

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO - BICOCCA

Tecnologie quantistiche applicate

Raccolta di appunti, dispense e libri

Anno accademico 2021/2022

Marco Gobbo

<https://github.com/marcogobbo/tecnologie-quantistiche>

11 novembre 2021

Indice

1	Meccanica quantistica	5
1.1	Stati e qubit	5
1.2	Matrice densità	8
1.3	Misurazioni	11
1.3.1	Misurazioni della matrice densità	12
1.3.2	POVM: Misura a valori operatoriali positivi	16
1.3.3	Cambi di base: stati puri e miscele	16

Capitolo 1

Meccanica quantistica

LEZIONE 1 - 07/10/2021

1.1 Stati e qubit

Prima di addentrarci nello studio delle tecnologie quantistiche, risulta opportuno fare alcuni richiami di meccanica quantistica implementando alcuni concetti che ci saranno poi utili in futuro. In particolare iniziamo velocemente ricordando il primo postulato della meccanica quantistica

- **I Postulato (Stato):** Che cos'è uno stato? Utilizziamo la notazione di Dirac per rappresentare un vettore $|\psi\rangle$ di uno spazio di Hilbert \mathcal{H} (molto spesso uno spazio vettoriale finito dimensionale) e diremo che $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$. Uno stato è un **raggio** tale che $\| |\psi\rangle \| = 1$ (per la conservazione della probabilità) e $|\psi\rangle \cong e^{i\alpha} |\psi\rangle$ conⁱ $\alpha \in \mathbb{R}$. Dato che la fase globale è irrilevante, quando due stati differiscono per una fase hanno il medesimo effetto fisico.

Procediamo ora con il definire cosa sia un qubit

Definizione 1.1 (Qubit). *Un qubit è un qualsiasi sistema a due livelli. Ogni sistema quantomeccanico può essere un qubit, ad esempio si può creare utilizzando le due differenti polarizzazioni del fotone, utilizzando l'allineamento dello spin di un nucleo immerso in un campo magnetico uniforme, utilizzando la tecnica della trappola ionica, sistemi superconduttivi, ...*

Davide di Vincenzo, nel 2000, ha indicato cinque criteri necessari per la scelta di un sistema fisico adatto per la computazione quantistica

1. Un sistema fisico scalabile con qubit ben caratterizzati;
2. La capacità di inizializzare lo stato dei qubit a un semplice stato fiduciale;
3. Tempi di decoerenza lunghi e rilevanti;
4. Un insieme "universale" di porte quantistiche;
5. Una capacità di misurazione specifica per qubit.

ⁱLa notazione \cong significa "equivalente a".

La meccanica quantistica si occupa di descrivere il comportamento del nostro sistema a due livelli mediante una hamiltoniana. Per fare ciò lavoriamo in spazi di Hilbert bidimensionali $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$, quindi le hamiltoniane di questi sistemi sono degli operatori definiti su $\mathbb{C}^2 \rightarrow \mathbb{C}^2$. Gli stati in cui si trova il nostro sistema sono descritti da funzioni d'onda generiche $\psi \in \mathbb{C}^2$, in particolar modo possono essere decomposti sulla base computazionale $\{|0\rangle, |1\rangle\}$. Avremo quindi che

$$\begin{aligned}\hat{H} |0\rangle &= E_0 |0\rangle \\ \hat{H} |1\rangle &= E_1 |1\rangle ,\end{aligned}$$

dove

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

Per cui ogni stato generico $|\psi\rangle$ può essere scritto come combinazione lineare di $\{|0\rangle, |1\rangle\}$

$$|\psi\rangle = a |0\rangle + b |1\rangle ,$$

con $a, b \in \mathbb{C}$ e soddisfacenti la condizione di conservazione di probabilità

$$|a|^2 + |b|^2 = 1 .$$

Osserviamo che, per come è definito, $|\psi\rangle$ è uno **stato puro**, ci dà la massima conoscenza che possiamo ottenere da questo sistema. Infatti abbiamo una probabilità pari a $|a|^2$ di ottenere $|0\rangle$ e una probabilità pari a $|b|^2$ di ottenere $|1\rangle$. Dobbiamo misurare un numero infinito di volte per poter ottenere queste distribuzioni di probabilità, tuttavia non possiamo eseguire una misura successiva per estrarre ulteriori informazioni sul nostro stato $|\psi\rangle$ poiché quest'ultimo sarà collassato in $|0\rangle$ oppure $|1\rangle$. Per determinare univocamente α e β si necessiterebbero di un'infinità di esperimenti su un'infinità di stati tutti preparati nel medesimo stato $|\psi\rangle$. La massima conoscenza che possiamo estrarre non è molta, infatti questo è oggetto di discussione, in particolar modo se la meccanica quantistica sia una teoria completa o menoⁱⁱ.

Come abbiamo già accennato, a, b sono coefficienti complessi, attraverso la notazione esponenziale possiamo scriverli come

$$a = |a|e^{i\theta_0} \quad b = |b|e^{i\theta_1} ,$$

in questo modo

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= |a|e^{i\theta_0} |0\rangle + |b|e^{i\theta_1} |1\rangle \\ &= \underbrace{e^{i\theta_0}}_{\text{Fase globale}} (|a| |0\rangle + |b| \underbrace{e^{i(\theta_1 - \theta_0)}}_{\text{Fase relativa}} |1\rangle) .\end{aligned}$$

Quando misuriamo uno stato, la *fase globale* risulta essere irrilevante, ciò che conta è la *fase relativa* perché può dar luogo a fenomeni come l'interferenza.

Esempio 1.1 (Fase relativa). *Consideriamo gli stati $|0\rangle, |1\rangle$, che formano la base computazionale, per scrivere i seguenti stati*

$$|\psi_1\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \quad |\psi_2\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} ,$$

ⁱⁱEinstein, A., Podolsky, B., & Rosen, N. (1935). Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?. Phys. Rev., 47, 777–780.

in questo caso, il segno meno proviene dalla fase relativa. $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ descrivono lo stesso stato, tuttavia si comportano in maniera diversa durante un'operazione di misura in meccanica quantistica. Ad esempio possiamo considerare la matrice di Pauli

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ sono autostati di σ_x , con autovalori, rispettivamente, 1 e -1.

Uno dei problemi principali nell'aver a che fare con sistemi quantistici è trovare l'evoluto temporale di un certo estado, perché abbiamo delle hamiltoniane che descrivono ad esempio il rumore degli strumenti, la temperatura dell'ambiente, ... L'equazione di Schrödinger si comporta bene nel descrivere l'evoluzione di **sistemi chiusi**, ma un qubit è, in generale, un **sistema aperto** che si lega a sistemi esterni e quindi la conoscenza sul suo stato tende a diminuire, finché non perdiamo completamente l'informazione che possedeva all'inizio. Questo fatto è noto come **tempo di coerenza**. Ci sono vari modi per tenere conto di queste interazioni così da poter descrivere al meglio il nostro sistema a due livelli.

Supponiamo di avere un sistema chiuso che evolve secondo l'equazione di Schrödinger

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

dove $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle$. \hat{U} in questo caso è un operatore unitario che può essere espresso, se l'hamiltoniana è costante nel tempo, come

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}.$$

Pertanto, considerando gli autostati dell'hamiltoniana

$$\hat{H} |i\rangle = E_i |i\rangle,$$

e riscrivendo il nostro stato iniziale in termini di autostati dell'hamiltoniana

$$|\psi(0)\rangle = \sum_i a_i |i\rangle,$$

possiamo valutare il nostro stato al tempo generico t come

$$|\psi(t)\rangle = \sum_i a_i e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |i\rangle = \sum_i a_i e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t} |i\rangle \quad \text{dove} \quad a_i(t) = a_i(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t}.$$

Da questo caso generale possiamo trattare il nostro sistema a due livelli, in questo caso come l'hamiltoniana sarà

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_1 \end{pmatrix},$$

applicando l'equazione di Schrödinger sui coefficienti

$$i\hbar \frac{da_0(t)}{dt} = E_0 a_0(t),$$

$$i\hbar \frac{da_1(t)}{dt} = E_1 a_1(t),$$

troviamo che il nostro stato finale al tempo generico t sarà

$$|\psi(t)\rangle = \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}E_0t}}_{\text{Fase globale}} (a_0(0)|0\rangle + \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}(E_1-E_0)t}a_1(0)}_{\text{Fase relativa}}|1\rangle).$$

Ancora una volta, la fase globale non produce alcun effetto, ciò che notiamo è che l'evoluzione temporale cambia la fase relativa tra gli stati $|0\rangle$ e $|1\rangle$. Questo spiega il perché se abbiamo una interazione che disturba il nostro sistema possiamo avere un cambio nella fase relativa poiché abbiamo un cambio in termini energetici. Questo disturbo è generato da tutto ciò che è esterno al sistema a due livelli. Se perdiamo il controllo su questa fase, perdiamo tutta l'informazione che abbiamo su $|\psi(t)\rangle$, e se questo accade, non abbiamo più uno stato puro. Per questo motivo necessitiamo qualcosa che vada oltre al concetto di funzione d'onda generica ψ .

1.2 Matrice densità

Vogliamo realizzare uno stato puro $|\psi\rangle$ che sia una combinazione pura di stati $|0\rangle$ e $|1\rangle$:

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle,$$

nella realtà quando cerchiamo di realizzare questo stato, abbiamo un'indeterminazione classica rappresentata da una distribuzione di ottenere lo stato esatto oppure uno stato simile. Supponiamo di avere un insieme di stati che indichiamo con $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$, dove p_i è la probabilità classica di ottenere un generico stato. Questi stati $|\psi_i\rangle$ sono tutti stati puri, ma non sappiamo quale sia quello giusto e la sua conoscenza è persa. Tutte queste informazioni sono contenute nella **matrice densità** che rappresenta una distribuzione classica di probabilità.

Dal punto di vista della teoria della meccanica quantistica, esiste un'altro modo per introdurre la teoria anziché sfruttare gli stati ψ . Quello che si fa è sfruttare la matrice densità che è un operatore che agisce nel seguente modo

$$\hat{\rho}|\psi_i\rangle = p_i|\psi_i\rangle,$$

dove p_i rappresenta la probabilità di ottenere lo stato i -esimo. La matrice densità è ora una miscela di stati puri

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$$

e descrive la mancanza di conoscenza sui sistemi quantistici che avevamo precedentemente. Se utilizzassimo lo stesso operatore \hat{U} per descrivere l'evoluto temporale di $|\psi_i\rangle \xrightarrow{t} \hat{U}|\psi_i\rangle$, come possiamo applicarlo a $\hat{\rho}$?

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \longrightarrow \sum_i p_i \hat{U}|\psi_i\rangle\langle\psi_i| \hat{U}^\dagger$$

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

Vediamo se le distribuzioni di probabilità classiche vengono conservate.

Dimostrazione.

$$\begin{aligned}\hat{\rho}'\hat{U}|\psi_i\rangle &= \hat{U}\hat{\rho}\hat{U}^\dagger\hat{U}|\psi_i\rangle \\ &= \hat{U}\hat{\rho}|\psi_i\rangle \\ &= \hat{U}p_i|\psi_i\rangle \\ &= p_i\hat{U}|\psi_i\rangle \\ &= p_i|\psi_i(t)\rangle\end{aligned}$$

□

LEZIONE 2 - 12/10/2021

Vediamo alcune proprietà generali della matrice densità:

1. ρ è hermitiana e positiva.

Dimostrazione. Ricordando che $p_i \geq 0 \in \mathbb{R}$ allora

$$\left(\sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\right)^\dagger = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|.$$

La positività di un operatore A è data dalla proprietà $\langle\phi|A|\phi\rangle \geq 0$ per ogni $|\phi\rangle$, quindi

$$\langle\phi|\rho|\phi\rangle = \langle\phi|\sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\phi\rangle = \sum_i p_i \langle\phi|\psi_i\rangle \underbrace{\langle\psi_i|\phi\rangle}_{\langle\phi|\psi_i\rangle^*} = \sum_i p_i |\langle\phi|\psi_i\rangle|^2 \geq 0.$$

□

2. $\text{Tr } \rho = 1$.

Dimostrazione.

$$\text{Tr} \left[\sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \right] = \sum_i p_i \text{Tr} |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \sum_i p_i \langle\psi_i|\psi_i\rangle = 1,$$

□

3. $\text{Tr } \rho^2 \leq 1$ e $\text{Tr } \rho^2 = 1$ solo per gli stati puri.

Dimostrazione. Dato che ρ è hermitiana allora può essere diagonalizzata, quindi $\rho|n\rangle = \rho_n|n\rangle$. In particolare avremo

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \equiv \sum_n \rho_n |n\rangle\langle n|; \quad (1.2.1)$$

quindi la matrice densità è scrivibile come somma del prodotto tra i proiettori in direzione degli autospazi e dei corrispondenti autovalori. Notiamo che la formula

precedente consiste di fatto nella diagonalizzazione in notazione di Dirac. Chiamamente in generale $p_i \neq \rho_i$! Dato che $\text{Tr } \rho = 1$ allora dalla precedente si ha che $\sum_n \rho_n = 1$. Cerchiamo di valutare $\text{Tr } \rho^2 = \sum_n \rho_n^2$: dato che la matrice densità è hermitiana allora $\rho_n \geq 0 \in \mathbb{R}$, ma al tempo stesso si deve avere $0 \leq \rho_n \leq 1$ poiché $\sum_n \rho_n = 1$. Ma allora

$$0 \leq \rho_n^2 \leq \rho_n \leq 1, \quad \Rightarrow \quad \sum_n \rho_n^2 \leq \sum_n \rho_n = 1.$$

Il caso limite è dato da

$$\sum_n \rho_n^2 = 1 = \sum_n \rho_n \quad \Leftrightarrow \quad \rho_n = \rho_n^2, \quad \forall n,$$

ma per numeri tra 0 e 1 questo è vero solamente per $\rho_n = 1 \vee \rho_n = 0$: solamente un valore è diverso da 0 (uguale a 1) mentre tutti gli altri sono 0, quindi $\rho = |n\rangle\langle n|$ per un particolare n , ossia si tratta di uno stato puro. \square

Si noti che la formula $\text{Tr } \rho^2 = 1 \Leftrightarrow$ stato puro è un criterio per stabilire se effettivamente uno stato è puro. Inoltre, essendo ρ è hermitiana, può sempre essere diagonalizzata secondo la (1.2.1) e quindi la sua forma non è unica.

Alla luce della definizione della matrice densità, cerchiamo di comprendere come alcuni postulati della meccanica quantistica possano essere riscritti in termini di $\hat{\rho}$. In particolare iniziamo dal

- **IV Postulato (Evoluzione temporale):** Cosa succede nel momento in cui il nostro sistema quantistico evolve? Se è descritto da una funzione d'onda $|\psi\rangle$, dopo un certo intervallo di tempo t , il nostro stato evolverà nel seguente modo

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U} |\psi\rangle,$$

dove \hat{U} è l'operatore unitario di evoluzione temporale.

Se invece il nostro sistema è descritto da un insieme di stati, con ciascuno la propria probabilità $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$ e per questo insieme possiamo definire una matrice densità $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$, allora considerando sistemi chiusi, la nostra matrice densità evolverà come

$$\hat{\rho}' = \sum_i p_i \hat{U} |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \hat{U}^\dagger = \hat{U} \rho \hat{U}^\dagger,$$

quindi $\hat{\rho}'$ descriverà un nuovo insieme di stati $\{p_i, \hat{U} |\psi_i\rangle\}$ dove però p_i è preservata.

Osserviamo che se il nostro stato iniziale è uno stato puro, la matrice densità che possiamo costruire è anch'essa uno stato puro. Se il nostro sistema è chiuso, cioè non interagisce con l'ambiente e quindi l'evoluzione dello stato puro rimane uno stato puro, allora anche l'evoluto della matrice densità rimane uno stato puro.

1.3 Misurazioni

Prima di addentrarci nella discussione sulle misurazioni, che saranno uno degli argomenti chiave del corso, introduciamo il postulato della meccanica quantistica relativo alle osservabili.

- **II Postulato (Osservabili):** Che cosa si può misurare in meccanica quantistica? Vengono misurate le **osservabili**, ossia **operatori autoaggiunti** (o **hermitiani**) \hat{A} tali che

$$\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \text{ con } \hat{A}^\dagger = \hat{A},$$

dove più precisamente $\hat{A}^\dagger \equiv (\hat{A}^t)^*$. Dal punto di vista degli elementi di matrice, calcolare l'aggiunto di A_{ij} significa $A_{ij}^\dagger = A_{ji}^*$. Dunque le matrici autoaggiunte (hermitiane) sono tali che $A^\dagger \equiv (A^t)^* = A$.

Focalizzando la nostra attenzione sugli operatori hermitiani, richiamiamo un importante teorema dell'algebra lineare:

Teorema 1.1 (Teorema Spettrale). *Sia \hat{A} un operatore autoaggiunto su uno spazio di Hilbert \mathcal{H} (reale o complesso). Allora esiste una base ortonormale di \mathcal{H} composta da autovettori di \hat{A} , ossia $\exists \{|a_i\rangle\} \in \mathcal{H}$ tale che $\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$ dove gli autovalori $a_i \in \mathbb{R}$.*

- **III Postulato (Regola di Born):**

1. **Misurazione:** sia \hat{A} un osservabile con autostati $|a_i\rangle$, ossia $\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$. Prendiamo per semplicità $a_i \neq a_j \ \forall i \neq j$ (osservabile con autovalori distinti). Consideriamo uno stato generico espanso sugli autostati precedenti: $|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |a_i\rangle$. Allora una misura dell'osservabile \hat{A} produce il valore a_i con probabilità data da $|\alpha_i|^2$ (assumendo lo stato correttamente normalizzato).
2. **Collasso dello stato:** cosa succede allo stato del sistema dopo la misurazione? Istantaneamente lo stato $|\psi\rangle$ collassa sull'autostato associato all'autovalore risultante dalla misura. Ad esempio se misurando otteniamo a_i allora $|\psi\rangle \rightarrow |a_i\rangle$. Effettuando delle misure successive sullo stato si ottiene sempre $|a_i\rangle$ con probabilità esattamente uguale a 1.

Soffermiamoci su questo postulato e analizziamone bene il contenuto. Questo tipo di misurazione prende il nome di **Von Neumann measurement** o **projective measurement**. Il motivo di quest'ultimo nome è che se noi abbiamo un'osservabile \hat{A} e a_i è l'autovalore associato allo stato $|a_i\rangle$, allora possiamo definire un operatore \hat{P}_i che prende il nome di **proiettore** relativo allo stato $|a_i\rangle$, definito come

$$\hat{P}_i = |a_i\rangle\langle a_i|.$$

La probabilità associata al fatto che il nostro generico stato $|\psi\rangle$ collassi nello stato $|a_i\rangle$ è pari a

$$\begin{aligned} p_i &= \langle \psi | \hat{P}_i | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | a_i \rangle \langle a_i | \psi \rangle \\ &= |\langle a_i | \psi \rangle|^2. \end{aligned}$$

I **proiettori** hanno alcune proprietà particolari

1. $\hat{A} = \sum_i a_i \hat{P}_i$;
2. $\sum_i \hat{P}_i = \mathbb{I}$;
3. $\hat{P}_i \hat{P}_j = \hat{P}_i \delta_{ij}$.

Per via di quest'ultima proprietà chiamiamo questo tipo di misure **orthogonal measurement** e questo concetto si rifà al punto 2 del postulato relativo alle misure. Alla luce della definizione di proiettore possiamo vedere l'operazione di misura sotto questo punto di vista: se abbiamo uno stato $|\psi\rangle$ e andiamo a misurare l'osservabile \hat{A} , proiettiamo lo stato iniziale nello stato a_i :

$$\begin{aligned}
 |\psi\rangle &\longrightarrow \hat{P}_i |\psi\rangle = |a_i\rangle \langle a_i| \sum_k \langle a_k | \psi \rangle |a_k\rangle \\
 &= |a_i\rangle \langle a_i| \sum_k \sqrt{p_k} |a_k\rangle \\
 &= \sqrt{p_i} |a_i\rangle
 \end{aligned}$$

Affinché sia uno stato, deve essere necessariamente normalizzato: $|\psi\rangle' = \frac{P_i|\psi\rangle}{\sqrt{p_i}}$. Da qui in poi è possibile valutare il valore di aspettazione dell'osservabile $\langle A \rangle$ e l'incertezza associata ΔA :

$$\begin{aligned}
 \langle A \rangle &= \langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_i a_i \langle \psi | \hat{P}_i | \psi \rangle = \sum_i p_i a_i \\
 \Delta A &= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2
 \end{aligned}$$

1.3.1 Misurazioni della matrice densità

Consideriamo il nostro insieme di stati $p_i, |\psi_i\rangle$, dove $\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$. Abbiamo un'osservabile \hat{A} con i suoi autostati $|a_n\rangle$, autovalori a_n e possiamo definire i proiettori $\hat{P}_n = |a_n\rangle \langle a_n|$.

Se prendiamo uno stato $|\psi_i\rangle$ dall'insieme di stati e valutiamo la probabilità di ottenere lo stato a_n dato lo stato ψ_i otteniamo

$$p(a_n|i) = \langle \psi_i | P_n | \psi_i \rangle = \text{Tr} \left(\hat{P}_n |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \right)$$

In generale, per una matrice densità ρ , la probabilità di ottenere a_n è

$$\begin{aligned}
 p(a_n) &= \sum_i p_i p(a_n|i) \\
 &= \sum_i p_i \text{Tr} \left(\hat{P}_n |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \right) \\
 &= \text{Tr} \left(\hat{P}_n \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \right) \\
 &= \text{Tr} \left(\hat{P}_n \hat{\rho} \right) \\
 &= \text{Tr} \left(\hat{\rho} \hat{P}_n \right)
 \end{aligned} \tag{1.3.1}$$

Dopo aver eseguito la misura di a_n , otteniamo lo stato $|a_n\rangle$ che in termini di matrice densità possiamo scrivere come

$$\hat{\rho}_n = \frac{\hat{P}_n \hat{\rho} \hat{P}_n}{\text{Tr}(\hat{P}_n \hat{\rho})} \quad (1.3.2)$$

Possiamo dimostrare che si tratta di uno stato puro.

Dimostrazione.

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_k &= \frac{\hat{P}_n \hat{\rho} \hat{P}_n}{\text{Tr}(\hat{P}_n \hat{\rho})} \\ &= \frac{|a_n\rangle\langle a_n| \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| |a_n\rangle\langle a_n|}{\text{Tr}(\hat{P}_n \hat{\rho})} \\ &= \frac{|a_n\rangle (\sum_i p_i \langle a_n|\psi_i\rangle \langle\psi_i|a_n\rangle) \langle a_n|}{\text{Tr}(\hat{P}_n \hat{\rho})} \\ &= \frac{\text{Tr}(\hat{P}_n \hat{\rho})}{\text{Tr}(\hat{P}_n \hat{\rho})} |a_n\rangle\langle a_n| \\ &= |a_n\rangle\langle a_n| \end{aligned}$$

□

I risultati ottenuti dalle equazioni (1.3.1) e (1.3.1) rappresentano l'equivalente del **III Postulato** per $\hat{\rho}$.

LEZIONE 3 - 14/10/2021

Abbiamo visto come sia possibile calcolare il valore di aspettazione di $\langle A \rangle$ a partire dalle funzioni d'onda. Vogliamo vedere come sia possibile sfruttare la matrice densità per ottenere il medesimo risultato. Cominciamo con il considerare il generico insieme di stati $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$ e la matrice densità corrispondente $\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$. Per il singolo stato $|\psi_i\rangle$ avevamo visto che

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_{\psi_i} &= \sum_k p_k a_k \\ &= \sum_k |\psi_i\rangle\langle a_k| |a_k\rangle\langle\psi_i| a_k \\ &= \langle\psi_i| \sum_k a_k |a_k\rangle \langle a_k|\psi_i\rangle \\ &= \langle\psi_i| A |\psi_i\rangle \end{aligned}$$

Tuttavia, nel caso della matrice densità, abbiamo un insieme di funzioni d'onda, per cui

$$\begin{aligned}
 \langle A \rangle &= \sum_i p_i \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle \\
 &= \sum_i p_i \text{Tr} \left(\hat{A} |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \right) \\
 &= \text{Tr} \left(\hat{A} \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \right) \\
 &= \text{Tr} \left(\hat{A} \rho \right) .
 \end{aligned}$$

Equazione di von-Neumann - Liouville

Per il **IV Postulato**, riguardante l'evoluzione temporale, la matrice densità evolve come $\hat{U}\hat{\rho}\hat{U}^\dagger$, ci chiediamo se sia possibile realizzare un'equazione analoga a quella di Schrödinger per la matrice densità. La risposta è affermativa infatti

$$\begin{aligned}
 \frac{d\hat{\rho}}{dt} &= \sum_i p_i \left(\frac{d|\psi_i\rangle}{dt} \langle\psi_i| + |\psi_i\rangle \frac{d\langle\psi_i|}{dt} \right) \\
 &= \sum_i \frac{p_i}{i\hbar} \left(\hat{H} |\psi_i\rangle\langle\psi_i| - |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \hat{H} \right) \\
 &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]
 \end{aligned}$$

Consideriamo ora un paio di esempi per assodare i concetti finora trattati

Esempio 1.2. Consideriamo un qubit nella base computazionale $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ oppure possiamo pensare di prendere la base

$$|a\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$|b\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}};$$

entrambe le basi sono degli stati puri.

Consideriamo lo stato $|a\rangle$ e costruiamo la matrice densità per la base computazionale

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} |0\rangle\langle 0| + \frac{1}{2} |1\rangle\langle 1| ,$$

come possiamo notare, gli stati hanno la medesima probabilità. Ora possiamo fare una **projective measurement** definendo i proiettori:

- $\hat{P}_0 = |0\rangle\langle 0|;$
- $\hat{P}_1 = |1\rangle\langle 1|;$
- $\hat{P}_a = |a\rangle\langle a|.$

Andiamo a misurare le probabilità di misurare $|0\rangle$ e $|1\rangle$ sullo stato $|a\rangle$:

$$p(|0\rangle) = \langle a|\hat{P}_0|a\rangle = \frac{1}{2} \quad , \quad p(|1\rangle) = \langle a|\hat{P}_1|a\rangle = \frac{1}{2}.$$

Cosa succede se consideriamo ρ ?

$$p(|0\rangle) = \langle 0|\hat{\rho}|0\rangle = \frac{1}{2} \quad , \quad p(|1\rangle) = \langle 1|\hat{\rho}|1\rangle = \frac{1}{2}.$$

Come possiamo notare otteniamo in entrambi i casi la medesima probabilità, se invece andassimo a misurare $|a\rangle$?

$$\begin{aligned} p(|a\rangle) &= \langle a|\hat{P}_a|a\rangle \\ &= \langle a|a\rangle \langle a|a\rangle \\ &= 1. \end{aligned}$$

Per quanto riguarda la matrice densità

$$\begin{aligned} p(|a\rangle) &= \langle a|\hat{\rho}|a\rangle \\ &= \text{Tr}(\hat{\rho}|a\rangle\langle a|) \\ &= \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

In questo caso, misurare in un'altra base ci dà due risultati differenti.

Questo esempio in realtà lo possiamo incontrare, dal punto di vista pratico, se ci addentriamo nello studio dello spin di un elettrone in un atomo (esperimento di Stern-Gerlach) oppure nella trattazione della polarizzazione di un fotone.

In generale noi possiamo scrivere la matrice densità in una base e poi riscriverla in un secondo momento in un'altra base

$$\hat{\rho} = \sum_k \omega_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k|,$$

dove

$$\{\omega_k, |\psi_k\rangle\} \quad \text{e} \quad |\psi_k\rangle = \sum_j a_j^k |a_j\rangle.$$

Nella nuova base, la matrice densità sarà

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= \sum_k \omega_k \left(\sum_j a_j^k |a_j\rangle \right) \left(\sum_i a_i^{*k} \langle a_i| \right) \\ &= \sum_{k,j,i} \omega_k a_j^k a_i^{*k} |a_j\rangle\langle a_i| \end{aligned}$$

per cui gli elementi di matrice saranno

$$\begin{aligned} \rho_{mn} &= \langle a_m|\hat{\rho}|a_n\rangle \\ &= \sum_k \omega_k a_m^k a_n^{*k} \end{aligned}$$

e gli elementi sulla diagonale

$$\rho_{nn} = \sum_k \omega_k |a_n^k|^2$$

1.3.2 POVM: Misura a valori operatoriali positivi

Molte tipi di misurazioni non possono essere viste come proiezioni, ad esempio la rivelazione della posizione di un fotone non può essere eseguita poiché quando misuriamo il fotone, esso viene assorbito dal rivelatore e il fotone non esiste più. La proiezione non permette inoltre di distinguere in maniera esatta due stati non ortogonali, ad esempio se abbiamo due stati $|\psi\rangle$ e $|\phi\rangle$, se sono tra loro ortogonali sarà facile distinguerli con i proiettori, ma se non sono ortogonali non posso distinguerli e gli unici risultati che possiamo dare sono:

- È nello stato $|\psi\rangle$;
- È nello stato $|\phi\rangle$;
- O in qualcos'altro.

Una misura a valori operatoriali positivi (POVM) è una misura i cui valori sono operatori semi-definiti positivi su uno spazio di Hilbert, che non richiedono ortogonalità, cioè non soddisfano la terza proprietà che abbiamo visto quando abbiamo introdotto i proiettori: $\hat{P}_i \hat{P}_j = \hat{P}_i \delta_{ij}$. La POVM può essere utile per classificare uno stato con 3 possibili identificazioni (come $|\psi\rangle$, $|\phi\rangle$ o "non so") dove invece una misura proiettiva è inutile.

1.3.3 Cambi di base: stati puri e miscele

Supponiamo di avere una matrice densità $\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ e un'osservabile $\hat{A} (|a_k\rangle, a_k)$. Vogliamo valutare il valore di aspettazione di questa osservabile:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \text{Tr} (\hat{\rho} \hat{A}) \\ &= \text{Tr} \left(\sum_{ijk} \rho_{ij} |a_i\rangle\langle a_j| a_k |a_k\rangle\langle a_k| \right) \\ &= \sum_{ik} \rho_{ik} a_k \text{Tr} (|a_i\rangle\langle a_k|) \\ &= \sum_{ik} \rho_{ik} a_k \langle a_k | a_i \rangle \\ &= \sum_k \rho_{kk} a_k \end{aligned}$$

Quindi, solo i $\rho_{kk} = \langle a_k | \rho | a_k \rangle$ sono necessari per calcolare il valore di aspettazione e gli elementi fuori diagonale nella nostra rappresentazione sono apparentemente inutili. Tuttavia, gli elementi off-diagonal spesso ci dicono se la matrice corrisponde a uno stato puro o meno. Se abbiamo una matrice di densità non diagonale in base a un osservabile, anche se il valore di aspettazione dell'osservabile stessa è dato solo dagli elementi diagonali, se gli elementi fuori diagonale sono diversi da zero allora lo stato può essere puro, poiché la matrice diagonalizzata può avere tutte le voci uguali a 0, tranne una uguale a 1. Questi elementi fuori diagonale sono chiamati coerenza della matrice densità. Per esempio, consideriamo la seguente matrice 2×2

$$\begin{pmatrix} a & c \\ c^* & b \end{pmatrix}$$

I coefficienti c e c^* prendono il nome di **coerenze**, questo perché:

- Se $c = c^* = 0$, allora abbiamo una miscela di stati;
- Se $c = c^* \neq 0$, allora possiamo avere uno stato puro, in quanto la matrice può essere diagonalizzata nella forma

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Osserviamo che, generalmente, c e c^* seguono una legge di decadimento, per cui scalano come e^{-t/T_1} , il che significa che lo stato sta perdendo la sua purezza al passare del tempo. Questo è uno dei problemi più importanti quando si lavora con dei sistemi come i qubit, in quanto ne limita il suo utilizzo.