

Однак в контексті теми “ознаки заплутаності квантових систем” розклад Шмідта також є корисним, оскільки він безпосередньо дає відповідь на питання, чи є даний чистий стан $|\psi_{AB}\rangle$ двокомпонентної квантової системи заплутаним, а саме:

якщо в розкладі Шмідта (4.11) число Шмідта r (число доданків) дорівнює одиниці, то даний стан $|\psi_{AB}\rangle$ є сепарабельним (не заплутаним); для всіх інших значень $r > 1$ даний стан є заплутаним.

Розглянемо декілька прикладів розкладу Шмідта.

Завдання. Нехай задано деякий стан $|\psi_{AB}\rangle$ двокомпонентної квантової системи. Використовуючи розклад Шмідта, з’ясувати, чи є він заплутаним.

Приклад 1.

$$|\psi_{AB}\rangle = \frac{1}{2} |00\rangle + \frac{1}{2} |01\rangle + \frac{1}{2} |10\rangle + \frac{1}{2} |11\rangle. \quad (4.18)$$

Для таких простих прикладів немає необхідності застосовувати загальну схему розкладу Шмідта. Безпосередньо після простих тотожних перетворень з (4.18) отримаємо:

$$\begin{aligned} |\psi_{AB}\rangle &= \frac{1}{2} |0\rangle_A \otimes (|0\rangle_B + |1\rangle_B) + \frac{1}{2} |1\rangle_A \otimes (|0\rangle_B + |1\rangle_B) \\ &= \frac{1}{2} (|0\rangle_A + |1\rangle_A) \otimes (|0\rangle_B + |1\rangle_B) = |\varphi_A\rangle \otimes |\chi_B\rangle, \end{aligned}$$

де $|\varphi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A + |1\rangle_A)$, $|\chi_B\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_B + |1\rangle_B)$. Звідси видно, що у розкладі Шмідта є всього лише один доданок ($r = 1$). Висновок: стан $|\psi_{AB}\rangle$ — сепарабельний. Звичайно, до такого ж висновку прийдемо, якщо використаємо ознаку сепарабельності (4.4).

Приклад 2.

$$|\psi_{AB}\rangle = \frac{1 + \sqrt{6}}{2\sqrt{6}}|00\rangle + \frac{1 - \sqrt{6}}{2\sqrt{6}}|01\rangle + \frac{\sqrt{2} - \sqrt{3}}{2\sqrt{6}}|10\rangle + \frac{\sqrt{2} + \sqrt{3}}{2\sqrt{6}}|11\rangle.$$

Насамперед слід переконатися, що стан $|\psi_{AB}\rangle$ нормовано на одиницю. Далі застосовуємо стандартний метод розкладу Шмідта.

Приведений оператор густини першого кубіту (підсистема A):

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_A &= \text{Tr}_B \hat{\rho}_{AB} = {}_B\langle 0 | \hat{\rho}_{AB} | 0 \rangle_B + {}_B\langle 1 | \hat{\rho}_{AB} | 1 \rangle_B \\ &= {}_B\langle 0 | \psi_{AB} \rangle \langle \psi_{AB} | 0 \rangle_B + {}_B\langle 1 | \psi_{AB} \rangle \langle \psi_{AB} | 1 \rangle_B \\ &= \frac{7}{12} |0\rangle_A \langle 1| - \frac{1}{3\sqrt{2}} |0\rangle_A \langle 1| - \frac{1}{3\sqrt{2}} |1\rangle_A \langle 0| + \frac{5}{12} |1\rangle_A \langle 1|.\end{aligned}$$

Звідси випливає, що

$$\hat{\rho}_A = \begin{pmatrix} \frac{7}{12} & -\frac{1}{3\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{3\sqrt{2}} & \frac{5}{12} \end{pmatrix}.$$

Власні значення і нормовані власні вектори матриці $\hat{\rho}_A$ мають вигляд

$$\begin{aligned}p_1 &= \frac{3}{4}, & |\varphi_1\rangle_A &= \sqrt{\frac{2}{3}}|0\rangle_A - \frac{1}{\sqrt{3}}|1\rangle_A, \\ p_2 &= \frac{1}{4}, & |\varphi_2\rangle_A &= \frac{1}{\sqrt{3}}|0\rangle_A + \sqrt{\frac{2}{3}}|1\rangle_A.\end{aligned}\tag{4.19}$$

Повторюючи застосовані операції для підсистеми B , отримуємо ті ж самі власні значення $p_1 = \frac{3}{4}, p_2 = \frac{1}{4}$ та відповідні власні вектори:

$$\begin{aligned}|\chi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle_B - \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle_B, \\ |\chi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle_B + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle_B.\end{aligned}\tag{4.20}$$

Отже, розклад Шмідта для вектора $|\psi_{AB}\rangle$ запишемо у вигляді

$$|\psi_{AB}\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2} |\varphi_1\rangle_A \otimes |\chi_1\rangle_B + \frac{1}{2} |\varphi_2\rangle_A \otimes |\chi_2\rangle_B,\tag{4.21}$$

де $|\varphi_i\rangle_A$ і $|\chi_i\rangle_B$ — базисні стани Шмідта, що визначаються формулами (4.19) і (4.20).

Оскільки в даному випадку число Шмідта $r = 2$, то стан $|\psi_{AB}\rangle$ — заплутаний. В заплутаності стану $|\psi_{AB}\rangle$ можна також переконатися за ознакою (4.4). У правильності розкладу (4.21) можна переконатися, якщо підставити сюди вирази (4.19) та (4.20) і порівняти результат з початковим виразом вектора $|\psi_{AB}\rangle$.

Приклад 3. Розглянемо тепер двокомпонентну квантову систему, в якій розмірність підсистеми A дорівнює $m = 2$, а розмірність підсистеми B дорівнює $n = 3$.

Нормовані базисні стани підсистеми A позначимо через $|0\rangle_A$ та $|1\rangle_A$, а базисні стани підсистеми B — через $|1\rangle_B, |0\rangle_B, |-1\rangle_B$. Даним базисним станам можна надати фізичну інтерпретацію: стани $|0\rangle_A$ та $|1\rangle_A$ можна трактувати як спінові стани частинки зі спіном $s = \frac{1}{2}$. Стану $|0\rangle_A$ відповідає спіновий стан $|\uparrow\rangle$ з проекцією спіну “вгору”, а стану $|1\rangle_A$ — стан $|\downarrow\rangle$ з проекцією спіну “вниз”. Базисні стани підсистеми B $|1\rangle_B, |0\rangle_B, |-1\rangle_B$ можна вважати станами зі значенням квантового числа моменту імпульсу орбітального руху частинки з $l = 1$ і трьома значеннями проекції моменту на вісь квантування z : $m = 1, 0, -1$.

Нехай задано стан композитної квантової системи

$$|\psi_{AB}\rangle = a_{0,1} |0\rangle_A \otimes |1\rangle_B + a_{0,0} |0\rangle_A \otimes |0\rangle_B + a_{0,-1} |0\rangle_A \otimes |-1\rangle_B + a_{1,1} |1\rangle_A \otimes |1\rangle_B + a_{1,0} |1\rangle_A \otimes |0\rangle_B + a_{1,-1} |1\rangle_A \otimes |-1\rangle_B,$$

де

$$a_{0,1} = \frac{\sqrt{2} - 2\sqrt{3}}{4\sqrt{6}}, \quad a_{0,0} = \frac{\sqrt{2} + \sqrt{3}}{2\sqrt{6}}, \quad a_{0,-1} = \frac{\sqrt{2} - 2\sqrt{3}}{4\sqrt{6}},$$

$$a_{1,1} = \frac{2 + \sqrt{6}}{4\sqrt{6}}, \quad a_{1,0} = \frac{\sqrt{6} - 1}{2\sqrt{6}}, \quad a_{1,-1} = \frac{2 + \sqrt{6}}{4\sqrt{6}}.$$

Завдання: отримати розклад Шмідта стану $|\psi_{AB}\rangle$ та з’ясувати, чи є даний стан заплутаним.

Оскільки в даному випадку розмірності підсистем A та B такі, що $m = 2, n = 3, m < n$, то використаємо нестандартний метод, описаний вище, знаходження базису Шмідта.

Знайдемо приведені оператор густини і приведену матрицю для під-

системи A :

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_A &= {}_B\langle 1 | \psi_{AB} \rangle \langle \psi_{AB} | 1 \rangle_B + {}_B\langle 0 | \psi_{AB} \rangle \langle \psi_{AB} | 0 \rangle_B + {}_B\langle -1 | \psi_{AB} \rangle \langle \psi_{AB} | -1 \rangle_B \\ &= (a_{0,1}^2 + a_{0,0}^2 + a_{0,-1}^2) |0\rangle_A \langle 0| + (a_{0,1}a_{1,1} + a_{0,0}a_{1,0} + a_{0,-1}a_{1,-1}) |0\rangle_A \langle 1| \\ &\quad + (a_{1,1}a_{0,1} + a_{1,0}a_{0,0} + a_{1,-1}a_{0,-1}) |1\rangle_A \langle 0| + (a_{1,1}^2 + a_{1,0}^2 + a_{1,-1}^2) |1\rangle_A \langle 1| \\ &= \frac{1}{2} |0\rangle_A \langle 0| + \frac{1}{2} |1\rangle_A \langle 1|.\end{aligned}$$

Звідси випливає, що $\hat{\rho}_A = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$.

Звертаємо увагу на те, що $\hat{\rho}_A$ — діагональна матриця. З цього випливає, що стани $|0\rangle_A$ і $|1\rangle_A$ можна розглядати в якості базису Шмідта:

$$\begin{aligned}p_1 &= \frac{1}{2}, & |\varphi_1\rangle_A &= |0\rangle_A, \\ p_2 &= \frac{1}{2}, & |\varphi_2\rangle_A &= |1\rangle_A.\end{aligned}\tag{4.22}$$

Представимо тепер $|\psi_{AB}\rangle$ у вигляді

$$\begin{aligned}|\psi_{AB}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle_A \otimes \left(\sqrt{2}a_{0,1} |1\rangle_B + \sqrt{2}a_{0,0} |0\rangle_B + \sqrt{2}a_{0,-1} |-1\rangle_B \right) \\ &\quad + \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle_A \otimes \left(\sqrt{2}a_{1,1} |1\rangle_B + \sqrt{2}a_{1,0} |0\rangle_B + \sqrt{2}a_{1,-1} |-1\rangle_B \right).\end{aligned}\tag{4.23}$$

Згідно міркувань, описаних вище, приходимо до висновку, що ортонормований базис Шмідта для підсистеми B має вигляд:

$$\begin{aligned}|\chi_1\rangle_B &= \sqrt{2} (a_{0,1} |1\rangle_B + a_{0,0} |0\rangle_B + a_{0,-1} |-1\rangle_B), \\ |\chi_2\rangle_B &= \sqrt{2} (a_{1,1} |1\rangle_B + a_{1,0} |0\rangle_B + a_{1,-1} |-1\rangle_B),\end{aligned}$$

або після підстановки значень коефіцієнтів знаходимо:

$$\begin{aligned}|\chi_1\rangle_B &= \frac{\sqrt{2} - 2\sqrt{3}}{8\sqrt{3}} |1\rangle_B + \frac{\sqrt{2} + \sqrt{3}}{4\sqrt{3}} |0\rangle_B + \frac{\sqrt{2} - \sqrt{3}}{8\sqrt{3}} |-1\rangle_B, \\ |\chi_2\rangle_B &= \frac{2 + \sqrt{6}}{8\sqrt{3}} |1\rangle_B + \frac{\sqrt{6} - 1}{4\sqrt{3}} |0\rangle_B + \frac{2 + \sqrt{6}}{8\sqrt{3}} |-1\rangle_B.\end{aligned}\tag{4.24}$$

Безпосередньою підстановкою значень $|\chi_1\rangle_B$ і $|\chi_2\rangle_B$ отримаємо:

$$\langle \chi_1 | \chi_1 \rangle = \|\chi_1\|^2 = 1, \quad \langle \chi_2 | \chi_2 \rangle = \|\chi_2\|^2 = 1, \quad \langle \chi_1 | \chi_2 \rangle = 0,$$

що свідчить про те, що стани $|\chi_1\rangle$ та $|\chi_2\rangle$ утворюють ортонормований базис.

Остаточно маємо розклад Шмідта для вектора стану $|\psi_{AB}\rangle$:

$$|\psi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\varphi_1\rangle_A \otimes |\chi_1\rangle_B + \frac{1}{\sqrt{2}} |\varphi_2\rangle_A \otimes |\chi_2\rangle_B, \quad (4.25)$$

де $|\varphi_i\rangle_A$ та $|\chi_i\rangle_B$ визначаються в (4.22) та (4.24).

З (4.25) випливає, що число Шмідта $r = 2$ — стан $|\psi_{AB}\rangle$ заплутаний.

Зауваження. Оскільки власне значення матриці $\hat{\rho}_A$ — вироджене ($p_1 = p_2 = \frac{1}{2}$), то розклад Шмідта в даному випадку неоднозначний.

Наприклад, замість пари базисних станів $|\varphi_1\rangle = |0\rangle_A$ і $|\varphi_2\rangle = |1\rangle_A$ можна взяти ортонормований базис

$$|\varphi'_1\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_A + |1\rangle_A), \quad |\varphi'_2\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_A - |1\rangle_A),$$

і тоді розклад Шмідта набуває вигляду

$$|\psi_{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\varphi'_1\rangle_A \otimes |\chi'_1\rangle_B + \frac{1}{\sqrt{2}} |\varphi'_2\rangle_A \otimes |\chi'_2\rangle_B.$$

Читачеві пропонується знайти вигляд станів $|\chi'_1\rangle_B$ і $|\chi'_2\rangle_B$.

Приклад 4.

$$|\psi_{AB}\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} |00\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}} |01\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}} |10\rangle + \frac{1}{2\sqrt{2}} |11\rangle.$$

Читачеві пропонується самостійно обрати метод та отримати розклад Шмідта для даного вектору стану $|\psi_{AB}\rangle$.

У квантовій механіці трапляються ситуації, коли розклад Шмідта з'являється природним чином.

Приклад. Дві квантові підсистеми, стани яких $|l_1, m_1\rangle$ та $|l_2, m_2\rangle$ визначаються фіксованими значеннями кутового моменту l_1 та l_2 і значеннями проекцій на вісь квантування $-l_1 \leq m_1 \leq l_1$, $-l_2 \leq m_2 \leq l_2$, можна об'єднати в одну квантову систему. Об'єднана система може знаходитися у стані $|L, M\rangle$ з певним значенням кутового моменту $|l_1 - l_2| \leq L \leq l_1 + l_2$ і з певним значенням проекції моменту M на вісь квантування. Даний стан можна представити у вигляді суперпозиції тензорних добутків станів підсистем:

$$|L, M\rangle = \sum_{m_1, m_2} \langle l_1, m_1, l_2, m_2 | L, M \rangle |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle, \quad (4.26)$$

де $\langle l_1, m_1, l_2, m_2 | L, M \rangle$ — коефіцієнти Клебша-Гордона. Оскільки коефіцієнти Клебша-Гордона дорівнюють нулю, якщо $M \neq m_1 + m_2$, то (4.26) можна переписати у вигляді

$$\begin{aligned} |L, M\rangle &= \sum_{m_1} \langle l_1, m_1, l_2, M - m_1 | L, M \rangle |l_1, m_1\rangle \otimes |l_2, M - m_1\rangle \\ &= \sum_{m_2} \langle l_1, M - m_2, l_2, m_2 | L, M \rangle |l_1, M - m_2\rangle \otimes |l_2, m_2\rangle. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Розмірність першої квантової підсистеми дорівнює $m = 2l_1 + 1$. Розмірність другої підсистеми дорівнює $n = 2l_2 + 1$. Виявляється, що число доданків у \sum_{m_1} або \sum_{m_2} з (4.27) не може перевищувати значення $r = \min\{2l_1 + 1; 2l_2 + 1\}$. Коефіцієнти Клебша-Гордона є дійсними додатніми або від'ємними величинами, отже $\langle l_1, m_1, l_2, m_2 | L, M \rangle = \pm |\langle l_1, m_1, l_2, m_2 | L, M \rangle|$. Якщо число ∓ 1 віднести як фазовий множник, наприклад, до вектору $|l_1, m_1\rangle$, то порівняння (4.27) з розкладом Шмідта (4.11) дає наступну відповідність:

$$\begin{aligned} |\psi_{AB}\rangle &\rightarrow |L, M\rangle \\ p_{m_1} &\rightarrow |\langle l_1, m_1, l_2, M - m_1 | L, M \rangle|^2 \\ |\varphi_{m_1}\rangle &\rightarrow \pm |l_1, m_1\rangle \\ |\chi_{m_1}\rangle &\rightarrow |l_2, M - m_1\rangle. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Зазначимо також, що коефіцієнти Клебша-Гордона задовольняють умові $\sum_{m_1} |\langle l_1, m_1, l_2, M - m_1 | L, M \rangle|^2 = 1$, що відповідає

$$\sum_{m_1} p_{m_1} = 1 \quad (4.29)$$

у розкладі Шмідта.

Відповідності (4.28) та (4.29) дозволяють стверджувати, що (4.27) є розкладом Шмідта. Стани (4.26) є заплутаними станами, оскільки у правій частині число доданків $r > 1$. Винятком з правила є лише випадок для значень $L = l_1 + l_2$, $M = l_1 + l_2$. Такий стан $|L = l_1 + l_2, M = l_1 + l_2\rangle = |l_1, m_1 = l_1\rangle \otimes |l_2, m_2 = l_2\rangle$ є сепарабельним, оскільки в даному випадку у розкладі (4.27) є лише один доданок, в якому коефіцієнт Клебша-Гордона $\langle l_1, m_1 = l_1, l_2, m_2 = l_2 | L = l_1 + l_2, M = l_1 + l_2 \rangle$ дорівнює одиниці.

Розділ 5

Квантові алгоритми

У квантових обчисленнях величезні позитивні наслідки має фундаментальний постулат квантової теорії, що називається “принцип суперпозиції станів”. Зміст цього принципу має просте тлумачення:

Якщо квантова система може знаходитися у станах $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots$, то вона також може знаходитися у стані $|\psi\rangle = \alpha_1 |\psi_1\rangle + \alpha_2 |\psi_2\rangle + \dots$, що являє собою лінійну суперпозицію станів $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots$; α_i в загальному випадку — комплексні числа.

Саме завдяки принципу суперпозиції у квантових обчисленнях можуть застосовуватися алгоритми, які не мають аналогів в обчисленнях на звичайних класичних (не квантових) комп’ютерах. Трохи згодом, нижче, будуть розглянуті приклади квантових алгоритмів, в яких застосовані т.зв. “квантовий паралелізм” та “квантова інтерференція” — властивості алгоритмів, що є безпосередніми наслідками принципу квантової суперпозиції.

Для спрощення подальших пояснень попередньо розглянемо деякі вирази та співвідношення.

Спочатку нагадаємо результат дії відомого оператора Адамара \hat{H} :

$$\hat{H} |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle), \quad \hat{H} |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle). \quad (5.1)$$

Обидва співвідношення можна об’єднати в один вираз:

$$\hat{H} |x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|0\rangle + (-1)^x |1\rangle], \quad \text{або} \quad \hat{H} |x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_z (-1)^{xz} |z\rangle, \quad (5.2)$$

де x та z можуть приймати значення 0 або 1.

Базисні стани обчислювального (стандартного) базису n -кубітової системи будемо далі представляти у вигляді:

$$|\vec{x}\rangle = |x_1\rangle \otimes |x_2\rangle \otimes \cdots \otimes |x_n\rangle = |x_1 x_2 \dots x_n\rangle, \quad (5.3)$$

тобто n -кубітовий базисний стан являє собою тензорний добуток однокубітових базисних станів. Позначення \vec{x} формально можна розглядати як n -компонентний вектор, кожна компонента якого може приймати два значення — 0 або 1. Тоді під виразом $\vec{x} \cdot \vec{z}$ можна розуміти скалярний добуток:

$$\vec{x} \cdot \vec{z} = x_1 z_1 + x_2 z_2 + \cdots + x_n z_n \quad (5.4)$$

Оскільки однокубітові базисні стани $|0\rangle$ та $|1\rangle$ вважаються ортонормованими, то і n -кубітові стани (5.2) також автоматично стають ортонормованими. Дійсно, скалярний добуток $\langle \vec{x} | \vec{y} \rangle = \langle x_1 | y_1 \rangle \cdot \langle x_2 | y_2 \rangle \cdots \langle x_n | y_n \rangle$ дорівнює одиниці, якщо кожна компонента вектора \vec{x} співпадає з відповідною компонентою вектора \vec{y} , та дорівнює нулю, якщо хоча б одна компонента одного вектора відрізняється від значення відповідної компоненти другого вектора.

Безпосередньо з означення n -кубітових базисних станів випливає, що загальне їх число дорівнює $N = 2^n$.

Далі, під позначенням $\hat{H}^{\otimes n}$ будемо розуміти тензорний добуток операторів Адамара:

$$\hat{H}^{\otimes n} = \hat{H}_1 \otimes \hat{H}_2 \otimes \cdots \otimes \hat{H}_n,$$

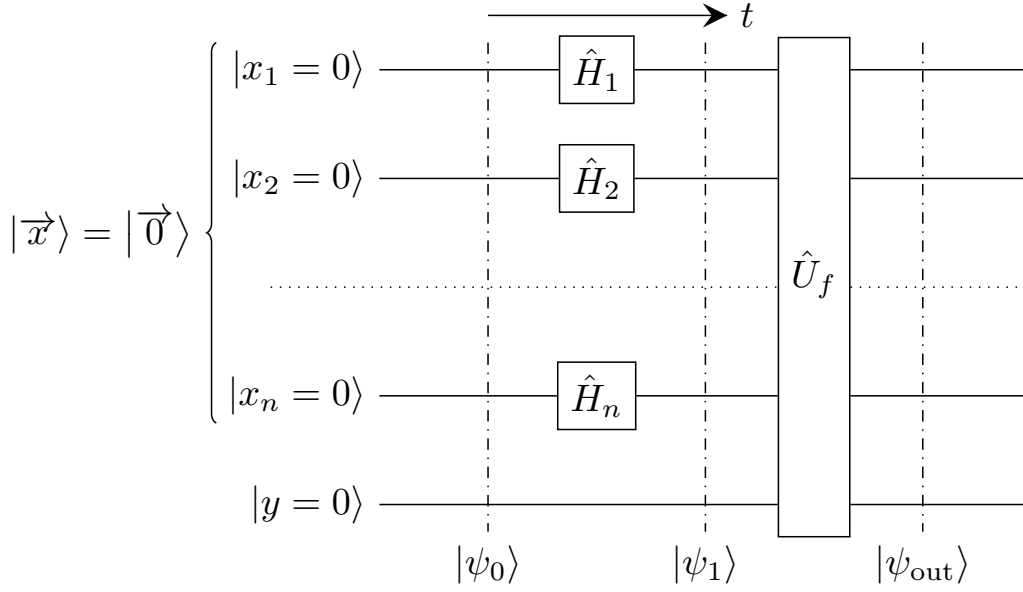
де кожен з операторів \hat{H}_i визначений у просторі станів відповідного i -го кубіта.

Розглянемо дію оператора $\hat{H}^{\otimes n}$ на n -кубітовий базисний стан, врахувавши (5.2):

$$\begin{aligned} \hat{H}^{\otimes n} |\vec{x}\rangle &= \hat{H}_1 |x_1\rangle \otimes \hat{H}_2 |x_2\rangle \otimes \cdots \otimes \hat{H}_n |x_n\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{z_1} (-1)^{x_1 z_1} |z_1\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{z_2} (-1)^{x_2 z_2} |z_2\rangle \\ &\quad \otimes \cdots \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{z_n} (-1)^{x_n z_n} |z_n\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{z_1 z_2 \dots z_n \in \{0;1\}^n} (-1)^{x_1 z_1 + x_2 z_2 + \cdots + x_n z_n} |z_1 z_2 \dots z_n\rangle, \end{aligned}$$

або скорочено:

$$\hat{H}^{\otimes n} |\vec{x}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{\vec{z}} (-1)^{\vec{z} \cdot \vec{x}} |\vec{z}\rangle, \quad (5.5)$$

Рис. 5.1: Загальна схема квантового алгоритму \hat{U}_f

де підсумовування проводиться по всіх $N = 2^n$ можливих значеннях $\vec{z} = \{z_1 z_2 \dots z_n\}$.

Зокрема, з (5.5) випливає:

$$\hat{H}^{\otimes n} |\vec{0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{\vec{z}} |\vec{z}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{\vec{x}} |\vec{x}\rangle, \quad (5.6)$$

де введено позначення $|\vec{0}\rangle = |00 \dots 0\rangle$.

Вираз (5.6) являє собою просту суперпозицію всіх 2^n базисних станів, причому всі базисні стани входять у суму з однаковими амплітудами $\alpha = 1/\sqrt{2^n}$.

Перейдемо тепер безпосередньо до розгляду деяких особливостей квантових алгоритмів.

5.1 Квантовий паралелізм: ініціалізація регістра

Для того, щоб відчутти потужність ефекту, що має назву “квантовий паралелізм”, розглянемо алгоритм, що реалізується за квантовою схемою з регістром в $n + 1$ кубіт, див. Рис. 5.1.

Завдання полягає в обчисленні деякої функції $y = f(\vec{x})$, тобто кожному з $N = 2^n$ значень аргументу $\vec{x} = \{x_1 x_2 \dots x_n\}$, $x_i \in \{0; 1\}$ слід поставити у відповідність значення функції $y \in \{0; 1\}$.

Алгоритм задачі полягає в послідовних діях — операціях над кубітами — згідно схеми, рухаючись вздовж неї зліва направо. Вважається, що в кожний момент часу можна визначити стан регістру. На схемі, зокрема, відзначені три таких стани: $|\psi_0\rangle$ — початковий стан; $|\psi_1\rangle$ — стан після проходження першого блоку операцій; $|\psi_{\text{out}}\rangle$ — стан регістра після завершення всіх операцій.

В квантових комп'ютерах перед початком реалізації алгоритмів завжди виконується специфічна процедура, яка має назву “*ініціалізація стану регістра*” — приведення регістру кубітів до потрібного початкового стану. На відміну від процедури ініціалізації на класичному, дана операція на квантовому комп'ютері, взагалі кажучи, не є тривіальною операцією.

На нашій схемі вважається, що процедура ініціалізації вже реалізована і, отже, початковий стан $n + 1$ -кубітового регістру має вигляд

$$|\psi_0\rangle = \underbrace{|00 \dots 0\rangle}_{n \text{ кубітів}} |0\rangle = |\vec{0}\rangle |0\rangle.$$

Наступний стан $|\psi_1\rangle$, як це видно зі схеми, отримується в результаті дії на початковий стан оператора $\hat{H}^{\otimes n}$; врахувавши (5.6), отримуємо:

$$|\psi_1\rangle = \hat{H}^{\otimes n} |\psi_0\rangle = \left(\hat{H}^{\otimes n} |\vec{0}\rangle \right) \otimes |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{\vec{x}} |\vec{x}\rangle \otimes |0\rangle.$$

Через \hat{U}_f на схемі позначено лінійний унітарний оператор, дія якого повністю визначається рівністю:

$$\hat{U}_f |\vec{x}\rangle |y\rangle = |\vec{x}\rangle |y \oplus f(\vec{x})\rangle,$$

де знак \oplus означає додавання по модулю два, тобто згідно відомої алгебри:

$$0 \oplus 0 = 0, \quad 0 \oplus 1 = 1, \quad 1 \oplus 0 = 1, \quad 1 \oplus 1 = 0. \quad (5.7)$$

Отже, знаючи зміст оператора \hat{U}_f , можна записати стан регістра на виході схеми:

$$\begin{aligned} |\psi_{\text{out}}\rangle &= \hat{U}_f |\psi_1\rangle = \hat{U}_f \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{\vec{x}} |\vec{x}\rangle \otimes |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{\vec{x}} \hat{U}_f (|\vec{x}\rangle \otimes |0\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{\vec{x}} |\vec{x}\rangle |0 \oplus f(\vec{x})\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{\vec{x}} |\vec{x}\rangle |f(\vec{x})\rangle. \end{aligned}$$

Якщо через \hat{S} позначити сукупність всіх послідовних дій, що вказані на схемі, то перехід системи кубітів від початкового до кінцевого стану представляється у вигляді:

$$|\psi_{\text{out}}\rangle = \hat{S} \left| \vec{0} \right\rangle \otimes |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{\vec{x}} |\vec{x}\rangle \otimes |f(\vec{x})\rangle. \quad (5.8)$$

Зауважимо, що всі перетворення станів системи кубітів являють собою унітарні операції, внаслідок чого стан $|\psi_{\text{out}}\rangle$, як і стан $|\psi_0\rangle$, нормований на 1:

$$\langle \psi_{\text{out}} | \psi_{\text{out}} \rangle = \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = 1.$$

Дамо інтерпретацію отриманого результату.

У виразі (5.8), отриманого за допомогою простого квантового алгоритму, міститься вагомий результат. У кожному з $N = 2^n$ доданків суперпозиції, разом зі значенням аргументу \vec{x} , маємо шукане значення функції $y = f(\vec{x})$. Отже, за один-єдиний прохід схеми зліва направо (“за один запит до обчислювальної системи”) маємо шукане значення функції одночасно для всіх можливих значень аргументу. Таке паралельне обчислення функції має назву “квантовий паралелізм”. Для порівняння, на даному прикладі, квантового та класичного алгоритмів, слід звернути увагу на те, що число $N = 2^n$ (експоненціально) швидко зростає зі збільшенням числа кубітів n . Приміром, для $n = 50$, $N = 2^{50} \approx 1.2 \cdot 10^{15}$. Це означає, що під час класичного обчислення необхідно зробити більш як 10^{15} “запитів” до обчислювального пристрою, щоб отримати той самий результат, який отримується під час квантового обчислення всього лише за 1 “запит”. При достатньо великих значеннях n розглянута вище задача не може бути розв’язана за допомогою сучасних класичних суперкомп’ютерів за будь-який осяжний час. Такі алгоритми, які з лінійним зростанням розмірності задачі (наприклад, числа n в нашому випадку) вимагають експоненціального, тобто $\mathcal{O}(2^n)$, збільшення необхідних для обчислення ресурсів (наприклад, кількості часу або об’єму необхідної пам’яті), називають “неефективними алгоритмами”. Отже, розглянутий приклад показує, що існують такі задачі, алгоритм розв’язування яких на класичному комп’ютері є неефективним, а на квантовому — ефективним.

Розглянутий вище квантовий алгоритм носить скоріше демонстраційний характер. До найбільш відомих квантових алгоритмів, що можуть мати практичне значення, відноситься алгоритм факторизації (тобто розкладання на прості множники) великих чисел, запропонований Пітером Шором у 1994 р. Справа в тім, що надійність широко поширеної криптографічної системи RSA (популярної у фінансовій та державній

сферах) базується на тому, що найефективніший відомий на сьогодні класичний алгоритм факторизації чисел є експоненціально складним, тобто є неефективним алгоритмом. Квантовий алгоритм, запропонований Шором, показав можливість ефективно виконувати процедуру факторизації, що знайшло широкий відгук у науковому середовищі та сприяло активізації досліджень зі створення квантового комп'ютера.

Для пояснення джерела переваги квантових алгоритмів можна підійти і з іншого боку. Припустимо, що класичний і квантовий комп'ютери мають реєстри з однаковим числом n , відповідно, бітів та кубітів.

У кожний даний момент стан класичного реєстру можна описати вектором з n елементів, кожний з яких має значення 0 або 1. Елементарна операція з перетворення стану реєстра полягає в заміні деякого числа $k \leq n$ нулів на одиниці або навпаки. Математично це означає, що елементарні оператори діють в n -вимірному просторі. При цьому, фізична дія на окремий біт може призвести до зміни стану лише одного даного елементу.

Розглянемо тепер аналогічну ситуацію для квантового реєстру. Завдяки принципу суперпозиції, загальний стан n -кубітового реєстру представляється лінійною суперпозицією $N = 2^n$ базисних станів, і цей стан можна виразити у формі вектора в 2^n -вимірному просторі. Відповідні елементарні перетворення станів реалізуються операторами, що також визначені в цьому просторі. На відміну від ситуації з класичним реєстром, фізична зміна стану лише одного кубіта може суттєво змінити n -кубітовий стан в усьому 2^n -вимірному просторі.

Розглянемо цей ефект на прикладі трикубітового реєстру. Загальний вираз стану реєстра, в даному випадку, представляється лінійною суперпозицією $N = 2^3 = 8$ базисних станів

$$\begin{aligned} |\psi_0\rangle = & \alpha_0 |000\rangle + \alpha_1 |001\rangle + \alpha_2 |010\rangle + \alpha_3 |011\rangle \\ & + \alpha_4 |100\rangle + \alpha_5 |101\rangle + \alpha_6 |110\rangle + \alpha_7 |111\rangle \end{aligned} \quad (5.9)$$

з умовою нормування $\sum_{i=0}^7 |\alpha_i|^2 = 1$. Даний стан можна виразити через компоненти вектора $|\psi_0\rangle = \{\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5, \alpha_6, \alpha_7\}$. За допомогою лазера змінимо стан, наприклад, першого кубіта, і нехай ця зміна еквівалентна дії оператора Адамара на перший кубіт. В результаті такої дії отримаємо наступний n -кубітовий стан:

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle = \hat{H}_1 |\psi_0\rangle = & \left(\hat{H}_1 |0\rangle \right) \otimes (\alpha_0 |00\rangle + \alpha_1 |01\rangle + \alpha_2 |10\rangle + \alpha_3 |11\rangle) \\ & + \left(\hat{H}_1 |1\rangle \right) \otimes (\alpha_4 |00\rangle + \alpha_5 |01\rangle + \alpha_6 |10\rangle + \alpha_7 |11\rangle) \\ = & \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle) \otimes (\alpha_0 |00\rangle + \alpha_1 |01\rangle + \alpha_2 |10\rangle + \alpha_3 |11\rangle) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle) \otimes (\alpha_4 |00\rangle + \alpha_5 |01\rangle + \alpha_6 |10\rangle + \alpha_7 |11\rangle) \\
= & \frac{1}{\sqrt{2}} \left[(\alpha_0 + \alpha_4) |000\rangle + (\alpha_1 + \alpha_5) |001\rangle \right. \\
& + (\alpha_2 + \alpha_6) |010\rangle + (\alpha_3 + \alpha_7) |011\rangle \\
& + (\alpha_0 - \alpha_4) |100\rangle + (\alpha_1 - \alpha_5) |101\rangle \\
& \left. + (\alpha_2 - \alpha_6) |110\rangle + (\alpha_3 - \alpha_7) |111\rangle \right], \text{ або} \\
|\psi_1\rangle = & \left\{ \alpha_0 + \alpha_4, \alpha_1 + \alpha_5, \alpha_2 + \alpha_6, \alpha_3 + \alpha_7, \right. \\
& \left. \alpha_0 - \alpha_4, \alpha_1 - \alpha_5, \alpha_2 - \alpha_6, \alpha_3 - \alpha_7 \right\}. \tag{5.10}
\end{aligned}$$

Зокрема, якщо всі початкові амплітуди α_i однакові, $\alpha_0 = \alpha_1 = \dots = \alpha_7 = \frac{1}{2\sqrt{2}}$, то стан (5.10) набуває вигляду

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{2} \{1, 1, 1, 1, 0, 0, 0, 0\}. \tag{5.11}$$

Порівняння початкового стану $|\psi_0\rangle$ з кінцевим $|\psi_1\rangle$ демонструє суттєву зміну n -кубітового стану завдяки фізичному впливу на стан лише одного кубіта. З (5.10) та (5.11) видно також ознаки квантової інтерференції амплітуд при переході $|\psi_0\rangle \rightarrow |\psi_1\rangle$.

5.2 Квантова інтерференція. Алгоритм Дойча-Джози

Результат (5.8), отриманий у попередньому розділі завдяки квантовому паралелізму, звичайно, може викликати почуття ейфорії. Атож, отримати одночасно, за одне звернення до обчислювальної системи, всі 2^n значень функції $y = f(\vec{x})$ — хіба це не привід для ейфорії?

Проте, на жаль, тут є одна проблема. Справа в тому, що інформацією, закодованою у виразі (5.8), неможливо скористатися безпосередньо, оскільки вона існує тут у формі *квантової інформації*, тобто її зміст міститься в отриманій хвильовій функції (векторі стану). Практична цінність даної інформації виявляється лише після переведення її з квантової у звичну для нас класичну форму. У квантовій механіці така трансформація забезпечується процедурою вимірювання. Але вимірювання не є унітарною операцією, тому в цій процедурі частина інформації хвильової функції може втрачатися. Зокрема, якщо по завершенні обчислень провести вимірювання над станом (5.8) в обчислювальній базисі, то результатом вимірювання буде лише одне з 2^n значень аргументу $\vec{x} = \vec{x}'$

та відповідне йому лише одне значення $y' = f(\vec{x}')$, причому кожне конкретне \vec{x}' та відповідне y' з'являтимуться абсолютно випадково з імовірністю $w = 1/2^n$. Вся інформація про інші значення функції зникне під час вимірювання внаслідок колапсу (редукції) суперпозиційного стану $|\psi_{\text{out}}\rangle = \sum_{\vec{x}} |\vec{x}\rangle \otimes |f(\vec{x})\rangle$ до стану $|\psi'\rangle = |\vec{x}'\rangle \otimes |f(\vec{x}')\rangle$. Всі можливі повторні вимірювання над станом $|\psi'\rangle$ в обчислювальному базисі будуть призводити до того самого результату, що й при першому процесі вимірювання. Для вилучення максимальної класичної інформації зі стану $|\psi_{\text{out}}\rangle$ необхідно багато (теоретично нескінченно багато) разів провести одну й ту ж саму процедуру обчислень із наступним процесом вимірювання. Це повністю нівелює перевагу, отриману від квантового паралелізму. Такий висновок може призвести до почуття повного розчарування, тобто змінити ейфорію на глибокий песимізм.

Проте, не все так погано. По-перше, результат обчислень $|\psi_{\text{out}}\rangle$ (без вимірювання) можна використовувати як проміжний, і задіяти його зі збереженням всієї квантової інформації для наступних квантових процедур. По-друге, для деякого класу задач існують такі алгоритми, які видають кінцевий результат у такому вигляді, який під час вимірювання дає однозначний результат. В таких алгоритмах часто використовується ефект, що має назву “квантова інтерференція”.

В якості прикладу такого типу алгоритмів розглянемо так званий алгоритм Дойча-Джози, в якому задіяні ефекти як квантового паралелізму, так і квантової інтерференції.

Для формулювання задачі Дойча-Джози дамо спочатку деякі пояснення. Позначення, що задіяні далі, значною мірою повторюють позначення з попереднього розділу.

Нехай задано деяку функцію $y = f(\vec{x})$, яка кожному із 2^n значень аргументу $\vec{x} = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$, $x_i \in \{0; 1\}$ ставить у відповідність одnobітове значення 0 або 1. Якщо для всіх 2^n можливих значень \vec{x} значення $f(\vec{x})$ однакові, тобто

$$\begin{aligned} f(\vec{x}) &= 0 \quad \text{для всіх можливих } \vec{x} \\ \text{або } f(\vec{x}) &= 1 \quad \text{для всіх можливих } \vec{x}, \end{aligned}$$

то функцію $f(\vec{x})$ називають “функція константа”. Якщо ж для половини значень аргументу, заданих у будь-якому порядку, $f(\vec{x}) = 0$, а для другої половини — $f(\vec{x}) = 1$, то $f(\vec{x})$ має назву “збалансована функція”. Зрозуміло, що, взагалі кажучи, функція $f(\vec{x})$ може бути ні константою, ні збалансованою. Належність функції до функцій-констант або до збалансованих функцій називають глобальною властивістю функції.

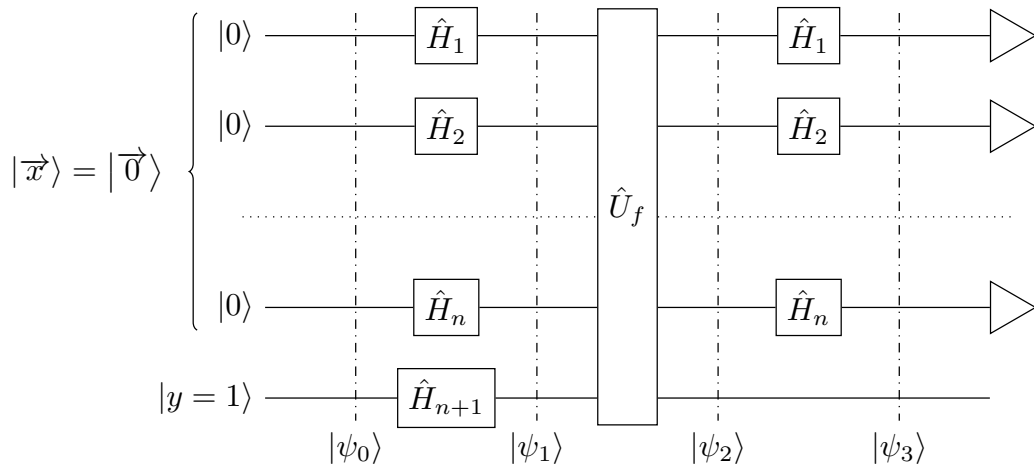


Рис. 5.2: Сема квантового алгоритму Дойча-Джози

5.2.1 Алгоритм Дойча-Джози

Переходимо тепер до формулювання задачі Дойча-Джози.

Нехай ми маємо чорну скриньку, в якій обчислюється функція $y = f(\vec{x})$, $\vec{x} \in \{0;1\}^n$, $y \in \{0;1\}$. Сама функція — невідома; відомо лише, що вона має глобальну властивість, тобто вона — або константа, або збалансована функція. Завдання полягає в тому, щоб побудувати такий алгоритм квантових обчислень, який шляхом однократного звернення до чорної скриньки визначає тип функції $f(\vec{x})$: чи є вона константа, чи — збалансована функція.

Побудуємо квантову схему потрібного алгоритму, див. Рис. 5.2.

Позначення квантових елементів аналогічні позначенням на схемі попереднього розділу. Трикутники в кінці схеми означають процес вимірювання в обчислювальному базисі над системою n кубітів.

Зі схеми безпосередньо видно, що регістр обчислювальної системи складається з $n + 1$ кубітів, n кубітів яких призначені для запису аргументу $|\vec{x}\rangle$, а $(n + 1)$ -й кубіт — для функції $f(\vec{x})$. Унітарна операція \hat{U}_f в чорній скриньці має той самий сенс, що і на попередній схемі. Тут відбувається обчислення невідомої функції $f(\vec{x})$ та операція $|\vec{x}\rangle \otimes |y\rangle \rightarrow |\vec{x}\rangle \otimes |y \oplus f(\vec{x})\rangle$.

Перед початком процедури квантових обчислень відбувається “ініціалізація регістра”, тобто приведення його в заданий початковий стан. Як видно зі схеми, вектор стану після ініціалізації має вигляд

$$|\psi_0\rangle = \underbrace{|00\dots 0\rangle}_{n \text{ кубітів}} \otimes |1\rangle = |\vec{0}\rangle \otimes |1\rangle.$$

Прослідкуємо за зміною вектора стану після проходження кожного наступного етапу. Згідно (5.1) та (5.6), маємо:

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \hat{H}^{\otimes n} \otimes \hat{H}_{n+1} |\psi_0\rangle = \hat{H}^{\otimes n} |\vec{0}\rangle \otimes \hat{H} |1\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{\vec{x} \in \{0;1\}^n} |\vec{x}\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle). \end{aligned} \quad (5.12)$$

Далі врахуємо, що в скриньці обчислюється $f(\vec{x})$ і виконується операція

$$\begin{aligned} \hat{U}_f |\vec{x}\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle) &= \frac{1}{\sqrt{2}} |\vec{x}\rangle \otimes \left[|0 \oplus f(\vec{x})\rangle - |1 \oplus f(\vec{x})\rangle \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} |\vec{x}\rangle \begin{cases} |0\rangle - |1\rangle, & f(\vec{x}) = 0 \\ |1\rangle - |0\rangle = -(|0\rangle - |1\rangle), & f(\vec{x}) = 1 \end{cases} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} |\vec{x}\rangle \otimes (-1)^{f(\vec{x})} (|0\rangle - |1\rangle) \\ &= (-1)^{f(\vec{x})} |\vec{x}\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle). \end{aligned}$$

Тоді

$$\begin{aligned} |\psi_2\rangle &= \hat{U}_f |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{\vec{x} \in \{0;1\}^n} \left[\hat{U}_f |\vec{x}\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle) \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{\vec{x} \in \{0;1\}^n} (-1)^{f(\vec{x})} |\vec{x}\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle). \end{aligned} \quad (5.13)$$

Далі, беручи до уваги (5.5), отримаємо:

$$\begin{aligned} |\psi_3\rangle &= \hat{H}^{\otimes n} |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{\vec{x}} (-1)^{f(\vec{x})} \left(\hat{H}^{\otimes n} |\vec{x}\rangle \right) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{\vec{x}} (-1)^{f(\vec{x})} \left[\frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{\vec{z}} (-1)^{\vec{z} \cdot \vec{x}} |\vec{z}\rangle \right] \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle). \end{aligned}$$

Остаточно:

$$|\psi_3\rangle = \sum_{\vec{z}} \left[\sum_{\vec{x}} \frac{1}{2^n} (-1)^{\vec{z} \cdot \vec{x} + f(\vec{x})} \right] |\vec{z}\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle) \quad (5.14)$$

— стан регістра перед процесом вимірювання.

Розглянемо варіанти можливих значень амплітуди, що стоїть в (5.14) перед базисним станом $|\vec{z} = \vec{0}\rangle = \underbrace{|00 \dots 0\rangle}_n$:

$$\sum_{\vec{x}} \frac{1}{2^n} (-1)^{\vec{z} \cdot \vec{x} + f(\vec{x})} \Big|_{\vec{z} = \vec{0}} = \sum_{\vec{x}} \frac{1}{2^n} (-1)^{f(\vec{x})}. \quad (5.15)$$

Припустимо тепер, що $f(\vec{x})$ є функцією константою. Тоді значення $f(\vec{x})$ або дорівнює 0, або 1 одночасно для всіх 2^n значень \vec{x} і, отже, всі доданки в (5.15) є однаковими з однаковими знаками, і їхня сума дорівнює ± 1 . Оскільки стан $|\psi_3\rangle$ є нормованим, і амплітуда при $|\vec{z}\rangle = |\vec{0}\rangle$ дорівнює ± 1 , то, очевидно, амплітуди при всіх інших базисних станах дорівнюють нулю. Отже, в даному випадку $|\psi_3\rangle = \pm |00 \dots 0\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$, і наступна процедура вимірювання n кубітів в обчислювальному базисі обов'язково дасть n класичних нулів $(00 \dots 0)$.

Розглянемо тепер значення амплітуди (5.15) при базисному стані $|\vec{z}\rangle = |\vec{0}\rangle$ у випадку, коли $f(\vec{x})$ — збалансована функція. Оскільки цього разу в (5.15) всі доданки за модулем однакові, а одна половина з них має знак “+”, а друга половина — “−”, то їхня сума дорівнюватиме нулю. Отже, в суперпозиції базисних станів у функції $|\psi_3\rangle$ буде відсутній доданок $|\vec{z}\rangle = |00 \dots 0\rangle$. Це означає, що в результаті вимірювання n -кубітового стану на виході схеми не можлива ситуація, коли всі n кубітів дають одночасно значення 0.

Висновок: якщо в результаті вимірювання n кубітів на виході схеми всі кубіти дають значення 0, то це означає, що $f(\vec{x})$ є функцією константою; якщо ж під час вимірювання отримується будь-яке інше значення (наприклад, $(00 \dots 1)$), то $f(\vec{x})$ — збалансована функція.

В даному алгоритмі відображається явище квантової інтерференції. Суть його полягає в тому, що для певної ситуації ($f(\vec{x})$ — функція константа) суперпозицією забезпечується максимальне значення амплітуди (“світла смуга”) окремого базисного стану, а інші базисні стани, відповідно, мають мінімальне значення амплітуди (“темна смуга”).

Розглянемо тепер алгоритм розв'язування задачі Дойча-Джози в класичному випадку. На класичному комп'ютері немає іншої можливості, окрім як послідовно, в довільному порядку, обчислювати раз за разом значення $f(\vec{x})$ для всіх значень аргументів \vec{x} . Якщо функція є збалансованою, то це виявиться, як тільки з'явиться перше обчислене її значення, що відрізнятиметься від попередніх значень. Із великою імовірністю це виявиться всього лише після декількох обчислень. Проте справа

виявляється значно гіршою, якщо функція є константою. Під час обчислення раз за разом будуть отримуватися однакові значення. Однак достеменно не можна буде стверджувати, чи $f(\vec{x})$ є функцією константою або збалансованою, доки не буде проведено обчислення функції для $N = \frac{2^n}{2} + 1 = 2^{n-1} + 1$ (більше половини) значень аргументу, що для достатньо великих n вимагає значних ресурсів. В той же час, як було показано вище, на квантовому комп'ютері ця задача розв'язується лише за “один запит.”

5.3 Квантовий алгоритм вимірювання парності

Базисні стани в обчислювальному базисі складаються з елементів, що можуть приймати значення 0 або 1, наприклад $|001011\dots 01\rangle$.

При розкладі довільного чистого стану за таким базисом, вектор стану можна представити у вигляді суперпозиції двох частин

$$|\psi\rangle = \alpha |\psi_0\rangle + \beta |\psi_1\rangle, \quad (5.16)$$

де в $|\psi_0\rangle$ базисні стани мають лише парне число одиниць, а в $|\psi_1\rangle$ — лише непарне їх число. Отже, $\alpha |\psi_0\rangle$ та $\beta |\psi_1\rangle$ умовно називають відповідно парною та непарною частинами вектора стану $|\psi\rangle$. Якщо вектори $|\psi\rangle$, $|\psi_0\rangle$ та $|\psi_1\rangle$ нормовані на одиницю, то $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

Приклад. Загальний вираз вектору стану трикубітової системи можна представити у вигляді

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= c_0 |000\rangle + c_1 |001\rangle + c_2 |010\rangle + c_3 |011\rangle \\ &\quad + c_4 |100\rangle + c_5 |101\rangle + c_6 |110\rangle + c_7 |111\rangle \\ &= \alpha |\psi_0\rangle + \beta |\psi_1\rangle, \end{aligned} \quad (5.17)$$

де

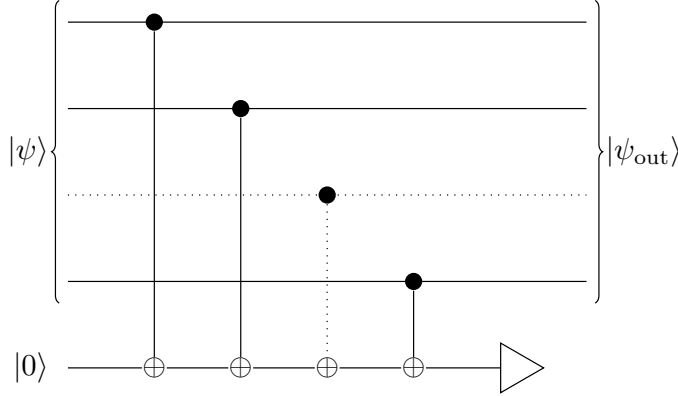
$$\alpha |\psi_0\rangle = c_0 |000\rangle + c_3 |011\rangle + c_5 |101\rangle + c_6 |110\rangle \quad (5.18)$$

— парна ненормована частина стану $|\psi\rangle$,

$$\beta |\psi_1\rangle = c_1 |001\rangle + c_2 |010\rangle + c_4 |100\rangle + c_7 |111\rangle \quad (5.19)$$

— непарна ненормована частина стану $|\psi\rangle$.

Розглянемо тепер алгоритм і квантову схему відокремлення парної або непарної частини вектора стану в довільній n -кубітній системі, див. Рис. 5.3.

Рис. 5.3: Схема вимірювання парності n -кубітового стану $|\psi\rangle$

На n -кубітовий регістр спочатку завантажується стан $|\psi\rangle$, а на $(n+1)$ -й кубіт — стан $|0\rangle$. Отже, початковий стан $(n+1)$ -кубітової системи має вигляд:

$$|\chi\rangle = |\psi\rangle \otimes |0\rangle = c_0 \underbrace{|00 \dots 00\rangle}_{n \text{ кубітів}} \otimes |0\rangle + c_1 |00 \dots 01\rangle \otimes |0\rangle + c_2 |00 \dots 10\rangle \otimes |0\rangle + \dots + c_{2^n-1} |11 \dots 11\rangle \otimes |0\rangle. \quad (5.20)$$

Процес, що відбувається за даною схемою, є лінійною операцією. Згідно схеми, над початковим станом $|\chi\rangle$ $(n+1)$ -кубітової системи виконується операція перетворення $|\chi\rangle \rightarrow |\chi'\rangle$:

$$|\chi'\rangle = \widehat{CNOT}_{n,n+1} \widehat{CNOT}_{n-1,n+1} \dots \widehat{CNOT}_{2,n+1} \widehat{CNOT}_{1,n+1} |\chi\rangle.$$

Внаслідок лінійності даної операції вона послідовно виконується над кожним доданком розкладу (5.20).

Розглянемо результат дії даної операції на окремий доданок з (5.20). Якщо перший кубіт у ньому має значення $|0\rangle$, то стан $(n+1)$ -го кубіта під дією оператора $\widehat{CNOT}_{1,n+1}$ не змінюється, тобто залишається у стані $|0\rangle$. Якщо ж перший кубіт знаходиться у стані $|1\rangle$, то стан $(n+1)$ -го кубіта змінюється на протилежний: $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$. Далі, стан $n+1$ -го кубіта знову змінюється на протилежний, лише якщо стан другого кубіта є $|1\rangle$. Отже, очевидно, що після дії всіх операторів $\widehat{CNOT}_{i,n+1}$ кінцевий стан $(n+1)$ -го кубіта буде $|0\rangle$, якщо число одиниць в n -кубітовому базисному стані є парне число, та $|1\rangle$, якщо число одиниць — не парне. Тобто, після виконання всіх операцій $\widehat{CNOT}_{i,n+1}$ початковий стан $|\chi\rangle$ перетворюється в стан

$$|\chi'\rangle = \alpha |\psi_0\rangle \otimes |0\rangle + \beta |\psi_1\rangle \otimes |1\rangle, \quad (5.21)$$

де $\alpha|\psi_0\rangle$ — парна (ненормована) частина стану $|\psi\rangle$, а $\beta|\psi_1\rangle$ — непарна (також ненормована) частина цього стану.

Остання операція, вказана на схемі — це операція вимірювання стану $(n+1)$ -го кубіта. Згідно (5.21), якщо результатом даного вимірювання є число 0, то n -кубітовий стан перетворюється як $|\psi\rangle \rightarrow |\psi_0\rangle$; якщо ж результатом вимірювання є число 1 — то як $|\psi\rangle \rightarrow |\psi_1\rangle$.

Отже, після завершення всіх операцій схеми ми отримаємо або парний стан $|\psi_0\rangle$ з імовірністю $|\alpha|^2$, або непарний стан $|\psi_1\rangle$ з імовірністю $|\beta|^2$.

Зауважимо, що при одноразовому застосуванні процедури даної схеми кінцевий результат є випадковою величиною, тобто поява станів $|\psi_0\rangle$ або $|\psi_1\rangle$ відбувається за абсолютно випадковим правилом (згідно положень квантової механіки). Якщо для подальших операцій потрібен конкретний стан $|\psi_0\rangle$ або $|\psi_1\rangle$, то слід від самого початку повторити операції схеми, доки під час вимірювання стану $(n+1)$ -го кубіта ми не отримаємо 0 (якщо потрібно отримати $|\psi_0\rangle$) або 1 (якщо потрібно отримати $|\psi_1\rangle$).

5.4 Квантове (дискретне) перетворення Фур'є

Квантове перетворення Фур'є — це деяке дискретне унітарне перетворення векторів станів (хвильових функцій), що часто застосовується у квантовій механіці. Характерною рисою унітарних перетворень є збереження властивостей та змісту об'єктів перетворення. Мотивацією для здійснення таких перетворень є суттєве спрощення виду операцій та алгоритмів у новому, перетвореному просторі. Інколи виявляється, що у перетвореному просторі задача зводиться до іншої задачі, розв'язок якої є відомим.

Численні операції переходу від представлення одних фізичних величин до представлення іншого набору величин є також прикладом унітарних перетворень. Зокрема, перехід від координатного до імпульсного представлення, а також зворотній перехід, здійснюються саме перетворенням Фур'є.

Виявляється, що квантове перетворення Фур'є часто є складовою інших алгоритмів у квантових обчисленнях та квантовій криптографії.

Алгоритм квантового перетворення Фур'є будується за аналогією з алгоритмом класичного дискретного перетворення Фур'є.

5.4.1 Класичне дискретне перетворення Фур'є

У класичному варіанті, як правило, дискретне перетворення Фур'є здійснюється над N -вимірним вектором з комплексними компонентами

x_0, x_1, \dots, x_{N-1} , де N — фіксоване ціле число. На виході перетворення отримується вектор з компонентами y_0, y_1, \dots, y_{N-1} , що визначається формулою:

$$y_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} \exp\left(i \frac{2\pi k j}{N}\right) x_j. \quad (5.22)$$

Даний вираз можна також переписати у вигляді:

$$y_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} (q_k)^j x_j, \text{ де } q_k = \exp\left(i \frac{2\pi k}{N}\right), \quad k = \overline{0, N-1}, \quad (5.23)$$

або

$$y_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} r^{kj} x_j, \text{ де } r = \exp\left(i \frac{2\pi}{N}\right). \quad (5.24)$$

Наприклад, для чотиривимірного ($N = 4$) вектора $\vec{X} = \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$ ре-

зультатом перетворення Фур'є є вектор

$$\begin{aligned} \vec{Y} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} x_0 + x_1 + x_2 + x_3 \\ x_0 + x_1 e^{i\pi/2} + x_2 e^{i\pi} + x_3 e^{i3\pi/2} \\ x_0 + x_1 e^{i\pi} + x_2 e^{i2\pi} + x_3 e^{i3\pi} \\ x_0 + x_1 e^{i3\pi/2} + x_2 e^{i2\pi} + x_3 e^{i9\pi/2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} x_0 + x_1 + x_2 + x_3 \\ x_0 + ix_1 - x_2 - ix_3 \\ x_0 - x_1 + x_2 - x_3 \\ x_0 - ix_1 + x_2 + ix_3 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (5.25)$$

тобто маємо $\vec{Y} = \hat{F} \vec{X}$, де матриця Фур'є \hat{F} має вигляд:

$$\hat{F} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & i & -1 & -i \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -i & -1 & i \end{pmatrix}. \quad (5.26)$$

В унітарності матриці \hat{F} можна переконатися простою перевіркою співвідношення: $\hat{F} \hat{F}^\dagger = \hat{F}^\dagger \hat{F} = \hat{I}$, де \hat{I} — одинична матриця.

5.4.2 Квантове перетворення Фур'є

Перейдемо тепер безпосередньо до квантового перетворення Фур'є.

Нехай в N -вимірному просторі Гільберта заданий базис

$$\{|j\rangle\} = \{|0\rangle, |1\rangle, \dots, |N-1\rangle\}.$$

Квантове перетворення Фур'є — це лінійний унітарний оператор, що перетворює ортонормовані базисні стани $|j\rangle$ у лінійну суперпозицію

$$|j\rangle \rightarrow \hat{F}|j\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} \exp\left(i\frac{2\pi kj}{N}\right) |k\rangle, \quad (5.27)$$

де $\{|k\rangle\} = \{|0\rangle, |1\rangle, \dots, |N-1\rangle\}$ — той самий базис, що і $\{|j\rangle\}$.

При цьому довільний вектор $|x\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} x_j |j\rangle$ перетворюється у вектор $|x'\rangle = \sum_{k=0}^{N-1} y_k |k\rangle$ за правилом:

$$\begin{aligned} |x'\rangle &= \hat{F}|x\rangle = \hat{F} \sum_{j=0}^{N-1} x_j |j\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} x_j \hat{F}|j\rangle \\ &= \sum_{j=0}^{N-1} x_j \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} \exp\left(i\frac{2\pi kj}{N}\right) |k\rangle \\ &= \sum_{k=0}^{N-1} \left[\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} \exp\left(i\frac{2\pi kj}{N}\right) x_j \right] |k\rangle \\ &= \sum_{k=0}^{N-1} y_k |k\rangle, \end{aligned} \quad (5.28)$$

де амплітуди $y_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} \exp(i2\pi kj/N) x_j$, що повністю співпадає з виразом (5.22) для класичного перетворення Фур'є. Як і в класичному випадку, амплітуди можна переписати у вигляді

$$y_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} (q_k)^j x_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} (r)^{kj} x_j,$$

де $q_k = \exp(i2\pi k/N)$, $r = \exp(i2\pi/N)$, тобто $q_k = r^k$.

В якості прикладу розглянемо квантове перетворення Фур'є базисних станів обчисленого (стандартного) базису трикубітового простору станів. Загальне число базисних станів у даному випадку дорівнює $N = 2^3 = 8$.

Усі базисні стани попередньо занумеруємо наступним чином:

$$\begin{array}{llll} |000\rangle \rightarrow |0\rangle & |001\rangle \rightarrow |1\rangle & |010\rangle \rightarrow |2\rangle & |011\rangle \rightarrow |3\rangle \\ |100\rangle \rightarrow |4\rangle & |101\rangle \rightarrow |5\rangle & |110\rangle \rightarrow |6\rangle & |111\rangle \rightarrow |7\rangle. \end{array}$$

Тоді за формулою (5.27) отримаємо

$$\begin{aligned} \hat{F}|0\rangle &= \hat{F}|000\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \sum_{k=0}^{N-1} |k\rangle \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(|000\rangle + |001\rangle + |010\rangle + |011\rangle \right. \\ &\quad \left. + |100\rangle + |101\rangle + |110\rangle + |111\rangle \right) \\ \hat{F}|1\rangle &= \hat{F}|001\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{i\pi k/4} |k\rangle \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(|000\rangle + e^{i\pi/4} |001\rangle + i |010\rangle - e^{-i\pi/4} |011\rangle \right. \\ &\quad \left. - |100\rangle - e^{i\pi/4} |101\rangle - i |110\rangle + e^{-i\pi/4} |111\rangle \right) \\ \hat{F}|2\rangle &= \hat{F}|010\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \sum_{k=0}^{N-1} i^k |k\rangle \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(|000\rangle + i |001\rangle - |010\rangle - i |011\rangle \right. \\ &\quad \left. + |100\rangle + i |101\rangle - |110\rangle - i |111\rangle \right) \\ \hat{F}|3\rangle &= \hat{F}|011\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \sum_{k=0}^{N-1} (-e^{-i\pi/4})^k |k\rangle = \dots \\ \hat{F}|4\rangle &= \hat{F}|100\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \sum_{k=0}^{N-1} (-1)^k |k\rangle = \dots \\ \hat{F}|5\rangle &= \hat{F}|101\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \sum_{k=0}^{N-1} (-e^{i\pi/4})^k |k\rangle = \dots \\ \hat{F}|6\rangle &= \hat{F}|110\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \sum_{k=0}^{N-1} (-i)^k |k\rangle = \dots \\ \hat{F}|7\rangle &= \hat{F}|111\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}} \sum_{k=0}^{N-1} (e^{-i\pi/4})^k |k\rangle = \dots \end{aligned}$$

5.4.3 Двійкова та десяткова система: цілі числа та дробу

Попередньо введемо такі позначення:

- n — число кубітів у системі.
- N — число базисних станів у гільбертовому просторі системи n кубітів, $N = 2^n$.
- $|j_i\rangle, |k_i\rangle$ — стани окремих кубітів з номером i у впорядкованій n -кубітній системі.
- j, k — десяткові номери базисних станів $|j\rangle, |k\rangle$. Числа j, k можуть приймати значення в межах від 0 до $N = 2^{n-1}$.

Числам j та k присвоєно значення за наступним правилом:

$$\begin{aligned} j &= 0 \text{ (або } k = 0) \text{ для стану } |00 \dots 00\rangle \\ j &= 1 \text{ для стану } |00 \dots 01\rangle \\ j &= 2 \text{ для стану } |00 \dots 10\rangle \\ &\dots \\ j &= N - 1 = 2^n - 1 \text{ для стану } |11 \dots 11\rangle \end{aligned}$$

Отже, всі базисні стани можуть бути визначені десятковим або двійковим номером:

$$|j\rangle = |j_1 j_2 \dots j_{n-1} j_n\rangle, \quad |k\rangle = |k_1 k_2 \dots k_{n-1} k_n\rangle.$$

Значення чисел j та k можна представити у вигляді:

$$\begin{aligned} j &= j_1 \cdot 2^{n-1} + j_2 \cdot 2^{n-2} + \dots + j_{n-1} \cdot 2^1 + j_n \cdot 2^0 \\ k &= k_1 \cdot 2^{n-1} + k_2 \cdot 2^{n-2} + \dots + k_{n-1} \cdot 2^1 + k_n \cdot 2^0. \end{aligned} \quad (5.29)$$

Звідси

$$\frac{k}{2^n} = \frac{k_1}{2} + \frac{k_2}{2^2} + \dots + \frac{k_{n-1}}{2^{n-1}} + \frac{k_n}{2^n}.$$

Наприклад, 4-кубітовому стану $|1011\rangle$ відповідає десятковий номер $j = 1 \cdot 2^3 + 0 \cdot 2^2 + 1 \cdot 2^1 + 1 \cdot 2^0 = 11$, тобто

$$|j = 11\rangle \equiv |j_1 j_2 j_3 j_4\rangle = |1011\rangle.$$

Введемо тепер для двійкової системи чисел аналог десяткового дробу. Приміром, для десяткового дробу $0.1011 = \frac{1}{10^1} + \frac{0}{10^2} + \frac{1}{10^3} + \frac{1}{10^4}$. Так само

будемо вважати, що у двійковій системі $0.1011 = \frac{1}{2^1} + \frac{0}{2^2} + \frac{1}{2^3} + \frac{1}{2^4}$, або в загальному випадку

$$\begin{aligned} 0.j_1j_2 \dots j_n &\equiv \frac{j_1}{2^1} + \frac{j_2}{2^2} + \dots + \frac{j_n}{2^n} = \sum_{\ell=1}^n \frac{j_\ell}{2^\ell} = \frac{j}{2^n} \\ 0.k_1k_2 \dots k_n &\equiv \frac{k_1}{2^1} + \frac{k_2}{2^2} + \dots + \frac{k_n}{2^n} = \sum_{\ell=1}^n \frac{k_\ell}{2^\ell} = \frac{k}{2^n}. \end{aligned} \quad (5.30)$$

Отримаємо деякі допоміжні співвідношення, за допомогою яких можна побудувати алгоритм перетворення Фур'є на квантовому комп'ютері. Враховуючи (5.29), запишемо

$$\begin{aligned} \frac{j}{2^\ell} &= j_1 \cdot 2^{n-\ell-1} + j_2 \cdot 2^{n-\ell-2} + \dots + j_n \cdot 2^{-\ell} = \sum_{s=1}^n j_s \cdot 2^{n-\ell-s} \\ &= \sum_{s=1}^{n-\ell} j_s \cdot 2^{n-\ell-s} + \sum_{s=n-\ell+1}^n j_s \cdot 2^{n-\ell-s} = M_\ell + R_\ell, \quad \ell = \overline{1, n}, \end{aligned}$$

де $M_\ell = \sum_{s=1}^{n-\ell} j_s \cdot 2^{n-\ell-s}$ — ціле число (при $\ell = n$, вважаємо $M_n = 0$). Як наслідок, маємо:

$$\begin{aligned} \exp\left(i \frac{2\pi j}{2^\ell}\right) &= \exp[i2\pi (M_\ell + R_\ell)] \\ &= \exp(i2\pi M_\ell) \exp(i2\pi R_\ell) = \exp(i2\pi R_\ell), \end{aligned} \quad (5.31)$$

$R_\ell = \sum_{s=n-\ell+1}^n j_s \cdot 2^{n-\ell-s}$. Звідси:

$$\begin{aligned} R_{\ell=1} &= \sum_{s=n}^n j_s \cdot 2^{n-1-s} = j_n \cdot 2^{-1} = \frac{j_n}{2} = 0.j_n \\ R_{\ell=2} &= \sum_{s=n-1}^n j_s \cdot 2^{n-2-s} = j_{n-1} \cdot 2^{-1} + j_n \cdot 2^{-2} \\ &= \frac{j_{n-1}}{2} + \frac{j_n}{2^2} = 0.j_{n-1}j_n \end{aligned} \quad (5.32)$$

$$R_{\ell=3} = \sum_{s=n-2}^n j_s \cdot 2^{n-2-s} = \dots = \frac{j_{n-2}}{2} + \frac{j_{n-1}}{2^2} + \frac{j_n}{2^3} = 0.j_{n-2}j_{n-1}j_n.$$

В загальному випадку ($1 \leq \ell \leq n$):

$$\begin{aligned} R_\ell &= \sum_{s=n-\ell+1}^n j_s \cdot 2^{n-\ell-s} = \frac{j_{n-\ell+1}}{2} + \frac{j_{n-\ell+2}}{2^2} + \dots + \frac{j_n}{2^\ell} \\ &= 0.j_{n-\ell+1}j_{n-\ell+2} \dots j_{n-1}j_n. \end{aligned} \quad (5.33)$$

Зокрема, для $\ell = n$ маємо $R_{\ell=n} = 0.j_1j_2 \dots j_n$.

5.4.4 Квантове перетворення Фур'є базисних станів обчислювального базису для системи n кубітів

Формулу перетворення базисних станів (5.27) приведемо до виду, що дозволяє застосувати алгоритм квантового перетворення Фур'є. Виходячи з початкового виразу (5.27)

$$\begin{aligned}\hat{F}|j\rangle &= \hat{F}|j_1 j_2 \dots j_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} \exp\left(i \frac{2\pi j k}{N}\right) |k\rangle \\ &= \frac{1}{2^{n/2}} \sum_{k=0}^{2^n-1} \exp\left(i \frac{2\pi j k}{2^n}\right) |k\rangle, \quad |k\rangle = |k_1 k_2 \dots k_n\rangle,\end{aligned}$$

покажемо, що формулу перетворення Фур'є базисних станів можна привести до вигляду

$$\begin{aligned}\hat{F}|j\rangle &= \frac{1}{2^{n/2}} (|0\rangle + e^{i2\pi 0.j_n} |1\rangle) \otimes (|0\rangle + e^{i2\pi 0.j_{n-1}j_n} |1\rangle) \otimes \dots \\ &\quad \otimes (|0\rangle + e^{i2\pi 0.j_1 j_2 \dots j_n} |1\rangle),\end{aligned}$$

де

$$0.j_n = \frac{j_n}{2}, \quad 0.j_{n-1}j_n = \frac{j_{n-1}}{2} + \frac{j_n}{2^2}, \quad 0.j_1 j_2 \dots j_n = \frac{j_1}{2} + \frac{j_2}{2^2} + \dots + \frac{j_n}{2^n},$$

а стани $|0\rangle$ та $|1\rangle$ у перших дужках відносяться до першого кубіту, в другій парі дужок — до другого кубіту, в останній парі дужок — до останнього кубіту.

Доведення. Виконаємо ланцюжок перетворень. Врахуємо (5.29):

$$\frac{k}{2^n} = \frac{k_1}{2} + \frac{k_2}{2^2} + \dots + \frac{k_n}{2^n} = \sum_{\ell=1}^n \frac{k_\ell}{2^\ell}.$$

Тоді:

$$\begin{aligned}\hat{F}|j\rangle &= \frac{1}{2^{n/2}} \sum_{k=0}^{2^n-1} \exp\left(i \frac{2\pi j k}{2^n}\right) |k\rangle \\ &= \frac{1}{2^{n/2}} \sum_{k=0}^{2^n-1} \exp\left(i 2\pi j \sum_{\ell=1}^n \frac{k_\ell}{2^\ell}\right) |k_1 k_2 \dots k_n\rangle \\ &= \frac{1}{2^{n/2}} \sum_{k_1=0}^1 \sum_{k_2=0}^1 \dots \sum_{k_n=0}^1 \exp\left(i 2\pi j \sum_{\ell=1}^n \frac{k_\ell}{2^\ell}\right) |k_1\rangle \otimes |k_2\rangle \otimes \dots \otimes |k_n\rangle\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2^{n/2}} \left[\sum_{k_1=0}^1 \exp \left(i2\pi j \frac{k_1}{2} \right) |k_1\rangle \otimes \sum_{k_2=0}^1 \exp \left(i2\pi j \frac{k_2}{2^2} \right) |k_2\rangle \otimes \dots \right. \\
&\quad \left. \otimes \sum_{k_n=0}^1 \exp \left(i2\pi j \frac{k_n}{2^n} \right) |k_n\rangle \right] \\
&= \frac{1}{2^{n/2}} (|0\rangle + e^{i2\pi j/2} |1\rangle) \otimes (|0\rangle + e^{i2\pi j/2^2} |1\rangle) \otimes \dots \otimes (|0\rangle + e^{i2\pi j/2^n} |1\rangle).
\end{aligned}$$

З (5.32) та (5.33) маємо: $\exp(i2\pi \frac{j}{2^\ell}) = \exp(i2\pi R_\ell)$, де $R_\ell = 0.j_{n-\ell+1}j_{n-\ell+2} \dots j_n$.
Отже: $R_1 = 0.j_n$, $R_2 = 0.j_{n-1}j_n$, \dots , $R_n = 0.j_1j_2 \dots j_n$.

Остаточно маємо:

$$\begin{aligned}
\hat{F} |j\rangle \equiv \hat{F} |j_1j_2 \dots j_n\rangle &= \frac{1}{2^{n/2}} \left(|0\rangle + e^{i2\pi 0.j_n} |1\rangle \right)_{\ell=1} \\
&\otimes \left(|0\rangle + e^{i2\pi 0.j_{n-1}j_n} |1\rangle \right)_{\ell=2} \otimes \dots \\
&\otimes \left(|0\rangle + e^{i2\pi 0.j_1j_2 \dots j_n} |1\rangle \right)_{\ell=n}.
\end{aligned} \tag{5.34}$$

□

5.4.5 Квантова схема перетворення Фур'є n -кубітових квантових станів

Розглянемо квантову схему перетворення Фур'є базисних станів обчислювального (стандартного) базису в n -кубітовому гільбертовому просторі $|j\rangle = |j_1j_2 \dots j_n\rangle$.

Формулу (5.34) перетворення Фур'є базисних станів представимо у вигляді:

$$\hat{F} |j\rangle = \frac{1}{2^{n/2}} \left(|0\rangle + e^{i2\pi x_1} |1\rangle \right) \otimes \left(|0\rangle + e^{i2\pi x_2} |1\rangle \right) \otimes \dots \otimes \left(|0\rangle + e^{i2\pi x_n} |1\rangle \right),$$

де

$$\begin{aligned}
x_1 &= \frac{j_1}{2} = 0.j_1, & x_2 &= \frac{j_{n-1}}{2} + \frac{j_n}{2^2} = 0.j_{n-1}j_n, \dots, \\
x_\ell &= \sum_{m=1}^{\ell} \frac{j_{n-\ell+m}}{2^m} = \frac{j_{n-\ell+1}}{2} + \frac{j_{n-\ell+2}}{2^2} + \dots + \frac{j_n}{2^\ell} = 0.j_{n-\ell+1}j_{n-\ell+2} \dots j_n, \dots, \\
x_n &= \sum_{m=1}^n \frac{j_m}{2^m} = 0.j_1j_2 \dots j_n.
\end{aligned}$$

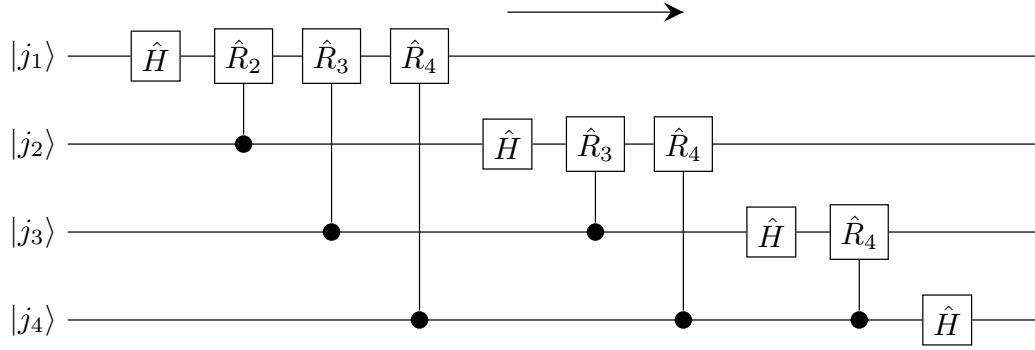


Рис. 5.4: Схема квантового перетворення Фур'є на чотирьох кубітах

Позначимо через \hat{R}_k однокубітовий унітарний оператор (матриця 2×2):

$$\hat{R}_k = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i2\pi/2^k} \end{pmatrix},$$

результат дії якого на довільний квантовий стан кубіта визначається рівністю:

$$\hat{R}_k (\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle) = \alpha |0\rangle + \beta e^{i2\pi/2^k} |1\rangle.$$

Схему квантового перетворення Фур'є розглянемо на прикладі перетворення базисних станів системи чотирьох кубітів, див. Рис. 5.4.

На вхід схеми подається стан $|j\rangle = |j_1 j_2 j_3 j_4\rangle$. Через \hat{H} позначено перетворення Адамара відповідного кубіта в схемі. Елемент

має зміст “керована операція \hat{R}_2 ”, за аналогією з керованою операцією \widehat{CNOT}_{21} , тобто:

- якщо $j_2 = 0$, то операція \hat{R}_2 над першим кубітом не виконується;
- якщо $j_2 = 1$, то операція \hat{R}_2 над першим кубітом виконується.

Аналогічним чином спрацьовує елемент

:

- якщо $j_3 = 0$, то операція \hat{R}_3 над першим кубітом не виконується;
- якщо $j_3 = 1$, то операція \hat{R}_3 над першим кубітом виконується.

Подібним же чином діє й решта елементів \hat{R}_k у схемі, див. Рис. 5.4.

Розглянемо тепер, як змінюється чотирикубітовий базисний стан при проходженні його згідно схеми зліва направо.

На вхід схеми подається стан $|j\rangle = |j_1\rangle \otimes |j_2\rangle \otimes |j_3\rangle \otimes |j_4\rangle$. Прослідкуємо зміну стану першого кубіту в результаті дії операторів, що вказані на схемі. Початковий стан цього кубіту на вході позначимо як $|\chi_0\rangle \equiv |j_1\rangle$.

Після проходження оператора Адамара \hat{H} отримаємо $|\chi_1\rangle = \hat{H}|\chi_0\rangle = \hat{H}|j_1\rangle$. Якщо $j_1 = 0$, то $|\chi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$, а якщо $j_1 = 1$, то $|\chi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$. Обидва ці випадки можна записати одним виразом

$$|\chi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi j_1/2}|1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi 0 \cdot j_1}|1\rangle),$$

оскільки

$$e^{i2\pi j_1/2} = \begin{cases} 1, & \text{якщо } j_1 = 0 \\ -1, & \text{якщо } j_1 = 1 \end{cases}.$$

Стан $|\chi_1\rangle$ можна також представити у вигляді вектора-стовпчика

$$|\chi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i2\pi 0 \cdot j_1} \end{pmatrix}.$$

Після проходження наступної операції стан першого кубіту можна представити у вигляді

$$|\chi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|0\rangle + e^{i2\pi(j_1/2+j_2/4)}|1\rangle] = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi 0 \cdot j_1 j_2}|1\rangle). \quad (5.35)$$

Дійсно, якщо $j_2 = 0$, то операція \hat{R}_2 над першим кубітом не виконується, і стан першого кубіта не змінюється:

$$|\chi_2\rangle = |\chi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi j_1/2}|1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi 0 \cdot j_1}|1\rangle).$$

Але оскільки $j_2 = 0$, то $0 \cdot j_1 = \frac{j_1}{2} + \frac{0}{2^2} = \frac{j_1}{2} + \frac{j_2}{2^2} = 0 \cdot j_1 j_2$.

Якщо ж $j_2 = 1$, то

$$\begin{aligned} |\chi_2\rangle &= \hat{R}_2 |\chi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i2\pi/2^2} \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i2\pi 0 \cdot j_1} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i2\pi(0 \cdot j_1 + 1/2^2)} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i2\pi(j_1/2+j_2/2^2)} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i2\pi 0 \cdot j_1 j_2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi 0 \cdot j_1 j_2}|1\rangle). \end{aligned}$$

Отже, незалежно від значення j_2 , на даному етапі стан першого кубіту описується виразом (5.35).

Міркуючи аналогічним чином, прийдемо до висновку, що, незалежно від значення $j_3 = \{0, 1\}$, перший кубіт після проходження наступного елементу схеми виявиться у стані

$$|\chi_3^1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + e^{i2\pi 0 \cdot j_1 j_2 j_3} |1\rangle),$$

а остаточний стан першого кубіту на виході схеми:

$$|\chi^1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + e^{i2\pi 0 \cdot j_1 j_2 j_3 j_4} |1\rangle).$$

Так само на виході схеми другий кубіт буде в стані

$$|\chi^2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + e^{i2\pi 0 \cdot j_2 j_3 j_4} |1\rangle),$$

третій — у стані

$$|\chi^3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + e^{i2\pi 0 \cdot j_3 j_4} |1\rangle),$$

а четвертий — у стані

$$|\chi^4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + e^{i2\pi 0 \cdot j_4} |1\rangle).$$

Отже, на виході схеми чотирикубітний стан матиме вигляд

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2^2} (|0\rangle + e^{i2\pi 0 \cdot j_1 j_2 j_3 j_4} |1\rangle) \otimes (|0\rangle + e^{i2\pi 0 \cdot j_2 j_3 j_4} |1\rangle) \otimes (|0\rangle + e^{i2\pi 0 \cdot j_3 j_4} |1\rangle) \otimes (|0\rangle + e^{i2\pi 0 \cdot j_4} |1\rangle). \quad (5.36)$$

Порівнюючи (5.36) з потрібним виразом (5.34), який має бути в результаті перетворення Фур'є стану $|j_1 j_2 j_3 j_4\rangle$, бачимо, що в (5.36) стани кубітів записані в зворотньому порядку. Для того, щоб на виході схеми отримати перетворення Фур'є саме стану $|j_1 j_2 j_3 j_4\rangle$, слід **на вхід схеми подати стан $|j_4 j_3 j_2 j_1\rangle$. — замінити на після перетворення переставити кубіти в регістрі місцями** Перестановку станів кубітів можна здійснити, наприклад, послідовною перестановкою пар кубітів за допомогою наступної схеми, що складається з трьох операторів \widehat{CNOT} , див. Рис. 5.5. Дана схема переводить

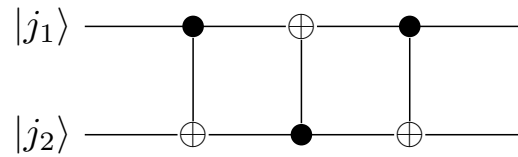
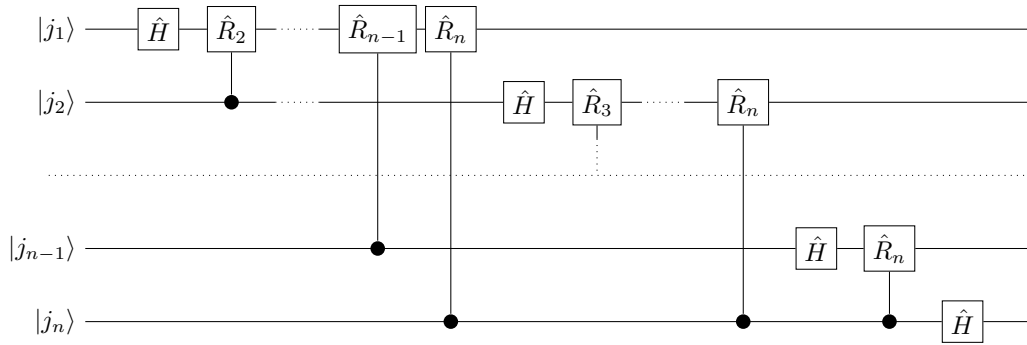


Рис. 5.5: Схема перестановки двох кубітів

Рис. 5.6: Схема квантового перетворення Фур'є на n кубітах

двокубітовий стан $|j_1 j_2\rangle$ у стан $|j_2 j_1\rangle$.

Отже, ми розглянули перетворення Фур'є базисних станів на прикладі 4-кубітової системи. Узагальнену схему на випадок n -кубітової системи з довільним значенням n можна представити у вигляді схеми, що зображена на Рис. 5.6.

Внаслідок того, що перетворення Фур'є є лінійним оператором, то перетворення довільного стану n -кубітової системи $|\psi\rangle$ можна представити у вигляді

$$\hat{F} |\psi\rangle = \hat{F} \sum_{j=1}^{2^n} \alpha_j |j\rangle = \sum_{j=1}^{2^n} \alpha_j \hat{F} |j\rangle.$$

5.4.6 Задача. Довести унітарність квантового перетворення Фур'є

Доведення. З формули перетворення Фур'є базисних станів

$$\hat{F} |j\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{i2\pi jk/N} |k\rangle$$

випливає, що матриця перетворення має вигляд

$$U_{jk} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i2\pi jk/N}.$$

Для того, щоб матриця \hat{U} була унітарна, необхідно і достатньо виконання рівностей:

$$\hat{U} \hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{I}, \quad (5.37)$$

де \hat{I} — одинична матриця.

Матричні елементи $(\hat{U}\hat{U}^\dagger)_{js}$ добутку двох матриць представляються у вигляді:

$$(\hat{U}\hat{U}^\dagger)_{js} = \frac{1}{N} \sum_k e^{i2\pi jk/N} e^{-i2\pi ks/N} = \frac{1}{N} \sum_k e^{i2\pi(j-s)k/N}.$$

Для діагональних елементів добутку маємо $j = s$, і $\frac{1}{N} \sum_k 1 = 1$. Для недіагональних елементів $j \neq s$, $j - s = m \neq 0$ маємо:

$$(\hat{U}\hat{U}^\dagger)_{js} = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} e^{i2\pi mk/N} = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} (e^{i2\pi m/N})^k = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} q^k,$$

де $q = e^{i2\pi m/N}$, $m \neq 0$.

Вираз $\sum_{k=0}^{N-1} q^k$ є скінченною сумою геометричної прогресії із знаменником прогресії q . Отже,

$$\sum_{k=0}^{N-1} q^k = \frac{1 - q^N}{1 - q} = \frac{1 - e^{i2\pi m}}{1 - e^{i2\pi m/N}} = \frac{1 - 1}{1 - e^{i2\pi m/N}} = 0.$$

Тут враховано, що знаменник дробу не може дорівнювати нулю, оскільки m може приймати значення в межах $m = \overline{1, N-1}$, $m \neq 0$.

Отже, всі діагональні елементи добутку $\hat{U}\hat{U}^\dagger$ дорівнюють одиниці, а всі недіагональні — нулю, тобто рівність (5.37) має місце, і матриця квантового перетворення Фур'є — це унітарна матриця. \square

Розділ 6

Повнота квантової механіки

6.1 Парадокс Ейнштейна-Подольського-Розена (ЕПР-парадокс)

Основи квантової теорії були закладені світовою спільнотою фізиків до початку 30х років XX століття. Атомна модель Нільса Бора, співвідношення невизначеностей Гейзенберга, відкриття спіну електрона Уленбеком і Гоудсмітом, формулювання принципу Паулі та рівняння Шредінгера стали наріжними каменями нової науки — квантової механіки. У 1932 р. фон Нейман, будучи видатним математиком, підбив підсумки зусиль фізиків, сформулювавши квантову механіку у вигляді строгої аксіоматичної теорії. Подальший розвиток такої теорії передбачає її застосування до конкретних, все більш складних, фізичних об'єктів.

Однак, незважаючи на формальне завершення побудови основ квантової механіки, гарячі дискусії навколо *тлумачення* її положень не вщухали, а навпаки, розгорталися з новою силою. Ще від початку 20х років XX сторіття дискусії велися навколо понять корпускулярно-хвильового дуалізму, принципу доповненості Нільса Бора, статистичного характеру квантової механіки, закону збереження енергії в мікропроцесах тощо. Вчені того періоду поділилися на дві групи із несумісними поглядами на тлумачення квантової теорії. Одну точку зору відстоювали вчені на чолі з Альбертом Ейнштейном, другу групу з протилежними поглядами очолював Нільс Бор. Обидва видатні дослідники вже були лауреатами Нобелівської премії, мали в науковому світі значний авторитет та гарячий темперамент під час дискусій. Все це сприяло постійній увазі фізиків всіх країн до теми дискусій.

Основні розбіжності поглядів Ейнштейна та Бора стосуються *тлумачення* поняття процесу вимірювання у квантовій теорії, змісту та дже-

рела статистичного характеру результатів вимірювання, а з появою рівняння Шредінгера — фізичного змісту хвильової функції, а згодом вже — і взагалі до тлумачення квантової механіки як науки. Парадоксально, навіть автор рівняння Шредінгера, який був прибічником поглядів Ейнштейна, не розумів змісту хвильової функції. Вольфганг Паулі, який був найближчим соратником Нільса Бора, називав інтерпретацію Ервіна Шредінгера щодо хвильової функції “Цюрихською єрессю” (Шредінгер мешкав та працював на той час у Цюриху).

Після багаторічних дискусій з Нільсом Бором, Альберт Ейнштейн разом з колегами сформулював власний погляд на квантову механіку як науку в цілому. Свою концепцію він опублікував у роботі [1] під назвою “Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?”.

“Чи можна вважати квантовомеханічний опис фізичної реальності повним?” — питає Ейнштейн у самому заголовку статті. Вже безпосередньо в такій формі питання вгадується негативна відповідь на нього самого Ейнштейна.

З моменту виходу у світ, дана робота Ейнштейна була найбільш цитованою у фізичній науковій та науково-популярній літературі. Висновки, наведені в роботі, отримали назву “Парадокс Ейнштейна-Подольського-Розена”, або скорочено “ЕПР-парадокс”.

Перед тим, як викласти висновки, зроблені Ейнштейном в ЕПР-роботі, розглянемо, в чому саме полягають розбіжності в поглядах Альберта Ейнштейна та Нільса Бора, оскільки дану роботу Ейнштейна можна розглядати в якості концентрованого формулювання аргументів проти трактовки змісту квантової механіки Нільсом Бором.

Зауважимо, що у своїх дискусіях Бор та Ейнштейн, як правило, оперували хвильовими функціями, що залежать від координат та імпульсів частинок. Але аргументи Бора та Ейнштейна, а також принциповий зміст ЕПР-роботи, можна передати без спотворення, використовуючи більш прості та більш зручні для нас спінові хвильові функції частинок зі спіном $s = \frac{1}{2}$.

Для зручності подальших пояснень, скористаємося відомим поняттям “фільтр Штерна-Герлаха” (ШГ). Під цим поняттям будемо розуміти прилад, за допомогою якого можна вимірювати значення проекції спіну частинки з $s = \frac{1}{2}$ на будь-який напрямок у просторі.

Розглянемо простий приклад, в якому вже виявляються розбіжності у поглядах Бора та Ейнштейна.

Нехай є джерело, що готує частинки зі спіном $s = \frac{1}{2}$ у спіновому стані,

який у квантовій механіці описується хвильовою функцією

$$|\phi\rangle = \alpha \left| \frac{1}{2} \right\rangle + \beta \left| -\frac{1}{2} \right\rangle, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1, \quad (6.1)$$

де $\left| \pm \frac{1}{2} \right\rangle$ — базисні стани, в яких значення проекції спіну на вісь квантування (вісь z) рівне $\pm \frac{1}{2}$. В реальному експерименті виявляється, що результатом вимірювання (за допомогою ШГ) проекції спіну на вісь z є одне з двох можливих значень проекції: або $\frac{1}{2}$, або $-\frac{1}{2}$. Якщо раз за разом готувати стан (6.1) і над кожною копією цього стану проводити таку саму процедуру вимірювання, то щоразу будемо отримувати значення проекції або $\frac{1}{2}$, або $-\frac{1}{2}$. При цьому в кожному окремому вимірюванні неможливо передбачити наперед, яке саме з двох значень ми отримаємо. Експеримент також демонструє, що результатом вимірювання проекції спіну на будь-яку іншу вісь z' є також одне з двох значень $\frac{1}{2}$ або $-\frac{1}{2}$. (Для кожного стану типу (6.1) існує лише одна вісь \tilde{z} , проекція спіну на яку має передбачуване значення).

Розглянемо тепер трактування результатів наведеного експерименту Нільсом Бором і Альбертом Ейнштейном. Зауважимо, що йдеться саме про *трактування*, бо з результатами експериментів вимушені рахуватися будь-хто та будь-яка теорія, що претендує на адекватний опис природи.

Трактування Нільса Бора. Якщо відома хвильова функція $|\phi\rangle$, що описує стан квантової системи, то ми маємо максимальну інформацію про систему, яку допускає природа. У стані (6.1) проекція спіну на вісь z не має певного значення. Цей стан є квантовою суперпозицією двох станів: $\left| \frac{1}{2} \right\rangle$ і $\left| -\frac{1}{2} \right\rangle$, у кожному з яких величина проекції має певне значення. Передбачити, яке саме з цих двох значень проекції ми отримуємо в результаті вимірювання, абсолютно неможливо не тому, що ми чогось не знаємо про початковий стан, а тому, що статистичний характер результатів вимірювання лежить в основі законів природи. Маючи частинку в стані (6.1), можна лише стверджувати, що при вимірюванні проекції спіну на вісь z буде отримано значення $\frac{1}{2}$ з імовірністю $w_1 = |\alpha|^2$, та значення $-\frac{1}{2}$ з імовірністю $w_2 = |\beta|^2$. Очевидно, що сума імовірностей повинна дорівнювати одиниці: $w_1 + w_2 = 1$, що рівнозначно умові нормування $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

Якщо при підкиданні монети також не можна спрогнозувати, яка її сторона випаде, то згідно класичної статистики ця неможливість передбачення є наслідком *нашого незнання* значень всіх сил та чинників, що впливають на монету в процесі підкидання. Квантова ж статистика, згідно Н. Бора, є первинною властивістю природи. Вимірювання у квантовій механіці являє собою процес взаємодії мікроскопічної частинки з макроскопічним тілом, яким є вимірювальний прилад. В результаті

такої взаємодії відбувається не лише отримання значення вимірюваної фізичної величини, а й перехід квантової системи у новий стан. В наведеному вище прикладі початковий стан $|\phi\rangle$ (6.1) в результаті процесу вимірювання переходить випадковим непередбачуваним способом або в стан $|\frac{1}{2}\rangle$ (якщо отримане значення проекції рівне $\frac{1}{2}$), або в стан $|\frac{-1}{2}\rangle$ (якщо отримана проекція рівна $-\frac{1}{2}$).

Трактування Альберта Ейнштейна. Значення фізичної величини, що отримується під час вимірювання, є об'єктивною характеристикою стану самої фізичної системи, воно не залежить від того, виконується процедура вимірювання чи ні. Дане конкретне значення величини до та після вимірювання є одна й та ж сама сутність. Вимірювання лише розкриває для нас це значення, але не формує його.

Неоднозначність результатів вимірювання, згідно Ейнштейна, є наслідком того, що хвильова функція $|\phi\rangle$ не описує повною мірою стан фізичного об'єкта. Твердження, що всі приготовані копії стану $|\phi\rangle$ є тотожними, не є вірним. Насправді кожного разу готуються різні реальні стани, і різниця між ними не описується квантовою механікою. Для адекватного опису стану фізичного об'єкту необхідно знати, окрім повного набору квантових чисел (що визначають стан $|\phi\rangle$), також ще й значення деяких, поки ще невідомих нам, параметрів. Нееднозначність результату експерименту пов'язана саме з тим, що реальні стани приготованих копій відрізняються значеннями цих невідомих і не контрольованих нами параметрів.

Дискусії Ейнштейна з Бором відбувалися як заочно, так і під час їх зустрічей на семінарах, конференціях та конгресах. Як правило, Ейнштейн раз за разом вигадував “уявні експерименти”, які, на його думку, спростовують концепцію Бора. Бор, у відповідь, знаходив аргументи, які також, на його думку, вказували на необгрунтованість позиції Ейнштейна.

Перейдемо тепер до більш детального обговорення головних ідей та аргументів, висловлених у статті Ейнштейна-Подольського-Розена.

У преамбулі статті висловлені такі твердження:

1. Будь-яка серйозна фізична теорія повинна взяти до уваги різницю між об'єктивною реальністю, що не залежить від жодних теорій, та фізичними концепціями, на яких базуються фізичні теорії. Ці концепції формулюються таким чином, щоб відповідати фізичним реаліям, і за допомогою цих концепцій ми, власне, відображаємо реальність для себе.
2. Намагаючись оцінити правильність фізичної теорії, ми повинні задати собі два питання:

6.1. Парадокс Ейнштейна-Подольського-Розена (ЕПР-парадокс) 111

- Чи є теорія коректною?
- Чи є опис реальності даною теорією повним?

Правильність теорії оцінюється рівнем співпадіння передбачень теорії з дослідом.

Кожний *елемент фізичної реальності* повинен мати у фізичній теорії своє відображення, свій аналог (counterpart). Дану умову Ейнштейн назвав *умовою повноти теорії*. Для визначення поняття елемента фізичної реальності, Ейнштейн пропонує такі критерії: якщо, без будь-якого впливу на фізичну систему, можна передбачити з повною визначеністю (тобто з імовірністю, що рівна одиниці) значення деякої фізичної величини, то з цього випливає, що існує *елемент фізичної реальності*, що відповідає значенню даної фізичної величини.

Якщо застосувати такі, цілком логічні та очевидні (на думку Ейнштейна), критерії до квантової механіки, як теорії, то неминуче прийдемо до парадоксу.

Міркування Ейнштейна, наведені в ЕПР-статті, обговоримо на наступному прикладі (даний приклад відрізняється від наведеного в роботі-оригіналі, проте він дозволяє просто передати всі тонкощі змісту статті).

Нехай маємо спіновий стан системи двох частинок зі спіном $s = \frac{1}{2}$, якому в квантовій механіці відповідає хвильова функція

$$|\psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| -\frac{1}{2} \right\rangle_2 - \left| -\frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2} \right\rangle_2 \right), \quad (6.2)$$

де індекси $_1$ та $_2$ позначають номери частинок.

Стан (6.2) є власним станом оператора квадрата повного спіну системи $\hat{\vec{s}}^2$ ($\hat{\vec{s}} = \hat{\vec{s}}_1 + \hat{\vec{s}}_2$), що відповідає власному значенню 0 ($s = 0 \Rightarrow s(s+1) = 0$), та оператора \hat{s}_z , власне значення якого, очевидно, теж 0. Оскільки повний спін системи двох частинок дорівнює нулю, то (6.2) називають також сферично симетричним станом (немає виділеного напрямку в просторі). Даний стан також відомий, як один із чотирьох станів Белла.

Нехай після приготування стану (6.2) частинки розлітаються в протилежні боки, і перша частинка поступає в розпорядження Аліси, а друга — Боба, див. Рис. 6.1. Аліса та Боб можуть за допомогою ШГ вимірювати у відповідних частинок проекції спіну на будь-яку вісь. На якій би відстані одна від одної не знаходилися частинки, вони описуватимуться станом (6.2), якщо на ними не виконувалися ніякі дії.

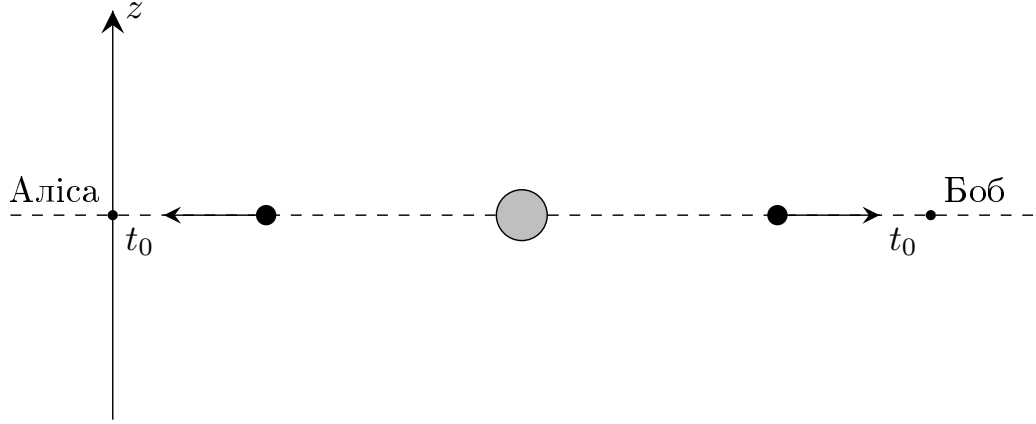


Рис. 6.1: ЕПР-парадокс

Припустимо тепер, що в певний момент часу t_0 Аліса вимірює проекцію спіну першої частинки на вісь z і отримує, наприклад, $s_z = \frac{1}{2}$.

Уявімо, як би трактували дану ситуацію окремо Нільс Бор і Альберт Ейнштейн на основі їх власних концепцій.

Нільс Бор: хвильова функція (6.2) містить у собі максимальну інформацію, яку допускає природа; отже, вона (хвильова функція) адекватно описує реальний стан фізичного об'єкта (в даному випадку — спіновий стан системи двох частинок). У стані (6.2) проекції спінів на вісь z (і на будь-яку іншу вісь) як першої, так і другої частинок, *не мають* певного значення, і це не тому, що ми не знаємо цих значень, а тому, що вони просто *не існують*. Така ситуація залишається в усі моменти часу $0 \leq t < t_0$ від моменту створення стану (6.2) до моменту вимірювання, проведеного Алісою. До вимірювання результат експерименту є *абсолютно непередбачуваним*, можна лише вказати імовірності кожного з двох можливих результатів. Оскільки в результаті вимірювання Аліса отримала $s_{1z} = \frac{1}{2}$, то з позицій квантової механіки у трактовці Бора, у момент t_0 двочастинковий стан раптово переходить у новий стан (*редукція хвильової функції*):

$$|\psi^-\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = \left| \frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| -\frac{1}{2} \right\rangle_2, \quad (6.3)$$

тобто значення проекції спіну як першої, так і другої частинок стають цілком визначеними:

$$s_{1z} = \frac{1}{2}, \quad s_{2z} = -\frac{1}{2}. \quad (6.4)$$

Якби при вимірюванні Аліса отримала значення $s_{1z} = -\frac{1}{2}$, то редукція

хвильової функції відбулася б за схемою

$$|\psi^-\rangle \rightarrow |\psi''\rangle = \left| -\frac{1}{2} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2} \right\rangle_2. \quad (6.5)$$

Відзначимо, що в момент t_0 значення проекції спіну другої частинки переходить від “статусу” повністю невизначеного до цілком визначеного, хоча над другою частинкою не виконувалися жодні дії. Нільс Бор пояснює таке перетворення значення проекції спіну другої частинки тим, що в функції (6.2) стани двох частинок скорельовані, тобто в цьому стані не можна розділити стани окремо кожної з частинок. Така *кореляція є специфічно квантовою*, і вона не має аналога у класичній фізиці.

Оскільки стан (6.2) є сферично-симетричним, то його хвильова функція має однаковий вигляд у будь-якому ортонормованому базисі. В загальному випадку цю функцію можна представити у вигляді

$$|\psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, \vec{n} \right\rangle_1 \left| -\frac{1}{2}, \vec{n} \right\rangle_2 - \left| -\frac{1}{2}, \vec{n} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, \vec{n} \right\rangle_2 \right), \quad (6.6)$$

де $|\pm\frac{1}{2}, \vec{n}\rangle$ — це спінові стани окремих частинок, значення проекцій спіну на вісь, напрямок якої визначається одиничним вектором \vec{n} , дорівнює $\pm\frac{1}{2}$. З цього випливає, що якби Аліса налаштувала свій прилад для вимірювання проекції спіну на напрямок \vec{n} , то вона знову-таки отримала б (з імовірністю $w_1 = w_2 = 1/2$) значення $\pm\frac{1}{2}$ відповідних проекцій, і при цьому редукція хвильової функції відбувалась би згідно

$$|\psi^-\rangle \rightarrow \begin{cases} \left| \frac{1}{2}, \vec{n} \right\rangle_1 \left| -\frac{1}{2}, \vec{n} \right\rangle_2, & \text{якщо } s_{1\vec{n}} = \frac{1}{2} \\ \left| -\frac{1}{2}, \vec{n} \right\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, \vec{n} \right\rangle_2, & \text{якщо } s_{1\vec{n}} = -\frac{1}{2} \end{cases}. \quad (6.7)$$

Вважаємо за потрібне підкреслити тут, що стани (6.2) і (6.6) є абсолютно тотожними.

Звичайно, у станах (6.7) проекції спіну на напрямок \vec{n} кожної з частинок є цілком визначеними.

Висновок: до моменту t_0 двочастинковий спіновий стан адекватно описується хвильовою функцією (6.2) або тотожною їй функцією (6.6). В даному стані значення проекції спіну першої та другої частинок на будь-яку вісь повністю невизначені. Внаслідок *квантової кореляції* станів двох окремих частинок в (6.2) і (6.6), після процедури вимірювання над першою частинкою проекції спіну обох частинок стають повністю визначеними, хоча до другої частинки не було застосовано жодних дій.

Альберт Ейнштейн: з факту отримання значення $s_{1z} = \frac{1}{2}$ проекції спіну першої частинки в результаті проведеної Алісою процедури вимірювання випливає, що в реально приготованому двочастинковому спіновому стані, який у квантовій механіці позначається хвильовою функцією

$|\psi^-\rangle$, вже було закладено, що при вимірюванні Аліса отримає саме значення $s_{1z} = \frac{1}{2}$. Вимірювання лише відкрило для нас те, що вже існувало до вимірювання. Після експерименту нам стає відомим також значення проекції спіну другої частинки. Але оскільки до другої частинки не було застосовано ніяких дій, і ми знаємо значення проекції спіну цієї частинки, то логічно вважати, що це саме значення проекції було й при $t < t_0$. Отже, від самого моменту створення стану двочастинкової системи та у всі наступні моменти часу $t \geq 0$ значення $s_{2z} = -\frac{1}{2}$ було цілком визначене; відповідно до прийнятого означення, $s_{2z} = -\frac{1}{2}$ є *елементом фізичної реальності*, який повинен знайти своє відображення в описі початкового двочастинкового стану, і якого немає у квантовомеханічному способі опису стану хвильовою функцією. Аналогічно елементами фізичної реальності є проекції спіну обох частинок на будь-яку іншу вісь. Але, згідно положень квантової механіки, оператори \hat{s}_z та \hat{s}_x не комутують, і відповідні проекції спіну не можуть одночасно мати певні значення. Отже, квантова механіка, згідно Ейнштейна, приводить до наслідків, які суперечать здоровому глузду, тобто приводить до парадоксу.

Головний висновок Ейнштейна в ЕПР-роботі полягає в наступному: квантова механіка є *неповною теорією*, оскільки існують *елементи фізичної реальності*, які жодним чином не знайшли у ній відображення. Хвильові функції у квантовій механіці *не повно* описують реальні стани фізичних систем. Саме звідси бере початок статистичний характер результатів вимірювання.

Отже, несумісність положень квантової механіки з, як тоді вважалося, бездоганно логічними аргументами Ейнштейна, отримало назву “парадокс Ейнштейна-Подольського-Розена (ЕПР-парадокс)”.

На думку Ейнштейна, квантову механіку повинна замінити нова теорія, яка б адекватно описувала реальні властивості фізичних систем, і в якій би знайшли відображення *всі* елементи фізичної реальності. За наявності такої нової теорії квантовій механіці відводилася б роль граничного випадку або ж результату “деякого усереднення”, проведеного за значеннями параметрів у новій теорії. За таких умов нова теорія пояснювала б усі результати, які дає квантова механіка та, крім того, давала б додаткову інформацію й більш детально описувала б зміст станів фізичних об’єктів.

Рекомендуємо читачеві запам’ятати ці міркування Ейнштейна, оскільки на них буде посилення в наступному розділі під час обговорення теорії Белла.

Дискусії Ейнштейна з Бором продовжилися й після виходу в світ ЕПР-статті. Ейнштейн продовжував пропонувати все нові “уявні експерименти”, Нільс Бор реагував на них з позицій квантової механіки.

Ейнштейн абсолютно не сприймав статистичного характеру тлумачення законів природи. “Я не вірю, що Бог грає в кості”, — казав Ейнштейн. “Не наша це справа вказувати Богові, як йому керувати світом. Наша справа — вивчати закони, які встановив Бог”, — відповідав йому Бор. Фізики, як і раніше, поділялися на прихильників поглядів Ейнштейна та Бора. Зважаючи на величезний авторитет Ейнштейна, його колеги почали розробляти та пропонувати нові теорії, в яких закладалися ідеї Ейнштейна про введення в теорію параметрів, значення яких дали б змогу описати всі елементи фізичної реальності.

Нові модельні теорії, які отримали загальну назву “теорії з локальними прихованими параметрами”, публікувалися в наукових журналах, обговорювалися на семінарах та конференціях. Такі моделі навіть отримали стійку аббревіатуру LHVM (Local Hidden Variables Model). В той же час на основі звичайної квантової механіки були досягнуті значні успіхи як в теоретичному плані, так і в прикладних аспектах (розроблено теорію атомного ядра, пояснено атомні та ядерні спектри, побудовано зонну теорію у фізиці твердого тіла, створено лазери й мазери тощо). Однак, протягом ще багатьох років ніхто не запропонував критерію, за яким можна було б зробити один з таких альтернативних висновків:

1. Правий А. Ейнштейн.
2. Правий Н. Бор.
3. Обидві концепції невірні.

Четвертого варіанту, коли обидві концепції вірні, бути не може, оскільки вони абсолютно несумісні.

У 1955 р. помер Альберт Ейнштейн, а у 1962 р. — Нільс Бор.

Обидва видатні вчені залишили яскравий слід у науці, а щодо теми їх дискусій — кожний до кінця своїх днів був переконаний у своїй правоті.

6.2 Нерівність Белла

В 1964 р. Джон Белл, який працював у ЦЕРНі, офіційною спеціалізацією якого була фізика елементарних частинок і квантова теорія поля, але справжнім захопленням якого залишалася теорія квантової механіки, запропонував критерій, за допомогою якого експериментально можна було зробити висновок щодо багаторічної дискусії між Альбертом Ейнштейном і Нільсом Бором.

Белл, прийнявши висновок ЕПР-роботи про те, що квантовий опис фізичної реальності не є повним, в якості робочої гіпотези, формалізував ідеї ЕПР-статті в термінах моделі локальних прихованих параметрів (LHVM). В основі таких моделей лежать цілком логічні, як тоді здавалося, припущення, сформульовані Ейнштейном:

1. Результати, що отримуються під час експерименту, є визначеними властивостями частинок ще до (та незалежно від) експерименту. Тобто, ці властивості є об'єктивними характеристиками частинок і, отже, вони є *елементами фізичної реальності*.
2. Результати експерименту (вимірювання), отримані в одному місці, не залежать від будь-яких дій, виконаних на великих (в ідеалі на простороподібних) відстанях.

Перше з цих припущень отримало назву “реалізм”, а друге — “локальність”. Всі теорії, в яких закладаються наведені вимоги, отримали назву “теорії, побудовані на основі локального реалізму”. До теорій такого типу відносяться всі теоретичні моделі з прихованими параметрами (LHVM).

Перейдемо тепер до аргументів, викладених Джоном Беллом, що приводять до нерівності Белла.

На деякий час забудемо про квантову механіку та розглянемо деякий набір випадкових величин A, B, C, D довільної природи, кожна з яких може приймати лише два значення: “+1” та “-1”. Таких випадкових величин можна навести безліч. Наприклад, підкидаючи чотири монети, ми отримаємо випадковий набір з “орел-решка”. Нехай “орлу” припишемо значення “+1”, а решці — “-1”. Підкидаючи монети багато разів, отримаємо ансамбль наборів значень чотирьох випадкових величин. Очевидно, що певні значення кожного з чотирьох елементів у наборі, в кожному окремому випробуванні, існують незалежно від того, перевіряємо ми цей факт чи ні.

Утворимо тепер наступну комбінацію з величин A, B, C, D :

$$\begin{aligned}\beta &= AB + AD + CB - CD \\ &= A(B + D) + C(B - D).\end{aligned}\tag{6.8}$$

З (6.8) видно, що для будь-яких можливих значень “ ± 1 ” випадкових величин, один з двох виразів у дужках завжди рівний нулю, а величина β приймає значення або “+2”, або “-2”. За цих умов очевидно, що при багатократній генерації значень величин A, B, C, D середнє арифметичне величини β лежить в межах

$$-2 \leq \langle \beta \rangle \leq 2,\tag{6.9}$$

звідки випливає

$$|\langle \beta \rangle| \leq 2. \quad (6.10)$$

Знак рівності в (6.10), як крайній випадок, відповідає ситуації, коли всі доданки під час обчислення середнього значення мають однаковий знак.

Нагадаємо ще раз, що нерівності (6.9) та (6.10) мають місце для довільних чотирьох випадкових величин, кожна з яких може приймати лише значення “ ± 1 ”.

Розглянемо тепер систему двох частинок зі спіном $s = \frac{1}{2}$. Позначимо через

$$(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{a}), \quad (\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{b}), \quad (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{c}), \quad (\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{d}) \quad (6.11)$$

подвійні значення проєкції спіну першої та другої частинок на осі, які визначаються одиничними векторами $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}, \vec{d}$, довільно орієнтованими в просторі. Надалі, для скорочення, величини (6.11) називатимемо “проєкції спіну”.

З величин (6.11) утворимо наступну комбінацію:

$$\begin{aligned} \beta = & (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{a}) \left[(\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{b}) + (\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{d}) \right] \\ & + (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{c}) \left[(\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{b}) - (\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{d}) \right]. \end{aligned} \quad (6.12)$$

Розглянемо тепер процедури обчислення середнього значення величини β :

1. У межах теорії з прихованими параметрами, побудованої на основі локального реалізму за Ейнштейном.
2. На основі квантової механіки в інтерпретації Нільса Бора.

Припустимо, що в лабораторії готуються копії двочастинкових спінових станів, які з позиції квантової механіки вважаються тотожними та описуються хвильовою функцією $|\chi\rangle$.

З позицій теорії LHVМ, ці стани, взагалі кажучи, не є тотожними, оскільки вони можуть відрізнятися один від одного значеннями прихованих параметрів. Але з принципу “реалізму” випливає, що у кожному окремо приготованому стані величини (6.11) мають певні значення: або “ $+1$ ”, або “ -1 ”. Ці значення є об’єктивною реальністю, вони існують незалежно від того, проводиться процедура вимірювання чи ні. Якщо ми не знаємо значень параметрів, то (6.11) можна вважати випадковими величинами, які є частковим випадком величин A, B, C, D , розглянутих вище:

$$(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{a}) \sim A, \quad (\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{b}) \sim B, \quad (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{c}) \sim C, \quad (\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{d}) \sim D. \quad (6.13)$$

Тоді, очевидно, вираз (6.12) є частковим випадком (6.8) і, отже, повинна мати місце нерівність

$$\left| \left\langle (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{a}) \left[(\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{b}) + (\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{d}) \right] + (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{c}) \left[(\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{b}) - (\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{d}) \right] \right\rangle \right| \leq 2. \quad (6.14)$$

Нерівність (6.14) має назву “нерівність Белла у формі Клаузера-Хорна-Шимоні-Холта”, або CHSH (від Clauser-Horne-Shimoni-Holt).

Припустимо тепер, що було побудовано деяку теорію з параметрами, яка за критеріями Ейнштейна є *повною*, на відміну від квантової механіки, яку Ейнштейн вважав *не повною*. В такій теорії стан кожної копії двочастинкової системи характеризується *однозначно* значеннями сукупності параметрів. Значення цієї сукупності для j -ої копії позначимо λ_j (вважаємо, що параметри приймають дискретні значення). Тепер у кожній копії двочастинкового стану проекції спіну як першої, так і другої частинок будуть цілком визначені, і значення цих проекцій вже не можна називати значеннями випадкових величин. Замість (6.11) для проекцій спіну тепер введемо позначення

$$\sigma_1(\vec{a}, \lambda_j), \quad \sigma_2(\vec{b}, \lambda_j), \quad \sigma_1(\vec{c}, \lambda_j), \quad \sigma_2(\vec{d}, \lambda_j). \quad (6.15)$$

Але, оскільки й тепер кожна з величин (6.15) для кожного значення λ_j може приймати лише конкретні значення (або “+1”, або “-1”), то, очевидно,

$$\begin{aligned} \beta'_j = & \sigma_1(\vec{a}, \lambda_j) \cdot [\sigma_2(\vec{b}, \lambda_j) + \sigma_2(\vec{d}, \lambda_j)] \\ & + \sigma_1(\vec{c}, \lambda_j) \cdot [\sigma_2(\vec{b}, \lambda_j) - \sigma_2(\vec{d}, \lambda_j)] \end{aligned} \quad (6.16)$$

при кожному j буде приймати значення або “+2”, або “-2” і, отже, має місце нерівність

$$|\langle \beta' \rangle| = \left| \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \beta'_j \right| \leq 2. \quad (6.17)$$

Розглянемо тепер процедуру обчислення середнього значення величини β на основі квантової механіки.

У квантовій механіці кожній спостережуваній фізичній величині ставиться у відповідність ермітовий оператор. Величинам (6.11) відповідають оператори

$$(\hat{\sigma}_1 \cdot \vec{a}), \quad (\hat{\sigma}_2 \cdot \vec{b}), \quad (\hat{\sigma}_1 \cdot \vec{c}), \quad (\hat{\sigma}_2 \cdot \vec{d}), \quad (6.18)$$

де $\hat{\sigma}_1^z$ та $\hat{\sigma}_2^z$ — оператори Паулі, що діють у просторах спінових станів першої та другої частинок відповідно. Величина β з (6.12) також є оператором

$$\begin{aligned} \hat{\beta} = & \left(\hat{\sigma}_1^z \cdot \vec{a} \right) \left[\left(\hat{\sigma}_2^z \cdot \vec{b} \right) + \left(\hat{\sigma}_2^z \cdot \vec{d} \right) \right] \\ & + \left(\hat{\sigma}_1^z \cdot \vec{c} \right) \left[\left(\hat{\sigma}_2^z \cdot \vec{b} \right) - \left(\hat{\sigma}_2^z \cdot \vec{d} \right) \right], \end{aligned} \quad (6.19)$$

який має назву “оператор Белла”.

Середнє значення оператора на ансамблі копій стану $|\chi\rangle$ у квантовій механіці записується у вигляді діагонального матричного елемента

$$\langle \beta \rangle = \langle \chi | \hat{\beta} | \chi \rangle. \quad (6.20)$$

В якості стану $|\chi\rangle$ оберемо, наприклад, вже відомий нам стан Белла $|\psi^-\rangle$:

$$|\chi\rangle = |\psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2} \right\rangle_1 \otimes \left| -\frac{1}{2} \right\rangle_2 - \left| -\frac{1}{2} \right\rangle_1 \otimes \left| \frac{1}{2} \right\rangle_2 \right), \quad (6.21)$$

де $|\pm\frac{1}{2}\rangle$ — це стани, в яких проекції спінів окремих частинок мають значення “ $\pm\frac{1}{2}$ ” (а проекції операторів Паулі мають значення “ ± 1 ”). Тоді, підставляючи (6.19) та (6.21) в (6.20), отримуємо

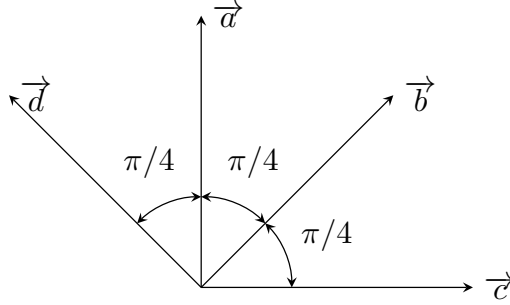
$$\begin{aligned} \langle \beta \rangle = & \langle \psi^- | \left(\hat{\sigma}_1^z \cdot \vec{a} \right) \left(\hat{\sigma}_2^z \cdot \vec{b} \right) | \psi^- \rangle \\ & + \langle \psi^- | \left(\hat{\sigma}_1^z \cdot \vec{a} \right) \left(\hat{\sigma}_2^z \cdot \vec{d} \right) | \psi^- \rangle \\ & + \langle \psi^- | \left(\hat{\sigma}_1^z \cdot \vec{c} \right) \left(\hat{\sigma}_2^z \cdot \vec{b} \right) | \psi^- \rangle \\ & - \langle \psi^- | \left(\hat{\sigma}_1^z \cdot \vec{c} \right) \left(\hat{\sigma}_2^z \cdot \vec{d} \right) | \psi^- \rangle. \end{aligned} \quad (6.22)$$

Обчислюючи за правилами квантової механіки, знаходимо, що

$$\langle \psi^- | \left(\hat{\sigma}_1^z \cdot \vec{a} \right) \left(\hat{\sigma}_2^z \cdot \vec{b} \right) | \psi^- \rangle = - \left(\vec{a} \cdot \vec{b} \right). \quad (6.23)$$

Аналогічно знаходяться й інші доданки в (6.22), що дає

$$\begin{aligned} \langle \beta \rangle = & - \left(\vec{a} \cdot \vec{b} \right) - \left(\vec{a} \cdot \vec{d} \right) - \left(\vec{c} \cdot \vec{b} \right) + \left(\vec{c} \cdot \vec{d} \right), \quad \text{або} \\ |\langle \beta \rangle| = & \left| \left(\vec{a} \cdot \vec{b} \right) + \left(\vec{a} \cdot \vec{d} \right) + \left(\vec{c} \cdot \vec{b} \right) - \left(\vec{c} \cdot \vec{d} \right) \right|. \end{aligned} \quad (6.24)$$

Рис. 6.2: Схема орієнтації векторів \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} , \vec{d}

Значення $|\langle\beta\rangle|$, звичайно, залежить від напрямків векторів \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} , \vec{d} , на які проєктуються спіни частинок. Оберемо ці вектори так, щоб вони були розташовані в одній площині згідно схеми, зображеної на Рис. 6.2. Тоді

$$\begin{aligned}(\vec{a} \cdot \vec{b}) &= (\vec{a} \cdot \vec{d}) = (\vec{c} \cdot \vec{b}) = \cos \frac{\pi}{4} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \\ (\vec{c} \cdot \vec{d}) &= \cos \frac{3\pi}{4} = -\frac{1}{\sqrt{2}},\end{aligned}\tag{6.25}$$

що після підстановки в (6.24) дає

$$|\langle\beta\rangle| = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} - \left(-\frac{1}{\sqrt{2}} \right) \right| = 2\sqrt{2} > 2.\tag{6.26}$$

Таким чином, значення величини $|\langle\beta\rangle|$ у квантовому стані $|\psi^-\rangle$ порушує нерівність Белла.

Зробимо попередній висновок, який випливає з отриманих результатів: квантова механіка і теорії з додатковими параметрами, побудовані на основі локального реалізму, приводять до *різних значень* величини $|\langle\beta\rangle|$. **У квантовій механіці існують такі стани, які порушують нерівність Белла.**

Але на даному етапі ще не можна віддати перевагу ані концепції Ейнштейна, ані концепції Бора. Як прийнято у фізиці, якщо дві різні теорії передбачають різні результати для однієї й тієї ж самої величини, то все вирішує належним чином поставлений експеримент.

Під час виведення нерівності Белла вже була закладена вимога “*реалізм*”, оскільки значення проєкцій спіну в теорії з параметрами вважалися об’єктивними характеристиками частинок, існування значень яких не залежить від того, виконується процедура вимірювання чи ні.

Друга вимога Ейнштейна — “*локальність*” — повинна задовольнятися саме такою постановкою експерименту, в якій процедура вимірювання в одному місці жодним чином не впливає на результат вимірювання в іншому.

Такий експеримент можна уявити наступним чином. Для демонстрації уявного досліду скористаємося допомогою двох вже відомих нам експериментаторів, яких в науковій літературі прийнято називати Аліса (Alice) та Боб (Bob).

Нехай у лабораторії готуються, за однією й тією ж самою процедурою, скільки завгодно копій двочастинкового стану $|\psi^-\rangle$ (6.21). Після приготування чергової копії частинки розлітаються у протилежні боки, так що над першою частинкою процедуру вимірювання проєкцій спіну може виконувати Аліса, а над другою — Боб. Для забезпечення умови “*локальності*” за Ейнштейном вважається, що Аліса та Боб знаходяться на великій відстані один від одного, тобто вимірювання над однією частинкою жодним чином не впливають на вимірювання над другою. Для гарантованого забезпечення умови локальності можна також вважати (хоча й не обов’язково), що обидва експериментатори проводять процедуру вимірювання одночасно.

Нехай Аліса після приготування чергової копії стану $|\psi^-\rangle$ вимірює проєкцію спіну першої частинки на напрямок або \vec{a} , або \vec{c} . Боб вимірює проєкцію спіну другої частинки на напрямок або \vec{b} , або \vec{d} . При цьому вибір одного з двох визначених напрямків відбувається випадковим чином та не залежить від Аліси чи Боба.

Отже, приготування однієї копії стану $|\psi^-\rangle$ з наступною процедурою вимірювань дозволяє отримати експериментальне значення одного з чотирьох виразів-добутків:

$$\begin{aligned} & \left(\hat{\sigma}_1^z \cdot \vec{a} \right) \left(\hat{\sigma}_2^z \cdot \vec{b} \right), \quad \left(\hat{\sigma}_1^z \cdot \vec{a} \right) \left(\hat{\sigma}_2^z \cdot \vec{d} \right), \\ & \left(\hat{\sigma}_1^z \cdot \vec{c} \right) \left(\hat{\sigma}_2^z \cdot \vec{b} \right), \quad \left(\hat{\sigma}_1^z \cdot \vec{c} \right) \left(\hat{\sigma}_2^z \cdot \vec{d} \right). \end{aligned} \quad (6.27)$$

Припустимо, що було приготовано та виміряно N копій $|\psi^-\rangle$, причому N_1 з них давали значення виразу $\left(\hat{\sigma}_1^z \cdot \vec{a} \right) \left(\hat{\sigma}_2^z \cdot \vec{b} \right)$, N_2 — значення $\left(\hat{\sigma}_1^z \cdot \vec{a} \right) \left(\hat{\sigma}_2^z \cdot \vec{d} \right)$, N_3 — значення $\left(\hat{\sigma}_1^z \cdot \vec{c} \right) \left(\hat{\sigma}_2^z \cdot \vec{b} \right)$, і N_4 — значення $\left(\hat{\sigma}_1^z \cdot \vec{c} \right) \left(\hat{\sigma}_2^z \cdot \vec{d} \right)$ так, щоб

$$N_1 + N_2 + N_3 + N_4 = N. \quad (6.28)$$

Вважаючи всі числа N_1, N_2, N_3, N_4 достатньо великими, можна обчисли-

ти середні значення:

$$\begin{aligned}
 \langle (\hat{\vec{\sigma}}_1 \cdot \vec{a}) (\hat{\vec{\sigma}}_2 \cdot \vec{b}) \rangle &= \frac{1}{N_1} \sum_{i=1}^{N_1} \langle \psi^- | (\hat{\vec{\sigma}}_1 \cdot \vec{a}) (\hat{\vec{\sigma}}_2 \cdot \vec{b}) | \psi^- \rangle, \\
 \langle (\hat{\vec{\sigma}}_1 \cdot \vec{a}) (\hat{\vec{\sigma}}_2 \cdot \vec{d}) \rangle &= \frac{1}{N_2} \sum_{j=1}^{N_2} \langle \psi^- | (\hat{\vec{\sigma}}_1 \cdot \vec{a}) (\hat{\vec{\sigma}}_2 \cdot \vec{d}) | \psi^- \rangle, \\
 \langle (\hat{\vec{\sigma}}_1 \cdot \vec{c}) (\hat{\vec{\sigma}}_2 \cdot \vec{b}) \rangle &= \frac{1}{N_3} \sum_{k=1}^{N_3} \langle \psi^- | (\hat{\vec{\sigma}}_1 \cdot \vec{c}) (\hat{\vec{\sigma}}_2 \cdot \vec{b}) | \psi^- \rangle, \\
 \langle (\hat{\vec{\sigma}}_1 \cdot \vec{c}) (\hat{\vec{\sigma}}_2 \cdot \vec{d}) \rangle &= \frac{1}{N_4} \sum_{\ell=1}^{N_4} \langle \psi^- | (\hat{\vec{\sigma}}_1 \cdot \vec{c}) (\hat{\vec{\sigma}}_2 \cdot \vec{d}) | \psi^- \rangle.
 \end{aligned} \tag{6.29}$$

Тоді, на основі (6.29), можна експериментально вирахувати значення величини $\langle \beta \rangle_{\text{експ}}$:

$$\begin{aligned}
 \langle \beta \rangle_{\text{експ}} &= \langle (\hat{\vec{\sigma}}_1 \cdot \vec{a}) (\hat{\vec{\sigma}}_2 \cdot \vec{b}) \rangle + \langle (\hat{\vec{\sigma}}_1 \cdot \vec{a}) (\hat{\vec{\sigma}}_2 \cdot \vec{d}) \rangle \\
 &\quad + \langle (\hat{\vec{\sigma}}_1 \cdot \vec{c}) (\hat{\vec{\sigma}}_2 \cdot \vec{b}) \rangle - \langle (\hat{\vec{\sigma}}_1 \cdot \vec{c}) (\hat{\vec{\sigma}}_2 \cdot \vec{d}) \rangle.
 \end{aligned} \tag{6.30}$$

Залишається тепер зробити останній крок: за наведеним алгоритмом, замість уявного досліду, провести справжній експеримент та з отриманих значень обчислити реальне значення $\langle \beta \rangle_{\text{експ}}$.

Слід зауважити, що використання спінових ступенів вільності для пояснення змісту нерівності Белла, звичайно, не є єдиною можливістю. Як теоретичні розрахунки, так і реальні експериментальні процедури вимірювання можна провести із застосуванням інших ступенів вільності частинок. Так сталося, що перші експерименти, які дозволяли *надійно та з високою точністю* знайти $\langle \beta \rangle_{\text{експ}}$, були проведені з використанням фотонів. Такі досліди були поставлені групою Аспекта [3] в 1981-1982 рр. Заплутаний стан пари фотонів отримувався за допомогою т. зв. ефекту “вниз-конверсія” (down conversion), в якому кристал перетворював один ультрафіолетовий фотон на два червоних. Замість спінових Аспект використовував поляризаційні ступені вільності. Стан поляризації кожного фотона можна представити у вигляді суперпозиції двох базисних станів $|H\rangle$ (горизонтальна поляризація) і $|V\rangle$ (вертикальна поляризація). Дво-частинковий стан $|\psi^-\rangle$ в цьому базисі має вигляд

$$|\psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|H\rangle_1 \otimes |V\rangle_2 - |V\rangle_1 \otimes |H\rangle_2). \tag{6.31}$$

Детальний опис експерименту Аспекта не входить зараз в наші наміри. Відзначимо тут головне: Ален Аспект переконливо показав за допомогою реального експерименту, що заплутані квантові стани, зокрема стани Белла, порушують нерівність Белла, оскільки отримане ним значення величини $|\langle\beta\rangle_{\text{експ}}|$ дійсно перевищує значення “2”.

Порушення нерівності Белла заплутаними квантовими станами пояснюється наявністю в таких станах специфічних *квантових кореляцій*, яким не існує аналогів у класичній фізиці. Нагадаємо, що всі теорії та моделі, засновані на принципах локального реалізму, задовольняють нерівність Белла. Експеримент Аспекта показав, що принаймні від одного з двох принципів (“локальність” або “реалізм”) у тому сенсі, який надавав їм Альберт Ейнштейн, слід відмовитися. Разом з тим, дослід показав, що отримані експериментальним шляхом результати цілком узгоджуються з висновками квантової механіки.

Підсумкові висновки, що випливають з нерівності Белла та факту її порушення квантовою механікою, можна сформулювати наступним чином.

Теорема Белла: *жодна теорія, побудована на основі принципів локального реалізму (теорія з прихованими параметрами), не може відтворити всі кореляції, які виявляє квантова механіка.*

Тепер саме час нагадати ту роль, яку відводив Ейнштейн квантовій механіці після створення “правильної та повної” теорії, побудованої на основі локального реалізму. Ейнштейн вважав, що квантова механіка буде лише граничним випадком такої теорії. Отже, квантова механіка була би здатна лише частково відтворити те, що б давав повний опис реальності за допомогою прихованих параметрів. Теорема Белла повністю спростовує твердження Ейнштейна, оскільки квантова механіка описує властивості фізичних об’єктів (квантові кореляції), які не здатна виявити “повна” теорія.

Велике значення теореми Белла полягає в тому, що вона не спирається на жодну конкретну модель з прихованими параметрами; вона виносить вирок саме загальним та фундаментальним припущенням класичної картини світу.

Можна зробити висновок, що нерівність Белла та експеримент Аспекта поставили крапку в багаторічних дискусіях Ейнштейна та Бора.

Оголошення результатів дослідів Аспекта викликало широкий резонанс. Наукова спільнота відразу визнала важливість даного експерименту. Цей дослід став стимулом до численних подальших експериментальних досліджень, і всі вони раз за разом підтверджували факт порушення нерівності Белла заплутаними станами.

Послідовники концепції Ейнштейна прискіпливо перевіряли деталі

постановки експериментів і знаходили в них так звані “лазівки” (loopholes), які дозволяли поставити під сумнів результати вимірювань.

Основні зауваження стосувалися статистичного підрахунку. Справа в тому, що детектори, які реєструють частинки в експериментах, не є досконалими. Внаслідок цього частка подій не реєструється і, отже, експериментальна вибірка подій не відповідає теоретичним розрахункам.

В якості другого недоліку опоненти вважали недостатню відстань між двома детекторами, що реєструють скорельовані події. Отже, на їх думку, в реальному експерименті не виконується вимога “локальності”, тобто вимірювання однієї величини може фізично впливати на результат вимірювання другої.

Експериментатори реагували на зауваження опонентів, вдосконалювали методики вимірювання та підтверджували висновок, зроблений Аспектом. Нарешті в 2015 р. група Хенсена [4] виконала експеримент з реєстрації спінів електронів на відстані 1,3 км. один від одного. На думку авторів, експеримент впевнено показав порушення нерівності Белла, а використана методика повністю виключає наявність лазівок.

На даний час переважна більшість фізиків вважає безсумнівною перемогу концепції Нільса Бора над концепцією Альберта Ейнштейна.

6.3 Приклад моделі, побудованої на основі локального реалізму

Оскільки в свій час моделям з прихованими параметрами було присвячено багато уваги, реалізованої у вигляді дискусій, конференцій та численних публікацій у журналах, вважаємо за доцільне навести тут простий можливий приклад, який може дати загальне уявлення про такі моделі.

Розглянемо ще раз ситуацію, наведену вище. Нехай в деякій лабораторії готуються копії двочастинкових спінових станів Белла $|\psi^-\rangle$ (6.21), які з позиції квантової механіки є тотожними, а в моделях локального реалізму з додатковими параметрами (до яких відноситься і наша модель) можуть відрізнятися один від одного значеннями параметрів. Будемо вважати, що стан окремої частинки характеризується параметром — напрямком класичного вектора $\vec{\lambda}$, $|\vec{\lambda}| = 1$. Оскільки двочастинковий стан $|\psi^-\rangle$ є сферично симетричним, то логічно вважати, що якщо стан однієї частинки в $|\psi^-\rangle$ характеризується значенням параметра $\vec{\lambda}_1 = \vec{\lambda}$, то стан другої частинки — значенням $\vec{\lambda}_2 = -\vec{\lambda}$.

В моделях локального реалізму проєкції спіну як першої, так і другої частинки на кожний заданий напрямок у кожній окремій копії $|\psi^-\rangle$ є

цілком визначеними, оскільки вважається, що в конкретній копії $\vec{\lambda}$ має певне значення.

Позначимо для деякої копії стану $|\psi^-\rangle$ через $\sigma_1(\vec{a}, \vec{\lambda})$ проекцію спіну першої частинки на напрямок \vec{a} , і через $\sigma_2(\vec{b}, -\vec{\lambda})$ — проекцію спіну другої частинки на напрямок \vec{b} . Наша модель, як і будь-яка інша, має рахуватися з фактами, що випливають з експерименту. Отже, за будь-яких заданих \vec{a} та \vec{b} та фіксованого значення $\vec{\lambda}$, величини $\sigma_1(\vec{a}, \vec{\lambda})$ і $\sigma_2(\vec{b}, -\vec{\lambda})$ приймають одне з двох можливих значень “ ± 1 ” в залежності від конкретного значення $\vec{\lambda}$.

В рамках моделі припустимо також, що в ансамблі приготованих копій стану $|\psi^-\rangle$ вектор $\vec{\lambda}$ з однаковою імовірністю може приймати всі можливі напрямки у просторі. Крім того, нехай

$$\begin{aligned}\sigma_1(\vec{a}, \vec{\lambda}_1) &= \sigma_1(\vec{a}, \vec{\lambda}) = \begin{cases} 1, & (\vec{a} \cdot \vec{\lambda}) > 0 \\ -1, & (\vec{a} \cdot \vec{\lambda}) < 0 \end{cases} \\ &= \text{sign}(\vec{a} \cdot \vec{\lambda}),\end{aligned}\quad (6.32)$$

$$\begin{aligned}\sigma_2(\vec{b}, \vec{\lambda}_2) &= \sigma_2(\vec{b}, -\vec{\lambda}) = \begin{cases} -1, & (\vec{b} \cdot \vec{\lambda}) > 0 \\ 1, & (\vec{b} \cdot \vec{\lambda}) < 0 \end{cases} \\ &= -\text{sign}(\vec{b} \cdot \vec{\lambda}).\end{aligned}\quad (6.33)$$

Знайдемо середнє значення добутку

$$\begin{aligned}\sigma_1(\vec{a}, \vec{\lambda}_1) \sigma_2(\vec{b}, \vec{\lambda}_2) &= -\sigma_1(\vec{a}, \vec{\lambda}) \sigma_2(\vec{b}, \vec{\lambda}) \\ &= -\text{sign}(\vec{a} \cdot \vec{\lambda}) \text{sign}(\vec{b} \cdot \vec{\lambda}),\end{aligned}\quad (6.34)$$

де усереднення проводиться за всіма можливими значеннями напрямку вектора $\vec{\lambda}$:

$$\begin{aligned}\Sigma_{ab} &= \langle \sigma_1(\vec{a}, \vec{\lambda}) \sigma_2(\vec{b}, -\vec{\lambda}) \rangle \\ &= -\frac{1}{4\pi} \int \sigma_1(\vec{a}, \vec{\lambda}) \sigma_2(\vec{b}, \vec{\lambda}) d\Omega_{\lambda} \\ &= -\frac{1}{4\pi} \int \text{sign}(\vec{a} \cdot \vec{\lambda}) \text{sign}(\vec{b} \cdot \vec{\lambda}) d\Omega_{\lambda}.\end{aligned}\quad (6.35)$$

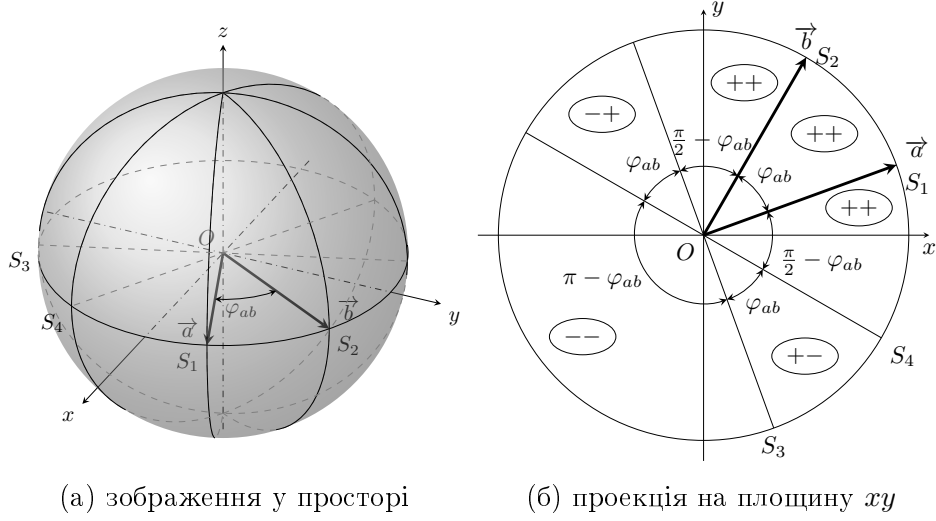


Рис. 6.3: Схема розташування \vec{a} , \vec{b} та сфера можливих напрямків $\vec{\lambda}$

Усереднення за напрямками параметра $\vec{\lambda}$ еквівалентно усередненню на всьому ансамблі копій стану $|\psi^-\rangle$.

Для обчислення значення Σ_{ab} розглянемо Рис. 6.3а. З однієї точки O (початок координат) проведено вектори \vec{a} та \vec{b} ; при цьому оберемо систему координат так, щоб ці вектори лежали у площині xy . Проведемо також сферичну поверхню одиничного радіусу з центром в точці O . Кожній точці на поверхні сфери відповідає певний вектор $\vec{\lambda}$, що має початок у точці O . Через початок координат також проведемо чотири (пів)площини, перпендикулярні площині xy :

- S_1 — півплощина, в якій лежить вектор \vec{a} ;
- S_2 — півплощина, в якій лежить вектор \vec{b} ;
- S_3 — площина, перпендикулярна до вектора \vec{a} ;
- S_4 — площина, перпендикулярна до вектора \vec{b} .

Проекцію всієї схеми на площину xy , в якій лежать вектори \vec{a} та \vec{b} , зображено на Рис. 6.3б.

Прийmemo за “полюси” точки перетину осі z , див. Рис. 6.3а, зі сферичною поверхнею. Тоді лінії перетину площин S_1, S_2, S_3, S_4 зі сферою являють собою “меридіани”, які розділяють сферичну поверхню на окремі ділянки. У всіх точках сферичної поверхні між двома сусідніми меридіанами, величини $\text{sign}(\vec{a} \cdot \vec{\lambda})$ та $\text{sign}(\vec{b} \cdot \vec{\lambda})$ мають постійні значення. На Рис. 6.3б символами “+” та “-” позначені значення знаків

6.3. Приклад моделі, побудованої на основі локального реалізму¹²⁷

функцій sign , причому перший знак відноситься до $\text{sign}(\vec{a} \cdot \vec{\lambda})$, а другий — до $\text{sign}(\vec{b} \cdot \vec{\lambda})$. Наприклад, \bigoplus означає, що $\text{sign}(\vec{a} \cdot \vec{\lambda}) = 1$, і $\text{sign}(\vec{b} \cdot \vec{\lambda}) = -1$. Враховуючи все сказане, тепер можемо обчислити величину Σ_{ab} . Сферичну координату θ вектора $\vec{\lambda}$ будемо обчислювати від осі z , а кут φ — навколо точки O в площині xy від меридіану площини S_3 :

$$\begin{aligned}\Sigma_{ab} &= -\frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \text{sign}(\vec{a} \cdot \vec{\lambda}) \text{sign}(\vec{b} \cdot \vec{\lambda}) \sin \theta d\theta d\varphi \\ &= -\frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} \text{sign}(\vec{a} \cdot \vec{\lambda}) \text{sign}(\vec{b} \cdot \vec{\lambda}) d\varphi \\ &= -\frac{1}{2\pi} \left[\int_0^{\varphi_{ab}} 1 \cdot (-1) d\varphi + \int_{\varphi_{ab}}^\pi 1 \cdot 1 d\varphi + \int_\pi^{\pi+\varphi_{ab}} (-1) \cdot 1 d\varphi \right. \\ &\quad \left. + \int_{\pi+\varphi_{ab}}^{2\pi} (-1) \cdot (-1) d\varphi \right] \\ &= -1 + \frac{2}{\pi} \varphi_{ab}.\end{aligned}\tag{6.36}$$

Аналогічно отримаємо:

$$\begin{aligned}\Sigma_{ad} &= \langle \sigma_1(\vec{a}, \vec{\lambda}) \sigma_2(\vec{d}, -\vec{\lambda}) \rangle = -1 + \frac{2}{\pi} \varphi_{ad}, \\ \Sigma_{cb} &= \langle \sigma_1(\vec{c}, \vec{\lambda}) \sigma_2(\vec{b}, -\vec{\lambda}) \rangle = -1 + \frac{2}{\pi} \varphi_{cb}, \\ \Sigma_{cd} &= \langle \sigma_1(\vec{c}, \vec{\lambda}) \sigma_2(\vec{d}, -\vec{\lambda}) \rangle = -1 + \frac{2}{\pi} \varphi_{cd}.\end{aligned}\tag{6.37}$$

Отже, модуль кореляційної функції Белла запишеться у вигляді

$$\begin{aligned}|\langle \beta \rangle| &= \left| \langle \sigma_1(\vec{a}, \vec{\lambda}) [\sigma_2(\vec{b}, \vec{\lambda}) + \sigma_2(\vec{d}, \vec{\lambda})] \right. \\ &\quad \left. + \sigma_1(\vec{c}, \vec{\lambda}) [\sigma_2(\vec{b}, \vec{\lambda}) - \sigma_2(\vec{d}, \vec{\lambda})] \rangle \right| \\ &= |\Sigma_{ab} + \Sigma_{ad} + \Sigma_{cb} - \Sigma_{cd}| \\ &= \left| 2 - \frac{2}{\pi} (\varphi_{ab} + \varphi_{ad} + \varphi_{cb} - \varphi_{cd}) \right| \\ &= 2 \left| 1 - \frac{2}{\pi} \varphi_{ab} \right| \leq 2.\end{aligned}\tag{6.38}$$

Виявляється, що для будь-якого розташування векторів $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}, \vec{d}$ $|\langle \beta \rangle| \leq 2$, тобто нерівність Белла не порушується.

6.4 Питання та задачі для самостійної роботи

1. Довести, що (6.2) та (6.6) — це один і той самий стан.
2. Довести (6.23).
3. Обчислити вираз (6.22).

Література

- [1] Einstein A., Podolsky B. and Rosen N. — Phys. Rev. — vol. 47. — May 15, 1935
- [2] Bell J.S. — Physics. — Long Island City, N.Y. — vol. 1. — p. 195. — 1964
- [3] Aspect A., Dalibard J. and Roger G. — Phys. Rev. Lett. — vol. 49. — p. 1804. — 1982
- [4] Hensen B., Bernien H, Dreau A.E. et al. — Nature. — vol. 526. — p. 682–686. — 2015

Розділ 7

Операція вимірювання у квантовій механіці

Поняття *вимірювання* займає центральну роль у квантовій теорії. Гарячі дискусії Альберта Ейнштейна з Нільсом Бором щодо тлумачення результатів вимірювання розглянуто нами в розділах “Парадокс Ейнштейна-Подольського-Розена” та “Нерівність Белла”. Тут ми зосередимо увагу саме на сучасному розумінні змісту операції вимірювання у квантовій механіці. Вимірювання є обов’язковим елементом квантових обчислень, оскільки під час виконання обчислювальної процедури виникає необхідність вилучати проміжну або кінцеву інформацію з обчислювальної системи.

В той час, як у класичній механіці можна повністю абстрагуватися від впливу процесу вимірювання на стан фізичного об’єкту (котрий, як правило, являє собою макроскопічне тіло), вимірювання у квантовій механіці неминуче та суттєво впливає на стан квантової системи, змінюючи його незворотнім чином.

Відомо, що еволюція в часі замкненої квантової системи відбувається згідно рівняння Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle, \quad (7.1)$$

де \hat{H} — гамільтоніан системи.

Процес еволюції замкненої системи являє собою унітарне перетворення хвильової функції від початкового стану в момент часу t_0 до стану в деякий момент t під дією унітарного оператора $\hat{U} = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t - t_0) \right]$:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \hat{U} |\psi(t_0)\rangle && \text{— для чистого стану} \\ \hat{\rho}(t) &= \hat{U} \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^\dagger && \text{— для змішаного стану,} \end{aligned} \quad (7.2)$$

де $\hat{\rho}$ — оператор густини, що описує стан системи.

Унітарні операції залишають незмінними норму хвильової функції або матриці густини. Для унітарного перетворення існує зворотня операція:

$$\begin{aligned} |\psi(t_0)\rangle &= \hat{U}^{-1} |\psi(t)\rangle = \hat{U}^\dagger |\psi(t)\rangle \\ \hat{\rho}(t_0) &= \hat{U}^\dagger \hat{\rho}(t) \hat{U}. \end{aligned} \quad (7.3)$$

Під час вимірювання відбувається взаємодія мікроскопічної квантової системи з макроскопічним тілом — вимірювальним приладом. При цьому квантова система перестає бути замкненою, і тому її еволюція вже не може бути описана за допомогою (7.1) та (7.2). Отже, *процедура вимірювання у квантовій механіці не є унітарною операцією*. Вона змінює стан системи незворотнім чином; при цьому норма хвильової функції (або матриці густини) змінюється (зменшується).

Міркуючи формально, можна вимірювальний прилад, який, по суті, складається з мікроскопічних атомів та молекул, об'єднати з об'єктом, над яким виконується вимірювання, в одну квантову систему. Вважаючи об'єднану систему замкненою, процедуру вимірювання можна тоді розглядати як еволюцію згідно рівняння Шредінгера (7.1), або як унітарну операцію (7.2). Але, звичайно, такий підхід не може дати жодних практичних наслідків, оскільки гамільтоніан об'єднаної системи виявляється настільки складним, що розв'язання рівняння Шредінгера з наступним відокремленням стану системи, над якою виконано процедуру вимірювання, виявляється не під силу ані сучасним, ані (скоріш за все) майбутнім обчислювальним приладам. Отже, теорію квантового вимірювання довелося будувати на основі введення деяких постулатів, що спираються на результати реальних експериментів з вимірювання.

Формалізм квантового вимірювання будується за таким правилом, щоб для фізичних спостережуваних квантова механіка давала відповіді на питання:

- *Які результати отримуються при вимірюванні?*
- *Які імовірності отримання кожного з можливих результатів?*
- *Що являє собою стан системи після вимірювання?*

Останнє питання важливе тому, що сама процедура вимірювання впливає на квантову систему.

Пояснимо на простому прикладі, як саме квантова механіка дає відповіді на дані питання.

Нехай в лабораторії готуються тотожні копії спінового стану частинки зі спіном $s = \frac{1}{2}$:

$$|\chi\rangle = \alpha \left| \frac{1}{2} \right\rangle + \beta \left| -\frac{1}{2} \right\rangle, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (7.4)$$

Нехай вимірювальний прилад (фільтр Штерна-Герлаха) налаштований на вимірювання проекції спіну на вісь квантування z . Що може сказати квантова механіка про можливі результати вимірювання ще до самої процедури реального вимірювання?

З вигляду хвильової функції (7.4) можна зробити такі висновки:

- а) З імовірністю $w_a = |\alpha|^2$ в результаті вимірювання отримується значення проекції спіну $s_z = \frac{1}{2}$. При цьому, після вимірювання частинка опиниться у спіновому стані $|\chi_a\rangle = \left| \frac{1}{2} \right\rangle$.
- б) З імовірністю $w_b = |\beta|^2$ значення проекції спіну дорівнює $s_z = -\frac{1}{2}$, а кінцевий спіновий стан частинки є $|\chi_b\rangle = \left| -\frac{1}{2} \right\rangle$.

Тобто, стан частинки після вимірювання залежить від значення проекції спіну, отриманого при вимірюванні. Важливо зазначити, що сам вигляд хвильової функції не дає відповіді на те, який саме результат — а) чи б) — буде реалізований в результаті одного акту вимірювання над окремою копією приготованих станів (7.4). Таке передбачення *неможливе абсолютно*, тобто вважається, що статистичний характер результатів вимірювання у квантовій механіці відображає закон природи.

Оскільки параметри α і β пов'язані умовою нормування $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, то за певного вибору загального фазового множника, стан (7.4) можна виразити через два дійсних параметри θ і φ :

$$|\chi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} \left| \frac{1}{2} \right\rangle + e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle. \quad (7.5)$$

Якщо фільтр Штерна-Герлаха орієнтувати таким чином, щоб він вимірював проекцію спіну частинки на вісь, напрямок якої задається одиничним вектором $\vec{n}(\theta, \varphi)$, де θ і φ — сферичні координати вектора \vec{n} , то результат вимірювання стану $|\chi\rangle$ передбачається однозначно: проекція спіну на напрямок \vec{n} дорівнює $s_{\vec{n}} = \frac{1}{2}$, причому вимірювання не змінює початковий стан (7.4) або еквівалентний йому (7.5). Узагальнюючи даний результат, можна сформулювати твердження:

У випадку приготованого *чистого стану* завжди існує, як виключення, таке вимірювання, при якому результат цього вимірювання

отримується однозначно, і при цьому процедура вимірювання не змінює початковий стан системи. Забігаючи наперед, можна сказати, що такий результат отримується, якщо вимірювання відбувається в базисі, де стан, над яким виконується вимірювання, сам є одним із базисних елементів.

Останнє твердження буде зрозумілим трохи згодом.

Перейдемо тепер до узагальнення і систематизації поняття вимірювання у квантовій механіці.

7.1 Проективні вимірювання (PVM-вимірювання)

7.1.1 Постулат фон Неймана про вимірювання

Нехай задано простір H_A станів квантової системи A . У цьому просторі оберемо деякий ортонормований базис $\Phi = \{|\varphi_k\rangle\}$. Тоді (**постулат про вимірювання**):

Для заданого ортонормованого базиса $\Phi = \{|\varphi_k\rangle\}$ можна провести *вимірювання фон Неймана* на системі H_A відносно базиса Φ з початковим станом

$$|\psi\rangle = \sum_k \alpha_k |\varphi_k\rangle, \quad (7.6)$$

в результаті якого на виході отримується одне із чисел $k = n$, а система опиняється в стані $|\varphi_n\rangle$. Більш того, при заданому стані

$$|\psi\rangle = \sum_k \alpha_k |\varphi_k\rangle \otimes |\chi_k\rangle \quad (7.7)$$

з двокомпонентного простору станів $H_A \otimes H_B$ (де $|\varphi_k\rangle$ — ортонормовані вектори, а $|\chi_k\rangle$ — вектори, нормовані на одиницю, але не обов'язково ортогональні), проведення вимірювання на системі A в базисі Φ дасть в результаті одне з можливих $k = n$ з імовірністю $|\alpha_n|^2$, а двокомпонентна система опиниться в стані $|\varphi_n\rangle \otimes |\chi_n\rangle$.

Якщо базисні стани $|\varphi_k\rangle$ є власними станами деякого ермітового оператора \hat{A} з відповідними власними значеннями a_k , який відповідає фізичній спостережуваній величині A

$$\hat{A} |\varphi_k\rangle = a_k |\varphi_k\rangle, \quad (7.8)$$

то при вимірюванні величини \hat{A} у базисі власних векторів Φ отримаємо одне з можливих власних значень a_n , а система при цьому опиниться у

відповідному власному стані $|\varphi_n\rangle$ з імовірністю $|\alpha_n|^2$. Оператор \hat{A} можна представити через власні вектори $|\varphi_k\rangle$ у вигляді

$$\hat{A} = \sum_k a_k |\varphi_k\rangle \langle \varphi_k| = \sum_k a_k \hat{P}_k, \quad (7.9)$$

який називається **спектральним представленням оператора \hat{A}** .

Оператор $\hat{P}_n = |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|$ являє собою проекційний оператор (проектор), який проектує довільний стан $|\psi\rangle$ на стан $|\varphi_n\rangle$: $\hat{P}_n |\varphi_k\rangle = \delta_{nk} |\varphi_k\rangle$,

$$\hat{P}_n |\psi\rangle = \hat{P}_n \sum_k \alpha_k |\varphi_k\rangle = \sum_k \alpha_k \hat{P}_n |\varphi_k\rangle = \sum_k \alpha_k \delta_{nk} |\varphi_k\rangle = \alpha_n |\varphi_n\rangle. \quad (7.10)$$

Середнє значення проектора \hat{P}_n у стані $|\psi\rangle$

$$\langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle = |\alpha_n|^2$$

має сенс імовірності того, що в результаті вимірювання стану $|\psi\rangle$ в базисі $\{|\varphi_k\rangle\}$ система опиниться у стані $|\varphi_n\rangle$.

Оператором проектування називається ермітовий оператор $\hat{P} = \hat{P}^\dagger$, що має властивість $\hat{P}^2 = \hat{P}$.

Будь-який оператор проектування, визначений в деякому просторі квантових станів, має два власних значення: $P_1 = 1$ та $P_0 = 0$.

Повний простір станів \mathcal{P} можна умовно поділити на два підпростори:

- підпростір \mathcal{P}_1 , на який проектує оператор \hat{P} ; довільний стан з \mathcal{P}_1 є власним станом оператора проектування \hat{P} , що відповідає власному значенню $P_1 = 1$.
- підпростір $\mathcal{P}_0 = \mathcal{P} - \mathcal{P}_1$ — доповнення підпростору \mathcal{P}_1 до повного простору \mathcal{P} ; довільний стан з підпростору \mathcal{P}_0 є власним станом проектора \hat{P} , що відповідає власному значенню $P_0 = 0$.

Будь-який стан $|\psi\rangle$ з простору \mathcal{P} можна представити у вигляді суперпозиції

$$|\psi\rangle = \alpha |\psi_1\rangle + \beta |\psi_0\rangle, \quad (7.11)$$

де $|\psi_1\rangle \in \mathcal{P}_1$, а $|\psi_0\rangle \in \mathcal{P}_0$.

Тоді очевидно, що

$$\begin{aligned} \hat{P} |\psi\rangle &= \alpha \hat{P} |\psi_1\rangle + \beta \hat{P} |\psi_0\rangle \\ &= \alpha P_1 |\psi_1\rangle + \beta P_0 |\psi_0\rangle = \alpha |\psi_1\rangle. \end{aligned} \quad (7.12)$$

Наприклад, для проектора $\hat{P}_n = |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n|$, наведеного вище, підпростором \mathcal{P}_1 є один вектор стану $|\varphi_n\rangle$, в той час як підпростір \mathcal{P}_0 включає в себе всі вектори, які при розкладі за базисом $\Phi = \{|\varphi_k\rangle\}$ не містять доданків з базисним вектором $|\varphi_n\rangle$.

Два проектори називаються ортогональними один до одного, якщо їхній добуток дорівнює нулю:

$$\hat{P}_n \hat{P}_k = \delta_{nk} \hat{P}_n. \quad (7.13)$$

В проективному вимірюванні сукупності взаємовиключних результатів вимірювання відповідає система взаємно ортогональних проекційних операторів. Ортогональна система проекторів називається повною, якщо вони задовольняють умову

$$\sum_k \hat{P}_k = \hat{I}, \quad (7.14)$$

де \hat{I} — одиничний оператор. Рівності (7.14) можна надати дещо інше тлумачення, а саме: сума імовірностей всіх можливих наслідків процесу вимірювання дорівнює одиниці.

Число проекторів в ортогональній системі не може перевищувати розмірність гільбертового простору, в якому визначені проекційні оператори.

В якості прикладів повної системи взаємно ортогональних проекторів у просторі однокубітових станів можна навести такі пари операторів:

$$\begin{cases} \hat{P}_0 = |0\rangle \langle 0| \\ \hat{P}_1 = |1\rangle \langle 1| \end{cases} \Rightarrow \hat{P}_0 + \hat{P}_1 = \hat{I}, \quad (7.15)$$

$$\begin{cases} \hat{P}_+ = |+\rangle \langle +| \\ \hat{P}_- = |-\rangle \langle -| \end{cases} \Rightarrow \hat{P}_+ + \hat{P}_- = \hat{I},$$

де введено позначення

$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle \pm |1\rangle). \quad (7.16)$$

Очевидно, що проектори з першої пари не ортогональні до проекторів з другої пари, оскільки їхній добуток не рівний нулю. Наприклад:

$$\begin{aligned} \hat{P}_+ \hat{P}_0 |0\rangle &= \frac{1}{2} (|0\rangle + |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle, \\ \hat{P}_0 \hat{P}_+ |0\rangle &= \frac{1}{2} |0\rangle. \end{aligned} \quad (7.17)$$

Якщо число проєкційних операторів в ортогональній системі дорівнює розмірності простору станів, у якому вони визначені, то вимірювання, що відповідає такій системі проєкторів, називається *повним (або максимальним) вимірюванням*.

У повному вимірюванні кожний з операторів проєкує на окремий базисний стан: $\hat{P}_k = |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|$. Оскільки в одному і тому ж просторі можна обрати скільки завгодно ортонормованих базисів, то, очевидно, в одному гільбертовому просторі існує нескінченна множина систем ортогональних проєкторів, і кожній з таких систем відповідає своє проєктивне вимірювання, а кожному проєктору системи відповідає один із можливих результатів вимірювання.

Різницю між повним та неповним проєктивним вимірюванням розглянемо на прикладі вимірювання у просторі двочастинкових спінових станів. В якості ортонормованого базису в даному просторі оберемо три триплетних стани

$$\begin{aligned} |S=1, M=1\rangle &\equiv |11\rangle = \left|\frac{1}{2}\right\rangle_1 \otimes \left|\frac{1}{2}\right\rangle_2 \\ |S=1, M=0\rangle &\equiv |10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left|\frac{1}{2}\right\rangle_1 \otimes \left|-\frac{1}{2}\right\rangle_2 + \left|-\frac{1}{2}\right\rangle_1 \otimes \left|\frac{1}{2}\right\rangle_2 \right) \\ |S=1, M=-1\rangle &\equiv |1, -1\rangle = \left|-\frac{1}{2}\right\rangle_1 \otimes \left|-\frac{1}{2}\right\rangle_2 \end{aligned} \quad (7.18)$$

та один синглетний стан

$$|S=0, M=0\rangle \equiv |00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left|\frac{1}{2}\right\rangle_1 \otimes \left|-\frac{1}{2}\right\rangle_2 - \left|-\frac{1}{2}\right\rangle_1 \otimes \left|\frac{1}{2}\right\rangle_2 \right). \quad (7.19)$$

Будь-який вектор стану в двокубітовому просторі можна представити у вигляді

$$|\psi\rangle = \alpha_{11} |11\rangle + \alpha_{10} |10\rangle + \alpha_{1,-1} |1, -1\rangle + \alpha_{00} |00\rangle. \quad (7.20)$$

Повному вимірюванню двокубітових систем у базисі (7.18), (7.19) відповідає ортогональна система чотирьох проєкторів:

$$\begin{cases} \hat{P}_{11} = |11\rangle\langle 11| \\ \hat{P}_{10} = |10\rangle\langle 10| \\ \hat{P}_{1,-1} = |1, -1\rangle\langle 1, -1| \\ \hat{P}_{00} = |00\rangle\langle 00| \end{cases} : \quad \hat{P}_{11} + \hat{P}_{10} + \hat{P}_{1,-1} + \hat{P}_{00} = \hat{I}. \quad (7.21)$$

З явного вигляду (7.20) хвильової функції $|\psi\rangle$ та системи проєкторів (7.21) випливає можливість чотирьох альтернативних кінцевих результатів вимірювання: з імовірністю $w_{SM} = |\alpha_{SM}|^2$ отримаємо значення пари

чисел $\{SM\} = \{11; 10; 1, -1; 00\}$, і при цьому квантова система перейде у відповідний стан $|SM\rangle$.

Конкретні значення пари чисел $\{SM\}$ отримуються при реальному вимірюванні. Вони вказують на те, який саме з альтернативних результатів реалізувався в даному конкретному процесі вимірювання.

Кожному можливому результату вимірювання відповідає один проектор, оскільки відповідний кінцевий стан отримується зі співвідношення:

$$\hat{P}_{SM} |\psi\rangle = \alpha_{SM} |SM\rangle. \quad (7.22)$$

В (7.22) кінцевий стан виявляється ненормованим. Тому нормований стан прийнято записувати у вигляді

$$|SM\rangle = \frac{\hat{P}_{SM} |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | \hat{P}_{SM} | \psi \rangle}}, \quad (7.23)$$

оскільки

$$\langle \psi | \hat{P}_{SM} | \psi \rangle = |\alpha_{SM}|^2. \quad (7.24)$$

В якості системи проекторів, що відповідає неповному проективному вимірюванню в тому ж самому просторі, розглянемо систему, яка складається з двох операторів проектування \hat{P}_t і \hat{P}_s :

$$\hat{P}_t = \frac{1}{4} \left(3\hat{I} + \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2 \right), \quad \hat{P}_s = \frac{1}{4} \left(\hat{I} - \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2 \right), \quad (7.25)$$

де \hat{P}_t та \hat{P}_s — проектори на триплетні та синглетні стани відповідно, а $\hat{\sigma}_i$, $i = 1, 2$ — оператор Паулі i -ї частинки.

Очевидно, що дана пара операторів утворює повну систему (не слід плутати повну систему операторів з повним вимірюванням):

$$\hat{P}_t + \hat{P}_s = \hat{I}, \quad \hat{P}_t \hat{P}_s = 0. \quad (7.26)$$

Результат дії операторів (7.25) на стан (7.20) має вигляд:

$$\begin{aligned} \hat{P}_t |\psi\rangle &= \alpha_{11} |11\rangle + \alpha_{10} |10\rangle + \alpha_{1,-1} |1, -1\rangle \\ \hat{P}_s |\psi\rangle &= \alpha_{00} |00\rangle. \end{aligned} \quad (7.27)$$

Вимірювання, що відповідає системі операторів $\{\hat{P}_t, \hat{P}_s\}$, є неповним, оскільки число операторів у системі виявляється меншим за розмірність двочастинкового спінового простору.

7.1.2 Операція вимірювання над багатокomпонентними квантовими системами

Розглянуті вище приклади демонструють зміст повного і неповного вимірювання над двокомпонентною квантовою системою. Однак ці приклади не вичерпують усіх можливих способів вимірювання над дво- та багатокomпонентними системами.

Звернемось до другої частини постулату фон Неймана про вимірювання в базисі $\Phi = \{|\varphi_k\rangle\}$ над системами, хвильові функції яких представляються у вигляді (7.7)

$$|\psi\rangle = \sum_k \alpha_k |\varphi_k\rangle \otimes |\chi_k\rangle.$$

Поняття “двокомпонентний простір” будемо розуміти в узагальненому сенсі. Якщо квантова система складається з двох або більше компонент, то завжди таку систему можна умовно розділити на дві підсистеми, і вимірювання проводити над однією з цих двох компонент згідно постулату фон Неймана.

Можливі способи вимірювання над багатокomпонентними, зокрема над багатокубітовими, системами розглянемо спочатку на прикладі трикубітових систем. Повний базис у просторі станів трьох кубітів налічує вісім базисних станів. Зокрема, обчислювальний базис представляється наступними станами:

$$|000\rangle \quad |001\rangle \quad |010\rangle \quad |011\rangle \quad |100\rangle \quad |101\rangle \quad |110\rangle \quad |111\rangle. \quad (7.28)$$

В (7.28) опущено позначення номерів кубітів, що не повинно викликати непорозуміння. Вважається, що номери кубітів зростають зліва направо, наприклад,

$$|101\rangle \equiv |1\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 \otimes |1\rangle_3.$$

Будь-який трикубітовий стан можна представити у вигляді розкладу за базисом (7.28). Зрозуміло, що деякі з коефіцієнтів у такій лінійній комбінації можуть дорівнювати нулю.

Розглянемо можливі способи вимірювання над трикубітовою квантовою системою, стан якої представлений, наприклад, хвильовою функцією

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{15}} |000\rangle - \frac{2}{\sqrt{15}} |011\rangle + \sqrt{\frac{2}{21}} |101\rangle - \sqrt{\frac{12}{21}} |110\rangle. \quad (7.29)$$

За заданими хвильовою функцією та базисом для кожного способу вимірювання ми можемо встановити:

- всі альтернативні можливі результати вимірювання;
- імовірності реалізації кожного з можливих результатів;
- стан трикубітової системи після операції вимірювання для кожного окремого можливого результату вимірювання.

Перш за все, слід перевірити правильність нормування хвильової функції, представленої у вигляді (7.29):

$$\left| \frac{1}{\sqrt{15}} \right|^2 + \left| -\frac{2}{\sqrt{15}} \right|^2 + \left| \sqrt{\frac{2}{21}} \right|^2 + \left| -\sqrt{\frac{12}{21}} \right|^2 = 1.$$

Отже, в сенсі нормування — все гаразд.

Приступимо тепер до різних способів вимірювання.

Спосіб 1. Вимірювання стану першого кубіту в обчислювальному базисі.

Над станом (7.29) слід провести проективне вимірювання фон Неймана на першому кубіті в обчислювальному базисі. Для цього представимо трикубітову систему у вигляді двох підсистем. У першу підсистему входить лише перший кубіт; друга підсистема являє собою сукупність другого та третього кубітів. Трикубітовий стан $|\psi\rangle$ представимо у формі (7.7), наведений у постулаті фон Неймана

$$\begin{aligned} |\psi\rangle = & \frac{1}{\sqrt{3}} |0\rangle \otimes \left(\frac{1}{\sqrt{5}} |00\rangle - \frac{2}{\sqrt{5}} |11\rangle \right) \\ & + \sqrt{\frac{2}{3}} |1\rangle \otimes \left(\frac{1}{\sqrt{7}} |01\rangle - \sqrt{\frac{6}{7}} |10\rangle \right), \end{aligned} \quad (7.30)$$

де в якості ортонормованих станів $|\varphi_k\rangle$ першої підсистеми виступають стани $|0\rangle$ та $|1\rangle$ першого кубіту, а в якості станів $|\chi_k\rangle$ — нормовані стани системи другого та третього кубітів.

Операції вимірювання над першим кубітом відповідає повна ортогональна система проекторів

$$\hat{P}_0 = |0\rangle \langle 0| \quad \hat{P}_1 = |1\rangle \langle 1|, \quad (7.31)$$

що визначені у просторі станів першого кубіту. Кожному з двох проекторів (7.31) відповідає один з альтернативних можливих результатів вимірювання.

Так, проектору \hat{P}_0 відповідає такий результат:

1. На вимірювальному приладі отримаємо класичне число “0”, яке вказує на те, що перший кубіт знаходиться в стані $|0\rangle$.
2. Після вимірювання трикубітова система опиниться у (нормованому) стані

$$\begin{aligned} |\Psi_0\rangle &= \frac{\hat{P}_0 |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | \hat{P}_0 | \psi \rangle}} = |0\rangle \otimes \left(\frac{1}{\sqrt{5}} |00\rangle - \frac{2}{\sqrt{5}} |11\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{5}} |000\rangle - \frac{2}{\sqrt{5}} |011\rangle. \end{aligned} \quad (7.32)$$

3. Імовірність такого результату, як це слідує з (7.30), дорівнює

$$w_0 = \langle \psi | \hat{P}_0 | \psi \rangle = \left| \frac{1}{\sqrt{3}} \right|^2 = \frac{1}{3}. \quad (7.33)$$

Аналогічно, проектору \hat{P}_1 відповідає такий альтернативний результат вимірювання:

1. Отримується класичне число “1”, яке вказує на те, що перший кубіт знаходиться в стані $|1\rangle$.
2. Кінцевий стан трикубітової системи має вигляд

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \frac{\hat{P}_1 |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | \hat{P}_1 | \psi \rangle}} = |1\rangle \otimes \left(\frac{1}{\sqrt{7}} |01\rangle - \sqrt{\frac{6}{7}} |10\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{7}} |101\rangle - \sqrt{\frac{6}{7}} |110\rangle. \end{aligned} \quad (7.34)$$

3. Імовірність такого результату вимірювання дорівнює

$$w_1 = \langle \psi | \hat{P}_1 | \psi \rangle = \left| \sqrt{\frac{2}{3}} \right|^2 = \frac{2}{3}. \quad (7.35)$$

Як і повинно бути, з (7.33) та (7.35) маємо $w_0 + w_1 = 1$.

Спосіб 2. Вимірювання стану першого кубіту в базисі Адамара.

Власні вектори оператора Адамара $\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ в обчислювальному базисі мають вигляд:

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle) \quad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle). \quad (7.36)$$

Тоді, звичайно, базисні стани $|0\rangle$ та $|1\rangle$ можна представити через ортонормовані стани Адамара:

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle) \quad |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle). \quad (7.37)$$

Замінюючи тепер в (7.30) обчислювальний базис першого кубіта на базис Адамара за допомогою співвідношень (7.37), представимо трикубітовий стан $|\psi\rangle$ у вигляді, зручному для застосування постулату фон Неймана

$$\begin{aligned} |\psi\rangle = & \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle \otimes \left(\frac{1}{\sqrt{15}}|00\rangle + \sqrt{\frac{2}{21}}|01\rangle - \frac{2}{\sqrt{7}}|10\rangle - \frac{2}{\sqrt{15}}|11\rangle \right) \\ & + \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle \otimes \left(\frac{1}{\sqrt{15}}|00\rangle - \sqrt{\frac{2}{21}}|01\rangle + \frac{2}{\sqrt{7}}|10\rangle - \frac{2}{\sqrt{15}}|11\rangle \right). \end{aligned} \quad (7.38)$$

Операції вимірювання стану першого кубіту в базисі Адамара відповідає тепер повна система проекторів

$$\hat{P}_+ = |+\rangle\langle+| \quad \hat{P}_- = |-\rangle\langle-|, \quad (7.39)$$

яким відповідають також два можливих альтернативних результати.

Так, проектору \hat{P}_+ відповідає варіант, в якому на приладі отримуємо символ “+” (або інший запрограмований символ), який вказує на те, що перший кубіт в результаті вимірювання опинився у стані $|+\rangle$, і з імовірністю

$$w_+ = \langle\psi|\hat{P}_+|\psi\rangle = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2} \quad (7.40)$$

квантова трикубітова система переходить у стан

$$\begin{aligned} |\psi_+\rangle &= \frac{\hat{P}_+|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\hat{P}_+|\psi\rangle}} \\ &= |+\rangle \otimes \left(\frac{1}{\sqrt{15}}|00\rangle + \sqrt{\frac{2}{21}}|01\rangle - \frac{2}{\sqrt{7}}|10\rangle - \frac{2}{\sqrt{15}}|11\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{30}}|000\rangle + \frac{1}{\sqrt{21}}|001\rangle - \sqrt{\frac{2}{7}}|010\rangle - \sqrt{\frac{2}{15}}|011\rangle \\ &\quad + \frac{1}{\sqrt{30}}|100\rangle + \frac{1}{\sqrt{21}}|101\rangle - \sqrt{\frac{2}{7}}|110\rangle - \sqrt{\frac{2}{15}}|111\rangle. \end{aligned} \quad (7.41)$$

Проектору \hat{P}_- відповідає результат вимірювання, в якому отримується символ “–”, і з імовірністю

$$w_- = \langle \psi | \hat{P}_- | \psi \rangle = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2} \quad (7.42)$$

трикубітова система переходить у стан

$$\begin{aligned} |\psi_-\rangle &= \frac{\hat{P}_- |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | \hat{P}_- | \psi \rangle}} \\ &= |-\rangle \otimes \left(\frac{1}{\sqrt{15}} |00\rangle - \sqrt{\frac{2}{21}} |01\rangle + \frac{2}{\sqrt{7}} |10\rangle - \frac{2}{\sqrt{15}} |11\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{30}} |000\rangle - \frac{1}{\sqrt{21}} |001\rangle + \sqrt{\frac{2}{7}} |010\rangle - \sqrt{\frac{2}{15}} |011\rangle \\ &\quad - \frac{1}{\sqrt{30}} |100\rangle + \frac{1}{\sqrt{21}} |101\rangle - \sqrt{\frac{2}{7}} |110\rangle + \sqrt{\frac{2}{15}} |111\rangle. \end{aligned} \quad (7.43)$$

Очевидно, що аналогічні однокубітові вимірювання можна провести як відносно другого, так і відносно третього кубітів.

Спосіб 3. Вимірювання стану системи двох перших кубітів в обчислювальній базисі.

Даному способу вимірювання відповідає повна система з чотирьох ортогональних проекторів:

$$\begin{aligned} \hat{P}_{00} &= |00\rangle \langle 00| & \hat{P}_{01} &= |01\rangle \langle 01| \\ \hat{P}_{10} &= |10\rangle \langle 10| & \hat{P}_{11} &= |11\rangle \langle 11|, \end{aligned} \quad (7.44)$$

кожний з яких проектує на окремий базисний стан. Той самий стан (7.29) представимо тепер у вигляді

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{15}} |00\rangle \otimes |0\rangle - \frac{2}{\sqrt{15}} |01\rangle \otimes |1\rangle + \sqrt{\frac{2}{21}} |10\rangle \otimes |1\rangle - \sqrt{\frac{12}{21}} |11\rangle \otimes |0\rangle. \quad (7.45)$$

Чотири можливі альтернативні результати вимірювання представлено в Таблиці 7.1

Табл. 7.1: Результати вимірювань перших двох кубітів стану $|\psi\rangle$ в обчислювальному базисі

| № | Проектор | Символ на приладі | Імовірність | Кінцевий стан |
|---|----------------|-------------------|-----------------|---------------|
| 1 | \hat{P}_{00} | “00” | $\frac{1}{15}$ | $ 000\rangle$ |
| 2 | \hat{P}_{01} | “01” | $\frac{4}{15}$ | $ 011\rangle$ |
| 3 | \hat{P}_{10} | “10” | $\frac{2}{21}$ | $ 101\rangle$ |
| 4 | \hat{P}_{11} | “11” | $\frac{12}{21}$ | $ 110\rangle$ |

Спосіб 4. Двокубітове вимірювання в базисі Белла.

Розглянемо вимірювання перших двох кубітів у трикубітовому стані (7.45) в базисі Белла

$$\begin{aligned}
 |\Phi^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |11\rangle) & |\Phi^-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle - |11\rangle) \\
 |\Psi^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle + |10\rangle) & |\Psi^-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle - |10\rangle).
 \end{aligned} \tag{7.46}$$

Очевидно, що обчислювальний двокубітовий базис можна за допомогою (7.46) виразити через базис Белла:

$$\begin{aligned}
 |00\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Phi^+\rangle + |\Phi^-\rangle) & |11\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Phi^+\rangle - |\Phi^-\rangle) \\
 |01\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Psi^+\rangle + |\Psi^-\rangle) & |10\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Psi^+\rangle - |\Psi^-\rangle).
 \end{aligned} \tag{7.47}$$

Тоді (7.45), використовуючи (7.47), тотожними перетвореннями можна привести до форми

$$\begin{aligned}
 |\psi\rangle &= \left(\frac{1}{\sqrt{30}} - \sqrt{\frac{2}{7}} \right) |\Phi^+\rangle \otimes |0\rangle + \left(\frac{1}{\sqrt{30}} + \sqrt{\frac{2}{7}} \right) |\Phi^-\rangle \otimes |0\rangle \\
 &+ \left(\frac{1}{\sqrt{21}} - \sqrt{\frac{2}{15}} \right) |\Psi^+\rangle \otimes |1\rangle - \left(\frac{1}{\sqrt{21}} + \sqrt{\frac{2}{15}} \right) |\Psi^-\rangle \otimes |1\rangle.
 \end{aligned} \tag{7.48}$$

Операції повного вимірювання в базисі Белла відповідає ортогональна система з чотирьох проекторів

$$\begin{aligned}
 \hat{P}_{\Phi^+} &= |\Phi^+\rangle \langle \Phi^+| & \hat{P}_{\Phi^-} &= |\Phi^-\rangle \langle \Phi^-| \\
 \hat{P}_{\Psi^+} &= |\Psi^+\rangle \langle \Psi^+| & \hat{P}_{\Psi^-} &= |\Psi^-\rangle \langle \Psi^-|.
 \end{aligned} \tag{7.49}$$

Альтернативні результати вимірювання перших двох кубітів стану $|\psi\rangle$ у базисі Белла представлено в Таблиці 7.2.

Табл. 7.2: Результати вимірювань перших двох кубітів стану $|\psi\rangle$ у базисі Белла

| № | Проектор | Символ на приладі | Імовірність | Кінцевий стан |
|---|--------------------|-------------------|--|------------------------------------|
| 1 | \hat{P}_{Φ^+} | “ Φ^+ ” | $\left \frac{1}{\sqrt{30}} - \sqrt{\frac{2}{7}} \right ^2$ | $ \Phi^+\rangle \otimes 0\rangle$ |
| 2 | \hat{P}_{Φ^-} | “ Φ^- ” | $\left \frac{1}{\sqrt{30}} + \sqrt{\frac{2}{7}} \right ^2$ | $ \Phi^-\rangle \otimes 0\rangle$ |
| 3 | \hat{P}_{Ψ^+} | “ Ψ^+ ” | $\left \frac{1}{\sqrt{21}} - \sqrt{\frac{2}{15}} \right ^2$ | $ \Psi^+\rangle \otimes 1\rangle$ |
| 4 | \hat{P}_{Ψ^-} | “ Ψ^- ” | $\left \frac{1}{\sqrt{21}} + \sqrt{\frac{2}{15}} \right ^2$ | $ \Psi^-\rangle \otimes 1\rangle$ |

Звичайно, імовірності всіх можливих результатів вимірювання, а також всі альтернативні кінцеві трикубітові стани можна обчислювати, використовуючи лише обчислювальний базис. Для цього слід всі проектори представити в обчислювальному базисі:

$$\begin{aligned}
 \hat{P}_{\Phi^+} &= |\Phi^+\rangle \langle \Phi^+| = \frac{1}{2} (|00\rangle \langle 00| + |00\rangle \langle 11| + |11\rangle \langle 00| + |11\rangle \langle 11|) \\
 \hat{P}_{\Phi^-} &= |\Phi^-\rangle \langle \Phi^-| = \frac{1}{2} (|00\rangle \langle 00| - |00\rangle \langle 11| - |11\rangle \langle 00| + |11\rangle \langle 11|) \\
 \hat{P}_{\Psi^+} &= |\Psi^+\rangle \langle \Psi^+| = \frac{1}{2} (|01\rangle \langle 01| + |01\rangle \langle 10| + |10\rangle \langle 01| + |10\rangle \langle 10|) \\
 \hat{P}_{\Psi^-} &= |\Psi^-\rangle \langle \Psi^-| = \frac{1}{2} (|01\rangle \langle 01| - |01\rangle \langle 10| - |10\rangle \langle 01| + |10\rangle \langle 10|).
 \end{aligned} \tag{7.50}$$

Далі, використовуючи хвильову функцію в обчислювальному базисі (7.29), знаходимо альтернативні кінцеві результати та відповідні імовірності за формулами

$$\begin{aligned}
 |\Phi^+\rangle \otimes |0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|000\rangle + |110\rangle) = \frac{\hat{P}_{\Phi^+} |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | \hat{P}_{\Phi^+} | \psi \rangle}} \Rightarrow w_1 = \langle \psi | \hat{P}_{\Phi^+} | \psi \rangle \\
 |\Phi^-\rangle \otimes |0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|000\rangle - |110\rangle) = \frac{\hat{P}_{\Phi^-} |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | \hat{P}_{\Phi^-} | \psi \rangle}} \Rightarrow w_2 = \langle \psi | \hat{P}_{\Phi^-} | \psi \rangle \\
 |\Psi^+\rangle \otimes |1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|011\rangle + |101\rangle) = \frac{\hat{P}_{\Psi^+} |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | \hat{P}_{\Psi^+} | \psi \rangle}} \Rightarrow w_3 = \langle \psi | \hat{P}_{\Psi^+} | \psi \rangle
 \end{aligned}$$

$$|\Psi^-\rangle \otimes |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|011\rangle - |101\rangle) = \frac{\hat{P}_{\Psi^-} |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | \hat{P}_{\Psi^-} | \psi \rangle}} \Rightarrow w_4 = \langle \psi | \hat{P}_{\Psi^-} | \psi \rangle.$$

7.1.3 Загальна схема проективного вимірювання для n -кубітових систем

В n -кубітових системах можна здійснювати процедуру вимірювання одного (будь-якого з n кубітів), двох (будь-якої пари кубітів), ..., або одночасно всіх n кубітів, причому вимірювання можна проводити в довільному ортонормованому базисі. Як і в прикладах, наведених вище, проективне вимірювання може бути *повним* або *неповним*.

Припустимо, що n -кубітові вектори станів представлені в обчислювальному базисі. Базисні вектори n -кубітового простору позначимо через

$$|\vec{z}\rangle = |z_1 z_2 \dots z_n\rangle, \quad (7.51)$$

де кожне з z_i ($i = \overline{1, n}$) може приймати значення “0” або “1”. Очевидно, що загальне число таких базисних елементів у n -кубітовому просторі дорівнює $N = 2^n$.

Будь-який нормований на одиницю n -кубітовий вектор стану $|\psi\rangle$ можна представити у вигляді

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_{\vec{z}} \alpha_{\vec{z}} |\vec{z}\rangle = \sum_{z_1, z_2, \dots, z_n \in \{0;1\}} \alpha_{z_1 z_2 \dots z_n} |z_1 z_2 \dots z_n\rangle, \\ \sum_{\vec{z}} |\alpha_{\vec{z}}|^2 &= 1, \end{aligned} \quad (7.52)$$

де $\alpha_{\vec{z}}$ в загальному випадку — комплексні числа, частина з яких може дорівнювати нулю.

Припустимо, що в деякій обчислювальній процедурі необхідно провести операцію вимірювання над $m < n$ конкретними кубітами в обчислювальному базисі. Кожний з базисних станів $|\vec{z}\rangle$ представимо у вигляді тензорного добутку двох векторів

$$|\vec{z}\rangle = |\vec{x}\rangle \otimes |\vec{y}\rangle, \quad (7.53)$$

де в $|\vec{x}\rangle = |x_1 x_2 \dots x_m\rangle$ входять, наприклад у порядку зростання номерів, ті кубіти, над якими планується провести вимірювання, а в $|\vec{y}\rangle = |y_1 y_2 \dots y_{n-m}\rangle$ — решта кубітів. За такого розбиття базисних станів $|\vec{z}\rangle$, різних векторів $|\vec{x}\rangle$ буде $N_x = 2^m$, а число векторів $|\vec{y}\rangle$ буде $N_y = 2^{n-m}$; загальне число різних добутків $|\vec{x}\rangle \otimes |\vec{y}\rangle$, як і повинно бути, становить

$$N = N_x N_y = 2^m 2^{n-m} = 2^n. \quad (7.54)$$

Вектор стану (7.52) можна представити тепер у наступному вигляді:

$$|\psi\rangle = \sum_{\vec{x}} \sum_{\vec{y}} \alpha_{\vec{x}, \vec{y}} |\vec{x}\rangle \otimes |\vec{y}\rangle = \sum_{\vec{x}} |\vec{x}\rangle \otimes \left(\sum_{\vec{y}} \alpha_{\vec{x}, \vec{y}} |\vec{y}\rangle \right). \quad (7.55)$$

Введемо позначення

$$|\chi'_{\vec{x}}\rangle = \sum_{\vec{y}} \alpha_{\vec{x}, \vec{y}} |\vec{y}\rangle. \quad (7.56)$$

Оскільки $\sum_{\vec{z}} |\alpha_{\vec{z}}|^2 = \sum_{\vec{x}} \left(\sum_{\vec{y}} |\alpha_{\vec{x}, \vec{y}}|^2 \right) = 1$, то в загальному випадку $\sum_{\vec{y}} |\alpha_{\vec{x}, \vec{y}}|^2 \equiv \beta_{\vec{x}}^2 < 1$. Отже, стан (7.56) виявляється ненормованим. Вводячи замість $|\chi'(\vec{x})\rangle$ нормований на одиницю вектор

$$|\chi_{\vec{x}}\rangle = \frac{1}{\beta_{\vec{x}}} \sum_{\vec{y}} \alpha_{\vec{x}, \vec{y}} |\vec{y}\rangle, \quad (7.57)$$

n -кубітовий стан (7.52) представимо у вигляді, зручному для застосування постулату фон Неймана про вимірювання:

$$|\psi\rangle = \sum_{\vec{x}} \beta_{\vec{x}} |\vec{x}\rangle \otimes |\chi_{\vec{x}}\rangle. \quad (7.58)$$

Операції вимірювання в обчислювальному базисі над обраними m кубітами відповідає повна система 2^m проекторів

$$\left\{ \hat{P}_{\vec{x}} = |\vec{x}\rangle \langle \vec{x}| \right\}, \quad \sum_{\vec{x}} \hat{P}_{\vec{x}} = \hat{I}. \quad (7.59)$$

Кожному значенню \vec{x} відповідає один із можливих результатів вимірювання, імовірність реалізації якого рівна

$$w_{\vec{x}} = |\beta_{\vec{x}}|^2, \quad \sum_{\vec{x}} w_{\vec{x}} = \sum_{\vec{x}} |\beta_{\vec{x}}|^2 = 1. \quad (7.60)$$

Кінцевий нормований стан системи n кубітів для кожного результату \vec{x} операції вимірювання має вигляд

$$|\psi_{\vec{x}}\rangle = |\vec{x}\rangle \otimes |\chi_{\vec{x}}\rangle. \quad (7.61)$$

Нагадаємо, що при повному проективному вимірюванні m кубітів максимальна кількість можливих результатів вимірювання дорівнює $N_x = 2^m$.

Кожний з можливих кінцевих n -кубітових нормованих станів можна визначити за формулою

$$|\psi_{\vec{x}}\rangle = \frac{\hat{P}_{\vec{x}} |\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\hat{P}_{\vec{x}}|\psi\rangle}}, \quad (7.62)$$

а імовірність отримання такого стану в результаті вимірювання рівна

$$w_{\vec{x}} = \langle\psi|\hat{P}_{\vec{x}}|\psi\rangle. \quad (7.63)$$

Знаходження значень (7.62) та (7.63) для системи з багатьма кубітами є громіздкою рутинною процедурою. Однак, можна створити програму, універсальну щодо вибору чисел n та m , за допомогою якої можна отримувати результати вимірювання безпосередньо за допомогою звичайного комп'ютера.

Якщо в n -кубітовому стані потрібно провести вимірювання m кубітів не в обчислювальному базисі, а в деякому іншому ортонормованому базисі

$$|\vec{v}\rangle = |v_1 v_2 \dots v_m\rangle, \quad (7.64)$$

то слід попередньо перейти від базису $|\vec{x}\rangle$ до базису $|v\rangle$, n -кубітову хвильову функцію представити у вигляді

$$|\psi\rangle = \sum_{\vec{v}} \beta_{\vec{v}} |\vec{v}\rangle \otimes |\chi_{\vec{v}}\rangle, \quad (7.65)$$

і дали діяти за вищенаведеним алгоритмом.

7.1.4 Операції проективного вимірювання над змішаними станами

Розглянуті вище операції стосуються вимірювань, що проводяться над чистими квантовими станами. Нагадаємо, що квантові стани називаються *чистими*, якщо їх можна описати за допомогою векторів стану у гільбертовому просторі (або, що те ж саме, за допомогою хвильових функцій). *Змішані* стани визначаються сукупністю векторів станів $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_n\rangle$, які входять в суміш, разом з відповідними вагами-коєфіцієнтами q_1, q_2, \dots, q_n . Оскільки коєфіцієнти $q_i, i = \overline{1, n}$, мають сенс імовірностей знаходження системи у кожному зі станів $|\psi_i\rangle$, то вони задовольняють співвідношення

$$q_i \geq 1, \quad i = \overline{1, n}, \quad \sum_{i=1}^n q_i = 1. \quad (7.66)$$

На відміну від суперпозиційного стану

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n \alpha_i |\psi_i\rangle, \quad q_i = |\alpha_i|^2,$$

у змішаному стані відсутні фазові співвідношення між окремими станами $|\psi_i\rangle$.

Середнє значення оператора \hat{A} у змішаному стані обчислюється за формулою

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{i=1}^n q_i \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle. \quad (7.67)$$

Формула (7.67) містить в собі 2 способи усереднення:

- квантове усереднення у кожному чистому стані $\langle \hat{A} \rangle_i = \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle$
- класичне усереднення згідно правил класичної статистики $\langle \hat{A} \rangle = \sum_{i=1}^n q_i \langle \hat{A} \rangle_i$.

За заданою сукупністю векторів станів та відповідних вагових коефіцієнтів змішаний стан можна описати оператором густини

$$\hat{\rho} = \sum_{i=1}^n q_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|, \quad (7.68)$$

де $|\psi_i\rangle \langle \psi_i| = \hat{P}_i$ — оператор проектування на стан $|\psi_i\rangle$.

Для кожного ортонормованого базису $|\mu_k\rangle$ у гільбертовому просторі, в якому визначені стани $|\psi_i\rangle$, можна побудувати матрицю густини з елементами

$$\rho_{kk'} = \langle \mu_k | \hat{\rho} | \mu_{k'} \rangle. \quad (7.69)$$

Представлення змішаного стану матрицею густини є найбільш економною та оптимальною формою опису змішаного стану, оскільки в ній містяться лише параметри, які характеризують саме стан квантової системи.

Середнє значення оператора \hat{A} у змішаному стані, що описується оператором (матрицею) густини $\hat{\rho}$, визначається за формулою

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr} \hat{\rho} \hat{A}. \quad (7.70)$$

Звичайно, усереднення оператора \hat{A} за формулами (7.67) та (7.70) дає однакові результати.

Логічно вважати, що середнє значення одиничного оператора \hat{I} в змішаному стані повинно дорівнювати одиниці. З цього випливає, що оператор густини має бути нормованим наступним чином:

$$\text{Tr} \hat{\rho} = \text{Tr} \hat{\rho} \hat{I} = 1. \quad (7.71)$$

Змісту та властивостям оператора густини в даному посібнику присвячено окремий розділ. Тут ми використаємо це поняття виключно для опису операції вимірювання над змішаними станами.

Зазначимо, що чисті стани можна описувати як за допомогою векторів стану, так і використовуючи оператори (матриці) густини. Дійсно, чисті стани можна вважати частковим випадком змішаних станів, коли всі коефіцієнти q_i у формулі (7.68), за винятком одного (який дорівнює одиниці), дорівнюють нулю. Звідси висновок: якщо маємо деяке співвідношення для чистого стану через вектор стану, достатньо переписати його через оператор густини, і тоді отриманий вираз можна вважати його узагальненням на випадок змішаних станів.

Так, чистому стану $|\psi\rangle$ відповідає оператор густини $\hat{\rho} = |\psi\rangle \langle\psi|$. Результат дії деякого оператора \hat{A} на стан $|\psi\rangle$ можна представити або як $|\psi'\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$, або через оператор густини

$$\hat{\rho}' = |\psi'\rangle \langle\psi'| = \hat{A}|\psi\rangle \langle\psi| \hat{A}^\dagger = \hat{A} \hat{\rho} \hat{A}^\dagger. \quad (7.72)$$

Отже, перетворення змішаних станів під дією оператора \hat{A} визначається формулою

$$\hat{\rho}' = \hat{A} \hat{\rho} \hat{A}^\dagger. \quad (7.73)$$

Як вже було зазначено вище, середнє значення оператора \hat{A} у змішаному стані визначається за формулою (7.70).

Нехай деякому ортогональному проєктивному вимірюванню відповідає система проєкторів $\{\hat{P}_i\}$, $i = 1, n$. Якщо на вхід схеми вимірювання подається чистий стан $|\psi\rangle$, то, як ми вже знаємо, імовірність отримання k -го результату на виході рівна $w_k = \langle\psi | \hat{P}_k | \psi\rangle$, а стан системи після вимірювання визначається за формулою

$$|\varphi_k\rangle = \frac{\hat{P}_k |\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi | \hat{P}_k | \psi\rangle}}.$$

Отже, якщо на вхід вимірювальної системи подається змішаний стан, що описується оператором густини $\hat{\rho}$, то імовірність того, що на виході отримаємо k -ий результат, дорівнює

$$w_k = \text{Tr} \hat{P}_k \hat{\rho}, \quad (7.74)$$

а кінцевий стан системи визначається за формулою

$$\hat{\rho}_k = \frac{\hat{P}_k \hat{\rho} \hat{P}_k}{\text{Tr} \hat{P}_k \hat{\rho}}. \quad (7.75)$$

Розглянемо декілька прикладів операції вимірювання над змішаними квантовими станами.

Приклад 1.

Кубіт приготований як суміш двох чистих станів з відповідними ваговими коефіцієнтами q_1, q_2 :

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= |0\rangle, & q_1 &= \frac{1}{3}, \\ |\psi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), & q_2 &= \frac{2}{3}. \end{aligned} \quad (7.76)$$

Завдання: знайти можливі альтернативні результати вимірювання для даного змішаного стану в обчислювальному базисі та розрахувати імовірність реалізації кожного результату.

Оператор густини для даного стану (7.76) має вигляд

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= q_1 |\psi_1\rangle \langle \psi_1| + q_2 |\psi_2\rangle \langle \psi_2| \\ &= \frac{1}{3} |0\rangle \langle 0| + \frac{2}{3} \cdot \frac{1}{2} (|0\rangle + |1\rangle)(\langle 0| + \langle 1|) \\ &= \frac{2}{3} |0\rangle \langle 0| + \frac{1}{3} |0\rangle \langle 1| + \frac{1}{3} |1\rangle \langle 0| + \frac{1}{3} |1\rangle \langle 1|. \end{aligned} \quad (7.77)$$

Перевіряємо нормування оператора $\hat{\rho}$:

$$\text{Tr} \hat{\rho} = \langle 0 | \hat{\rho} | 0 \rangle + \langle 1 | \hat{\rho} | 1 \rangle = \frac{2}{3} + \frac{1}{3} = 1. \quad (7.78)$$

Вимірюванню в обчислювальному базисі відповідає система з двох ортогональних проекторів

$$\hat{P}_0 = |0\rangle \langle 0| \quad \hat{P}_1 = |1\rangle \langle 1|. \quad (7.79)$$

Очевидно, що сукупність даних двох операторів утворює повну систему:

$$\hat{P}_0 + \hat{P}_1 = |0\rangle \langle 0| + |1\rangle \langle 1| = \hat{I}. \quad (7.80)$$

Кожному з двох проекторів відповідає один можливий результат вимірювання:

- проектору \hat{P}_0 з імовірністю $w_0 = \text{Tr} \hat{P}_0 \hat{\rho}$ відповідає кінцевий стан

$$\hat{\rho}_0 = \frac{\hat{P}_0 \hat{\rho} \hat{P}_0}{\text{Tr} \hat{P}_0 \hat{\rho}}$$

- проектору \hat{P}_1 з імовірністю $w_1 = \text{Tr} \hat{P}_1 \hat{\rho}$ відповідає кінцевий стан

$$\hat{\rho}_1 = \frac{\hat{P}_1 \hat{\rho} \hat{P}_1}{\text{Tr} \hat{P}_1 \hat{\rho}}.$$

Виконуємо обчислення:

$$\begin{aligned} w_0 &= \text{Tr} \hat{P}_0 \hat{\rho} \\ &= \text{Tr} \left[|0\rangle \langle 0| \left(\frac{2}{3} |0\rangle \langle 0| + \frac{1}{3} |0\rangle \langle 1| + \frac{1}{3} |1\rangle \langle 0| + \frac{1}{3} |1\rangle \langle 1| \right) \right] \\ &= \text{Tr} \left(\frac{2}{3} |0\rangle \langle 0| + \frac{1}{3} |0\rangle \langle 1| \right) = \frac{2}{3} \\ \hat{P}_0 \hat{\rho} \hat{P}_0 &= \left(\frac{2}{3} |0\rangle \langle 0| + \frac{1}{3} |0\rangle \langle 1| \right) |0\rangle \langle 0| = \frac{2}{3} |0\rangle \langle 0| \\ \hat{\rho}_0 &= \frac{\hat{P}_0 \hat{\rho} \hat{P}_0}{\text{Tr} \hat{P}_0 \hat{\rho}} = \frac{\frac{2}{3} |0\rangle \langle 0|}{\frac{2}{3}} = |0\rangle \langle 0| \\ w_1 &= \text{Tr} \hat{P}_1 \hat{\rho} \\ &= \text{Tr} \left[|1\rangle \langle 1| \left(\frac{2}{3} |0\rangle \langle 0| + \frac{1}{3} |0\rangle \langle 1| + \frac{1}{3} |1\rangle \langle 0| + \frac{1}{3} |1\rangle \langle 1| \right) \right] \\ &= \text{Tr} \left(\frac{1}{3} |1\rangle \langle 0| + \frac{1}{3} |1\rangle \langle 1| \right) = \frac{1}{3} \\ \hat{P}_1 \hat{\rho} \hat{P}_1 &= \left(\frac{1}{3} |1\rangle \langle 0| + \frac{1}{3} |1\rangle \langle 1| \right) |1\rangle \langle 1| = \frac{1}{3} |1\rangle \langle 1| \\ \hat{\rho}_1 &= \frac{\hat{P}_1 \hat{\rho} \hat{P}_1}{\text{Tr} \hat{P}_1 \hat{\rho}} = \frac{\frac{1}{3} |1\rangle \langle 1|}{\frac{1}{3}} = |1\rangle \langle 1|. \end{aligned}$$

Отже, в результаті вимірювання з імовірністю $w_0 = \frac{2}{3}$ квантова система перейде в стан $\hat{\rho}_0 = |0\rangle \langle 0|$ (чистий стан, що відповідає вектору $|\varphi_0\rangle = |0\rangle$), та з імовірністю $w_1 = \frac{1}{3}$ — у стан $\hat{\rho}_1 = |1\rangle \langle 1|$ (чистий стан, що відповідає вектору $|\varphi_1\rangle = |1\rangle$).

Приклад 2.

Двокубітовий стан є сумішшю двох станів Белла з ваговими коефіцієн-

тами q_1, q_2 відповідно:

$$\begin{aligned} |\Psi^-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle - |10\rangle), & q_1 &= \frac{1}{4} \\ |\Phi^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |11\rangle), & q_2 &= \frac{3}{4}. \end{aligned} \quad (7.81)$$

Завдання: знайти альтернативні результати вимірювання в обчислювальній базисі першого кубіта та відповідні імовірності реалізації кожного з можливих результатів.

Оператор густини для даного двокубітового стану після простих тожних перетворень можна привести до наступного вигляду:

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= q_1 |\Psi^-\rangle \langle \Psi^-| + q_2 |\Phi^+\rangle \langle \Phi^+| \\ &= |0\rangle \langle 0| \otimes \left(\frac{1}{8} |1\rangle \langle 1| + \frac{3}{8} |0\rangle \langle 0| \right) + |0\rangle \langle 1| \otimes \left(\frac{3}{8} |0\rangle \langle 1| - \frac{1}{8} |1\rangle \langle 0| \right) \\ &\quad + |1\rangle \langle 0| \otimes \left(\frac{3}{8} |1\rangle \langle 0| - \frac{1}{8} |0\rangle \langle 1| \right) + |1\rangle \langle 1| \otimes \left(\frac{3}{8} |1\rangle \langle 1| + \frac{1}{8} |0\rangle \langle 0| \right), \end{aligned}$$

де вирази поза дужками відносяться до першого кубіту, а в дужках — до другого кубіту.

Як і в попередньому прикладі, зазначеному вимірюванню відповідає система двох ортогональних проекторів (7.79), що визначені у просторі станів першого кубіту:

$$\hat{P}_{0|1} = \hat{P}_0 \otimes \hat{I} = |0\rangle \langle 0| \otimes \hat{I} \quad \hat{P}_{1|1} = \hat{P}_1 \otimes \hat{I} = |1\rangle \langle 1| \otimes \hat{I}. \quad (7.82)$$

Примітка: оскільки в даному випадку простір станів двокубітовий, то оператори проектування для першого кубіту визначаються як тензорний добуток відповідного проектора на одиничний оператор \hat{I} ; останній означає, що, проводячи проективні вимірювання над першим кубітом, ми не діємо на стан другого кубіта.

Проводимо розрахунки:

$$\begin{aligned} w_0 &= \text{Tr} \hat{P}_{0|1} \hat{\rho} = \text{Tr} \left(\frac{1}{8} |01\rangle \langle 01| + \frac{3}{8} |00\rangle \langle 00| \right. \\ &\quad \left. + \frac{3}{8} |00\rangle \langle 11| - \frac{1}{8} |01\rangle \langle 10| \right) \\ &= \langle 00 | \hat{P}_{0|1} \hat{\rho} | 00 \rangle + \langle 01 | \hat{P}_{0|1} \hat{\rho} | 01 \rangle \\ &\quad + \langle 10 | \hat{P}_{0|1} \hat{\rho} | 10 \rangle + \langle 11 | \hat{P}_{0|1} \hat{\rho} | 11 \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{3}{8} + \frac{1}{8} + 0 + 0 = \frac{1}{2} \\
\hat{P}_{0|1} \hat{\rho} \hat{P}_{0|1} &= \left(\frac{1}{8} |01\rangle \langle 01| + \frac{3}{8} |00\rangle \langle 00| \right. \\
&\quad \left. + \frac{3}{8} |00\rangle \langle 11| - \frac{1}{8} |01\rangle \langle 10| \right) |0\rangle \langle 0| \otimes \hat{I} \\
&= \frac{3}{8} |00\rangle \langle 00| + \frac{1}{8} |01\rangle \langle 01| \\
\hat{\rho}_{0|1} &= \frac{\hat{P}_{0|1} \hat{\rho} \hat{P}_{0|1}}{\text{Tr} \hat{P}_{0|1} \hat{\rho}} = \frac{3}{4} |00\rangle \langle 00| + \frac{1}{4} |01\rangle \langle 01| \\
w_1 &= \text{Tr} \hat{P}_{1|1} \hat{\rho} = \text{Tr} \left(\frac{3}{8} |11\rangle \langle 00| - \frac{1}{8} |10\rangle \langle 01| \right. \\
&\quad \left. + \frac{3}{8} |11\rangle \langle 11| + \frac{1}{8} |10\rangle \langle 10| \right) \\
&= \frac{3}{8} + \frac{1}{8} = \frac{1}{2} \\
\hat{P}_{1|1} \hat{\rho} \hat{P}_{1|1} &= \left(\frac{3}{8} |11\rangle \langle 00| - \frac{1}{8} |10\rangle \langle 01| \right. \\
&\quad \left. + \frac{3}{8} |11\rangle \langle 11| + \frac{1}{8} |10\rangle \langle 10| \right) |1\rangle \langle 1| \otimes \hat{I} \\
&= \frac{1}{8} |10\rangle \langle 10| + \frac{3}{8} |11\rangle \langle 11| \\
\hat{\rho}_{1|1} &= \frac{\hat{P}_{1|1} \hat{\rho} \hat{P}_{1|1}}{\text{Tr} \hat{P}_{1|1} \hat{\rho}} = \frac{1}{4} |10\rangle \langle 10| + \frac{3}{4} |11\rangle \langle 11|.
\end{aligned}$$

Отже, в результаті вимірювання можливі дві альтернативи:

- з імовірністю $w_0 = \frac{1}{2}$ двокубітова система переходить у стан $\hat{\rho}_{0|1} = \frac{3}{4} |00\rangle \langle 00| + \frac{1}{4} |01\rangle \langle 01|$, який являє собою суміш чистих станів $|00\rangle$ та $|01\rangle$ з відповідними ваговими коефіцієнтами $q_1 = \frac{3}{4}$ та $q_2 = \frac{1}{4}$
- з імовірністю $w_1 = \frac{1}{2}$ двокубітова система переходить у стан $\hat{\rho}_{1|1} = \frac{1}{4} |10\rangle \langle 10| + \frac{3}{4} |11\rangle \langle 11|$, який являє собою суміш чистих станів $|10\rangle$ та $|11\rangle$ з відповідними ваговими коефіцієнтами $q_1 = \frac{1}{4}$ та $q_2 = \frac{3}{4}$.

Зауважимо, що змішані стани можна утворювати не лише з комбінацій чистих станів, але також і з інших змішаних станів. Якщо маємо

декілька змішаних станів $\hat{\rho}_i, i = \overline{1, n}$, визначених в одному й тому ж самому гільбертовому просторі, то з них можна утворити новий змішаний стан

$$\hat{\rho} = \sum_{i=1}^n r_i \hat{\rho}_i, \quad (7.83)$$

де r_i — вагові коефіцієнти, що задовольняють умовам

$$r_i \geq 0, \quad i = \overline{1, n}, \quad \sum_{i=1}^n r_i = 1. \quad (7.84)$$

7.2 POVM-вимірювання

Проективні вимірювання не вичерпують всі можливі способи вимірювання квантових систем. Існують такі вимірювання, які являють собою більш загальний клас порівняно з проективними вимірюваннями та які мають назву *Positive Operator-Valued Measure*, що позначаються загальноприйнятою аббревіатурою POVM. (Українською мовою такий спосіб вимірювання можна було б назвати “Позитивні операторнозначні міри” — ПОЗМ. Однак надалі ми будемо користуватися вже загальноприйнятим міжнародним позначенням POVM).

Як і в проективному вимірюванні, сукупності всіх можливих результатів вимірювання у POVM відповідає система деяких операторів $\{\hat{E}_m\}$, що мають назву *елементи POVM*. Кожному можливому кінцевому результату вимірювання відповідає окремий елемент \hat{E}_m . Оператори \hat{E}_m задовольняють наступним властивостям:

1. всі елементи \hat{E}_m є *додатно визначеними* операторами у гільбертовому просторі H певної розмірності
2. елементи \hat{E}_m задовольняють умову

$$\sum_{m=1}^n \hat{E}_m = \hat{I}, \quad (7.85)$$

де n — загальне число елементів для даного *повного* POVM-вимірювання

3. імовірність w_m для m -го результату POVM-вимірювання над квантовою системою, стан якої визначається вектором $|\psi\rangle$ або матрицею густини $\hat{\rho}$, визначається формулами

$$\begin{aligned} w_m &= \langle \psi | \hat{E}_m | \psi \rangle \\ w_m &= \text{Tr} \hat{\rho} \hat{E}_m. \end{aligned} \quad (7.86)$$

Слід зазначити, що елементи \hat{E}_m не обов'язково ортогональні один до одного і, як наслідок, число елементів може бути більшим за розмірність гільбертового простору H , в якому вони визначені. Нагадаємо, що для проєктивного вимірювання число ортогональних проєкторів ніколи не перевищує розмірність простору.

Рівність (7.85) відповідає очевидному факту, що сума імовірностей всіх можливих альтернативних результатів вимірювання повинна дорівнювати одиниці. Як відомо, всі власні значення додатно визначених операторів невід'ємні. Будь-який додатно визначений оператор, а отже й елемент \hat{E}_m , можна представити у вигляді

$$\hat{E}_m = \hat{M}_m^\dagger \hat{M}_m. \quad (7.87)$$

У випадку POVM оператори \hat{M}_m мають назву оператори вимірювання (отже, \hat{E}_m — елементи POVM, \hat{M}_m — оператори вимірювання POVM). Оператори \hat{M}_m не обов'язково є ермітовими.

Проєктивні вимірювання можна розглядати як частковий випадок POVM-вимірювань, де в якості операторів вимірювання \hat{M}_m виступають проєктори \hat{P}_m , які, як вже нам відомо, є ермітовими ($\hat{P}_m^\dagger = \hat{P}_m$) та задовольняють умові $\hat{P}_m^2 = \hat{P}_m$. Тоді

$$\hat{E}_m = \hat{P}_m^\dagger \hat{P}_m = \hat{P}_m \hat{P}_m = \hat{P}_m^2 = \hat{P}_m, \quad (7.88)$$

тобто елементи \hat{E}_m співпадають з проєкторами \hat{P}_m , і, отже, значення імовірностей окремих альтернативних результатів вимірювання

$$\begin{aligned} w_m &= \langle \psi | \hat{E}_m | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{P}_m | \psi \rangle \\ w_m &= \text{Tr} \hat{\rho} \hat{E}_m = \text{Tr} \hat{\rho} \hat{P}_m \end{aligned} \quad (7.89)$$

співпадають з тими, що описані в розділі про PVM-вимірювання.

Але слід зауважити, що система елементів $\{\hat{E}_m\}$ не завжди відповідає проєктивному вимірюванню.

POVM дозволяє описати вимірювання більш загального класу, в тому числі такі, коли в *реальному* експерименті не можливо провести проєктивне вимірювання. У PVM-вимірюваннях над станом $|\psi\rangle = \sum_m \alpha_m |\varphi_m\rangle$ вважається, що в результаті вимірювання отримується класична інформація (наприклад, число “ m ”), яка вказує на те, який саме альтернативний кінцевий результат ми отримали, а квантова система при цьому колапсує в стан $|\varphi_m\rangle$; над отриманим станом можна проводити подальші операції. Якщо ж над даним станом $|\varphi_m\rangle$ повторити ті ж самі вимірювання, то кожного разу будемо отримувати те ж саме число “ m ” і той самий

стан $|\varphi_m\rangle$. Але в деяких *реальних* вимірюваннях квантова система повністю знищується. Наприклад, в операціях вимірювання над фотонами самі частинки можуть поглинатися детектором і, отже, жодних подальших дій над квантовою системою провести неможливо.

У POVM-вимірюваннях, як правило, не цікавляться кінцевим станом квантової системи; інтерес полягає лише у знаходженні розподілу імовірностей всіх можливих результатів вимірювання. У прикладі з фотонами задача може ставитися, приміром, про розподіл імовірностей стану поляризації.

Розглянемо приклад, в якому чітко виявляється різниця між проєктивним і POVM-вимірюванням. Цей приклад іноді називають *задачею розпізнавання квантових станів*.

Уявимо собі, що Аліса надсилає Бобу по квантовому каналу раз за разом по одному кубіту, кожний з яких знаходиться в одному з двох, $|\varphi_1\rangle$ або $|\varphi_2\rangle$, можливих станів. Можна вважати, що середнє *число кубітів у двох станах однакове*. Кожного разу Аліса обирає стан $|\varphi_1\rangle$ або $|\varphi_2\rangle$ випадковим чином. Бобу відомо, що кожний кубіт знаходиться в одному з двох названих станів. Задача Боба полягає в тому, щоб побудувати схему вимірювання, яка б розпізнавала стан кожного кубіта, який він отримує від Аліси.

Якщо стани $|\varphi_1\rangle$ та $|\varphi_2\rangle$ ортогональні ($\langle\varphi_1|\varphi_2\rangle = 0$), то жодних проблем для їх розпізнавання немає. Наприклад, якщо $|\varphi_1\rangle = |+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$, $|\varphi_2\rangle = |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$, то Боб може провести проєктивне вимірювання, що відповідає системі ортогональних проєкторів

$$\{\hat{P}_+, \hat{P}_-\}, \quad \hat{P}_+ = |+\rangle\langle+|, \quad \hat{P}_- = |-\rangle\langle-|,$$

так що $\hat{P}_+\hat{P}_- = 0$, $\hat{P}_+ + \hat{P}_- = \hat{I}$. В результаті такого вимірювання Боб отримає класичну інформацію, наприклад, у вигляді символів “+” або “−”, які однозначно вказують на стан кубіта. До речі, згідно теорії проєктивного вимірювання, в даному випадку стан кубіта в результаті операції вимірювання не змінюється, і Боб може виконувати подальші дії з ним за власним розсудом.

Припустимо тепер, що стани $|\varphi_1\rangle$ і $|\varphi_2\rangle$ не ортогональні ($\langle\varphi_1|\varphi_2\rangle \neq 0$). Відомо, що в такому випадку не існує алгоритму вимірювання, який дозволяє достовірно розпізнати стан *кожного* отриманого Бобом кубіта. (До речі, саме на цій неможливості розпізнавання базуються деякі квантові протоколи створення та розподілу криптографічних ключів.) Виявляється [1], що імовірність вірного розпізнавання станів не перевищує значення

$$w = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - \delta^2} \right), \quad (7.90)$$

де $\delta = |\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle|$. З (7.90) випливає, що у випадку, коли $|\varphi_1\rangle$ та $|\varphi_2\rangle$ ортогональні ($\delta = 0$), то $w = 1$ — тобто отримуємо вже відомий нам результат. Якщо $\delta = 1$, то $w = \frac{1}{2}$. Зрозуміло, що в даному випадку розрізнити стани абсолютно неможливо, і ймовірність $w = \frac{1}{2}$ досягається, якщо навмання називати стан або $|\varphi_1\rangle$, або $|\varphi_2\rangle$. Зауважимо також, що значення імовірності (7.90) досягається для оптимальної схеми вимірювань.

Задачу розпізнавання станів можна сформулювати по-різному. В одному способі можна вимагати розпізнавання стану *кожного* надісланого Алісою кубіта з певною імовірністю w . Але завдання можна поставити інакше: чи не можна хоча б для *частини* всього ансамблю кубітів розпізнати стан *достовірно*?

Розглянемо розв'язання такого завдання і за допомогою проєктивного вимірювання, і за допомогою POVM.

В якості неортогональних станів для розпізнавання оберемо

$$\begin{aligned} |\varphi_1\rangle &= |0\rangle \\ |\varphi_2\rangle &= |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle). \end{aligned} \quad (7.91)$$

Для проєктивного вимірювання можна обрати *повну систему* ортогональних проєкторів

$$\{\hat{P}_0, \hat{P}_1\}, \quad \hat{P}_0 = |0\rangle\langle 0|, \quad \hat{P}_1 = |1\rangle\langle 1|, \quad \hat{P}_0\hat{P}_1 = 0, \quad \hat{P}_0 + \hat{P}_1 = \hat{I}. \quad (7.92)$$

Тоді:

- якщо в результаті процедури вимірювання над черговим кубітом ми отримаємо класичний символ “1”, то можна з імовірністю $w = 1$ стверджувати, що даний кубіт знаходиться у стані $|\varphi_2\rangle$, оскільки в результаті вимірювання над станом $|\varphi_1\rangle$ ніколи не можна отримати значення “1”
- якщо результатом вимірювання є символ “0”, то не можливо впевнено стверджувати про стан кубіта, оскільки обидва стани під час вимірювання можуть дати значення “0”; стан кубіта можна встановити з певною імовірністю, але при такому підході ми будемо час від часу помилятися.

Отже, за такого способу вимірювання ми ніколи не зможемо достовірно розпізнати стан $|\varphi_1\rangle = |0\rangle$.

В якості ортогональної пари проєкторів можна також обрати $\hat{P}_+ = |+\rangle\langle +|$, $\hat{P}_- = |-\rangle\langle -|$. Тоді під час отримання результату вимірювання

класичного символу “+” можна з імовірністю $w = 1$ стверджувати, що кубіт знаходиться у стані $|\varphi_1\rangle = |0\rangle$; якщо ж буде отримано символ “—” — то про стан кубіту не можна буде стверджувати нічого певного.

Підсумовуючи, можна сказати, що під час проективного вимірювання в даному прикладі можна достовірно розпізнати лише один із двох станів для частки всього ансамблю кубітів.

Розглянемо тепер задачу розпізнавання тих самих станів $|\varphi_1\rangle = |0\rangle$, $|\varphi_2\rangle = |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$ за допомогою POVM-вимірювання.

В якості елементів POVM-вимірювання оберемо 3 додатно визначених оператори

$$\begin{aligned}\hat{E}_1 &= \frac{\sqrt{2}}{1 + \sqrt{2}} |1\rangle \langle 1| \\ \hat{E}_2 &= \frac{\sqrt{2}}{1 + \sqrt{2}} |+\rangle \langle +| = \frac{\sqrt{2}}{1 + \sqrt{2}} \frac{(|0\rangle + |1\rangle)(\langle 0| + \langle 1|)}{2} \\ \hat{E}_3 &= \hat{I} - \hat{E}_1 - \hat{E}_2.\end{aligned}\tag{7.93}$$

Власні значення операторів $\{\hat{E}_m\}$:

$$\begin{aligned}\hat{E}_1: \quad \lambda_1 &= 0, \quad \lambda_2 = \frac{\sqrt{2}}{1 + \sqrt{2}} \\ \hat{E}_2: \quad \lambda_1 &= 0, \quad \lambda_2 = \frac{\sqrt{2}}{1 + \sqrt{2}} \\ \hat{E}_3: \quad \lambda_1 &= 0, \quad \lambda_2 = \frac{2}{1 + \sqrt{2}}.\end{aligned}\tag{7.94}$$

Отже, всі три оператори \hat{E}_m — додатно визначені. Очевидним є також і те, що сукупність цих операторів задовольняє рівність (7.85) для елементів POVM:

$$\hat{E}_1 + \hat{E}_2 + \hat{E}_3 = \hat{I}.$$

Згідно теорії POVM, кожному елементу \hat{E}_m відповідає один з можливих альтернативних результатів вимірювання. При кожному вимірюванні отримується один із трьох сигналів (наприклад, класичні числа “1”, “2” або “3”), які свідчать про те, що в даному конкретному вимірюванні реалізувався результат, що відповідає або елементу \hat{E}_1 , або \hat{E}_2 , або \hat{E}_3 . Однозначно передбачити заздалегідь, який саме сигнал із трьох можливих ми отримаємо під час вимірювання окремої копії кубіта, абсолютно неможливо. З виду елементів \hat{E}_m можна лише розрахувати імовірності

появи кожного сигналу за формулою (7.86). Зокрема, якщо кубіт знаходиться у стані $|\varphi_1\rangle = |0\rangle$, то сигнали “1”, “2” та “3” отримаємо з імовірностями

$$\begin{aligned} w_1^1 &= \langle \varphi_1 | \hat{E}_1 | \varphi_1 \rangle = 0 \\ w_2^1 &= \langle \varphi_1 | \hat{E}_2 | \varphi_1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}(1 + \sqrt{2})} \\ w_3^1 &= \langle \varphi_1 | \hat{E}_3 | \varphi_1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (7.95)$$

Якщо ж кубіт знаходиться у стані $|\varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$, то з імовірностями

$$\begin{aligned} w_1^2 &= \langle \varphi_2 | \hat{E}_1 | \varphi_2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}(1 + \sqrt{2})} \\ w_2^2 &= \langle \varphi_2 | \hat{E}_2 | \varphi_2 \rangle = 0 \\ w_3^2 &= \langle \varphi_2 | \hat{E}_3 | \varphi_2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \end{aligned} \quad (7.96)$$

отримаємо сигнали “1”, “2” та “3” відповідно.

Тепер розглянемо POVM-вимірювання для розпізнавання станів кубітів.

Якщо під час вимірювання отримується сигнал “1”, то це однозначно свідчить, що отриманий від Аліси кубіт знаходився до вимірювання у стані $|\varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$, оскільки стан $|\varphi_1\rangle = |0\rangle$ ніколи не породжує сигнал “1” ($w_1^1 = 0$). Сигнал “2” свідчить про те, що кубіт перебуває у стані $|\varphi_1\rangle = |0\rangle$, оскільки $|\varphi_2\rangle$ ніколи не дає “2”. Якщо ж отримано сигнал “3”, то немає жодних підстав для визначення стану кубіта, оскільки “3” однаково часто з’являється незалежно від того, знаходиться кубіт у стані $|\varphi_1\rangle$ або ж у стані $|\varphi_2\rangle$.

Отже, остаточні висновки з експерименту POVM для розглянутого випадку:

- сигнал “1” — стан кубіта $|\varphi_2\rangle$
- сигнал “2” — стан кубіта $|\varphi_1\rangle$
- сигнал “3” — не можна нічого сказати про стан кубіта.

Зауважимо, що з такими відповідями ми жодного разу не робимо помилок.

Розглянутий приклад (запозичений в [2]) дає загальне уявлення про POVM-вимірювання. Звичайно, задачу розпізнавання станів можна узагальнити на випадок трьох, чотирьох і більшого числа неортогональних станів кубітів або квантових систем у гільбертовому просторі більшої розмірності. Пошук оптимальних алгоритмів POVM-вимірювання для складних систем безумовно містить у собі творчий елемент.

7.3 Питання та задачі для самостійної роботи

1. Для 4-кубітового квантового стану

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}|0000\rangle - \frac{1}{\sqrt{6}}|0011\rangle + \frac{1}{2\sqrt{3}}|0101\rangle - \frac{1}{2\sqrt{3}}|0110\rangle - \frac{1}{2\sqrt{3}}|1001\rangle + \frac{1}{2\sqrt{3}}|1010\rangle - \frac{1}{\sqrt{6}}|1100\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|1111\rangle \quad (7.97)$$

знайти можливі результати вимірювання стану першої пари кубітів:

- в обчислювальному базисі
- у базисі Белла
- у базисі Адамара $\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$
- у системі проекторів (7.25) на триплетний і синглетний стани (неповне вимірювання).

2. Задано два 4-кубітових стани

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \alpha|0000\rangle + \beta|1111\rangle, & \langle\psi_1|\psi_1\rangle &= 1, \\ |\psi_2\rangle &= \alpha|0001\rangle + \beta|0010\rangle + \gamma|0100\rangle + \delta|1000\rangle, & \langle\psi_2|\psi_2\rangle &= 1. \end{aligned}$$

Над першим кубітом у кожному з двох станів виконується операція вимірювання в обчислювальному базисі. Чи є серед можливих станів після вимірювання заплутані стани? Якщо є, то запишіть їх у нормованому вигляді.

3. Для наступних станів розглянути всі альтернативні результати вимірювання у визначеному базисі та знайти відповідні імовірності реалізації кожного результату:

- (a) стан (7.76), вимірювання у базисі Адамара

- (б) стан (7.81), вимірювання в обчислювальному базисі двох кубітів
- (в) стан (7.81), вимірювання першого кубіту в базисі Адамара
- (г) стан (7.81), вимірювання системи двох кубітів у базисі Адамара.

У кожному випадку навести систему проекторів, що відповідає кожному з вимірювань, та з'ясувати:

- чи є відповідна система проекторів повною
 - чи є відповідне вимірювання повним.
4. Які результати отримуються, якщо для стану (7.81) провести вимірювання у базисі Белла?
 5. Яка частка від загального числа кубітів буде розпізнана для станів (7.91)?
 6. Яка частка станів (7.91) буде розпізнана за допомогою проекційного вимірювання?
 7. Обчисліть самостійно значення імовірностей $w_i^j, i = \overline{1,3}, j = \overline{1,2}$, наведених у (7.95), (7.96).

Література

- [1] David McMahon — “Quantum Computing Explained” — Wiley-
interscience — 2007
- [2] Dan C. Marinescu, Gabriela M. Marinescu — “Classical and Quantum
Information”

Список рекомендованої літератури

1. В. М. Галицкий, Б. М. Карнаков, В. И. Коган. — Задачи по квантовой механике. — М., “Наука”. — 1981
2. І. С. Доценко, В. М. Мальнев. — Вступ до квантової механіки частинок зі спіном. — Київський університет. — 2002
3. К. Блум. — Теория матрицы плотности и её приложения (пер. з англ.). — Москва, “Мир”. — 1983
4. Ф. Кайе, Р. Лафлам, М. Моска. — Введение в квантовые вычисления (пер. з англ.). — Москва, Ижевск. — 2000
5. М. Нильсен, И. Чанг. — Квантовые вычисления и квантовая информация (пер. з англ.). — Москва, “Мир”. — 2006
6. В.-Х. Стиб, Й. Харди. — Задачи и их решения в квантовых вычислениях и квантовой теории информации. — Москва, Ижевск. — 2007
7. D. McMahon. — Quantum Computing Explained. — Wiley-Interscience. — 2007
8. D. C. Marinescu, G. M. Marinescu. — Classical and Quantum Information. — www.sabre.org.
9. L. Gilder. — The age of entanglement (When Quantum physics was reborn). — New York, Alfred A. Knopf. — 2008
10. Einstein A., Podolsky B. and Rosen N. — Phys. Rev. — vol. 47. — May 15, 1935
11. Bell J.S. — Physics. — Long Island City, N.Y. — vol. 1. — p. 195. — 1964
12. Aspect A., Dalibard J. and Roger G. — Phys. Rev. Lett. — vol. 49. — p. 1804. — 1982
13. Hensen B., Bernien H, Dreau A.E. et al. — Nature. — vol. 526. — p. 682–686. — 2015