

Лекция 4

II. Основные понятия квантовой теории информации

1. Описание состояний в квантовой механике. Волновая функция. Принцип суперпозиции. Чистые и смешанные состояния. Вычисление средних величин. Матрица и оператор плотности. Свойства матрицы плотности, ее размерность. Аналогия с классическими поляризованными состояниями.
2. Энтропия фон Неймана. Случаи чистых и смешанных состояний. Вычисление энтропии фон Неймана и Шеннона для двухуровневой системы.

В квантовой механике физическим величинам ставятся в соответствие операторы. Пусть f физическая величина (координата, энергия, энтропия). Зная волновую функцию системы, можно предсказать моменты физической величины, например, ее среднее значение:

$$\langle f \rangle = \int d\vec{r} \Psi^*(\vec{r}, t) \hat{f} \Psi(\vec{r}, t).$$

Волновая функция составляет основу математического аппарата квантовой механики. Каждое состояние системы может быть описано в данной момент времени определенной комплексной функцией, например, координат $\Psi(\mathbf{r})$. Квадрат модуля этой функции определяет распределение вероятностей значения координат: $|\Psi|^2 d\vec{r}$ - есть вероятность того, что произведенное над системой измерение обнаружит значение координат в элементе объема $d\vec{r}$ конфигурационного пространства (об измерении будет разговор в дальнейшем). Ψ - волновая функция или амплитуда вероятности была введена Э.Шредингером в 1926г.

Вообще, квантовый объект, т.е. величина f в зависимости от предыстории может оказаться в одном из трех типов состояний:

- 1) **в собственном состоянии** φ_n **какого-нибудь оператора** (например, энергии), когда априори известно, что

$\langle f \rangle = f_{nn} \equiv \int d\vec{r} \varphi_n^* \hat{f} \varphi_n$ и, следовательно, f не флуктуирует. В этом случае квантовые флуктуации отсутствуют и моменты величины f :

$$\langle f^k \rangle = \langle f \rangle^k:$$

- 2) **в чистом состоянии** Ψ , образованном суперпозицией или разложением в базисе векторов φ_n

$$\Psi(r, t) = \sum_n b_n \varphi_n(r).$$

В этом случае принципиальными становятся квантовые флуктуации величины f , поскольку известны лишь вероятности $|b_n|^2$ измерить то или иное значение f_{nn} :

$$\langle f^k \rangle = \sum_n |b_n|^2 (f_{nn})^k.$$

Здесь уместно напомнить о т.н. принципе суперпозиции - одном из основных утверждений квантовой механики, на котором строятся многие понятия квантовой информации.

Принцип суперпозиции (Ландау, Лифшиц)

Пусть в состоянии с волновой функцией $\psi_1(r)$ некоторое измерение приводит с достоверностью к определенному результату (I), а в состоянии $\psi_2(r)$ - к результату (II). Тогда принимается, что всякая линейная комбинация ψ_1 и ψ_2 , т.е. всякая функция вида $\alpha\psi_1 + \beta\psi_2$ (α и β - комплексные числа) описывает такое состояние, в котором то же измерение дает либо результат (I), либо результат (II). Этот принцип без труда можно объединить на случай n состояний.

Итак, суперпозиция функций $\alpha\psi_1 + \beta\psi_2$ снова дает чистое состояние с определенной волновой функцией. В таком состоянии среднее значение оператора \hat{f} содержит интерференционный член:

$$\langle f \rangle = \int dr \psi^* f \psi = \left\{ \text{где } \psi = \alpha\psi_1 + \beta\psi_2 \right\} = P_1 f_{11} + P_2 f_{22} + 2 \operatorname{Re}(\alpha^* \beta f_{12}), \quad (1)$$

$$\text{где } P_i = |\alpha|^2; \quad f_{ij} = \int dr \psi_i^* f \psi_j$$

3) **В смешанном состоянии.** В таком состоянии добавляется неполнота информации о волновой функции, которую дает некогерентная смесь волновых функций. При этом отсутствуют интерференционные члены - третье слагаемое в сумме (1). Матричные элементы f_{ij} содержат квантово-механическое усреднение $f_{ij} = \int dr \psi_i^* f \psi_j$. К нему добавляется классическое усреднение с помощью распределений P_i и обычных правил теории вероятностей при вычислении средних величин:

$$\langle \bar{f} \rangle = \sum_i P_i f_{ii} = \sum_i P_i \int dr \psi_i^* f \psi_i,$$

где P_i - действительные положительные числа, и $\sum_i P_i = 1$.

Чистые и смешанные состояния имеют тесную аналогию с когерентными и некогерентными полями в оптике. Так, когерентное сложение полей приводит к возведению в квадрат суммы полей, в то время как некогерентная смесь полей от двух независимых источников со случайными флуктуациями фаз - к сложению интенсивностей, т.е. квадратов модулей соответствующих полей.

Вычисление средних величин

Рассмотрим задачу вычисления средних значений физических величин в квантовой теории в общем случае смешанного состояния, когда имеется ансамбль чистых состояний, распределенных с классической функцией распределения P . При вычислении средних значений в каждом из чистых состояний, составляющих смесь, добавляется индекс "i":

$$\langle L^{(i)} \rangle = \int d\tau \psi^{(i)*} \hat{L} \psi^{(i)}, \quad (2)$$

где $d\tau$ - набор дифференциалов пространственных переменных. После квантово-механического усреднения с помощью волновой функции необходимо усреднять выражения (2) по классическому распределению вероятностей $P(i)$:

$$\langle \bar{L} \rangle = \sum_i P(i) \langle L^{(i)} \rangle. \quad (3)$$

Таким образом, квантовый ансамбль подобен ансамблю Гиббса в статистической физике, который состоит из совокупности систем, распределенных с вероятностями $P(p, q)$ по возможным состояниям системы.

В квантовой механике полагается, что P_1N систем ансамбля находится в состоянии Ψ_1 , P_2N систем - в состоянии Ψ_2, \dots, P_iN систем - в состоянии Ψ_i , где N - общее число систем. Видно, что в смешанном состоянии волновая функция не определена, но имеется набор чисел P_i , определяющих вероятность того, что система находится в чистом состоянии Ψ_i .

Пусть соответствующее чистое состояние определяется конечным набором собственных функций какого-нибудь оператора (например, поляризации - это две ортогональные поляризации). Тогда произвольное чистое состояние:

$$\Psi^{(i)} = \sum_n a_n^{(i)} \Psi_n, \quad \sum_n a_n^{(i)*} a_n^{(i)} = 1. \quad (*)$$

Вообще говоря $a_n = a_n(t)$. Векторы (волновые функции) Ψ_n называются базисными, а представление (*) - базисным или n -представлением.

Подставим эту волновую функцию в выражение для среднего значения (2):

$$\Psi^{(i)} = \sum_{nn'} L_{nn'} a_n^{(i)*} a_{n'}^{(i)}, \quad \text{где } L_{nn'} = \int \Psi^* \hat{L} \Psi_n d\tau$$

Усредним это выражение по статистическому ансамблю (3):

$$\langle \bar{L} \rangle = \sum_i P(i) \sum_{n, n'} L_{nn'} a_n^{(i)*} a_{n'}^{(i)}.$$

Тогда

$$\langle \bar{L} \rangle = \sum_{n, n'} L_{nn'} \rho_{n'n} = \sum_n (L\rho)_{nn}, \quad \text{или}$$

$$\langle \bar{L} \rangle = Sp(L\rho) = Sp(\rho L)$$

- сумма диагональных элементов. Здесь ρ - квадратная матрица - матрица плотности, которая полностью задает смешанное состояние. Зная матрицу плотности, можно вычислять средние значения операторов. Иногда говорят об операторе плотности

$$\hat{\rho} = \sum_i P_i \hat{\rho}_i, \quad \rho_{mn} = a_m a_n^* \quad (4)$$

Свойства матрицы плотности

1. $\rho_{mn} = \rho_{nm}^*$ - эрмитовость
2. $Sp(\rho) = 1$ - нормировка
3. $(\rho^2)_{nn} = \rho_{nn}$ - только для чистых состояний (одно слагаемое в статистическом усреднении)
4. $0 \leq \rho_{nn} \leq 1$ - это следствие второго свойства.

Замечание. В энергетическом представлении диагональные элементы ρ_{nn} - населенности уровней, а недиагональные характеризуют степень корреляции $a_m^* a_n$ состояний n и m в статистическом ансамбле. Поэтому условие $Sp(\rho) = 1$ эквивалентно “вероятность найти систему на каком-то уровне = 1”. В

то же время если амплитуды состояний различных систем ансамбля содержат случайный фазовый множитель $a_n^{(i)} \sim \exp i(\varphi_n^{(i)})$, то при $m \neq n$

$$\rho_{mn} \sim \overline{\exp i(\varphi_m - \varphi_n)} = 0$$

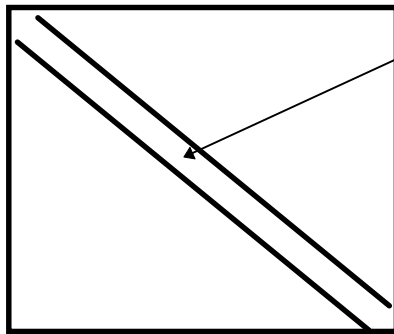
и состояние ансамбля полностью характеризуется населенностями состояний ρ_n .

Свойство $0 \leq \rho_{nn} \leq 1$ - неотрицательность вероятности. Свойство эрмитовости (1.) - обеспечивает действительность наблюдаемых величин.

Из определения следует, что для чистого состояния $\rho_{nn}\rho_{mm} = |\rho_{nm}|^2$. Для смешанного состояния элементы матрицы плотности удовлетворяют неравенству Коши-Буняковского:

$$|\rho_{nm}|^2 < \rho_{nn}\rho_{mm}.$$

Размерность матрицы плотности.



n - диагональных элементов - действительные. Остается $(n^2 - n)$ - комплексных. Эрмитовость дает $(n^2 - n)/2$ - комплексных, т.е. $(n^2 - n)$ действительных. Добавляем к ним n диагональных. Остается n^2 - действительных. Нормировка $S\rho(\rho) = 1$ дает $n^2 - 1$ действительных.

Если состояние чистое, то описание возможно с помощью волновой функции, отсюда - n комплексных чисел, $2n$ - действительных. Нормировка - $2n - 1$. Общая фаза ВФ не важна - $2n - 2$. Например, двухуровневая система:

$$\begin{pmatrix} a_1^2 & a_1 a_2 e^{i\varphi} \\ a_1 a_2 e^{-i\varphi} & 1 - a_1^2 \end{pmatrix}. \quad \varphi_1 + \varphi_2 = \text{const.}, \quad \varphi - \text{относительная фаза.}$$

Два числа: a_1 и φ .

Если замкнутая система находится в одном из чистых энергетических состояний:

$$\Psi = \varphi_1 \exp\{-i E_1 / \hbar\}. \quad (5)$$

Тогда из определения м.п. (4) лишь один ее элемент отличен от нуля:

$$\rho_{mn} = \delta_{mn} \delta_{n1}.$$

Обычно свойство третье свойство матрицы плотности или матричное уравнение

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho} \quad (6)$$

используется для проверки "чистоты" состояния. Другими словами, нарушение равенства (6) может служить признаком смешанного состояния. Однако существует другая более удобная мера смешанности квантовых состояний. Эта мера является статистической величиной и широко используется в квантовой информации - энтропия.

Энтропия фон Неймана

Определим оператор энтропии через оператор плотности $\hat{\rho}$:

$$\hat{S} \equiv -\ln \hat{\rho},$$

по аналогии с тем, как это делалось в статистической физике, где роль $\hat{\rho}$ играла функция распределения. тогда, очевидно, физическая величина “энтропия” или S есть среднее значение этого оператора $\langle \hat{S} \rangle$ или по правилам вычисления средних величин в квантовой механике:

$$S = -\langle \ln \hat{\rho} \rangle = -Sp(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}). \quad (7)$$

Встает вопрос, как вычислять логарифм оператора (например, недиагональные элементы матрицы плотности - вообще могут быть комплексными величинами, для которых логарифм не определен).

Рассмотрим две ситуации.

1. Чистое состояние. В этом случае возможно описание квантовой системы с помощью волновой функции (*) в базисном представлении (т.е. В.Ф. - это когерентная суперпозиция базисных состояний какого-нибудь оператора):

$$\Psi^{(i)} = \sum_n a_n^{(i)} \Psi_n, \quad \sum_n a_n^{(i)*} a_n^{(i)} = 1.$$

В этом случае, конечно матрица плотности недиагональна. Наличие недиагональных элементов в базисном представлении как раз и отражает факт когерентности суперпозиции базисных состояний. Из линейной алгебры известно, что

для любой эрмитовой матрицы A существует такая невырожденная матрица T , что матрица $\tilde{A} = T^* A T$ является диагональной.. Диагональные элементы матрицы \tilde{A} в этом случае действительные и являются собственными значениями матрицы A . Более того, существует такая невырожденная матрица T , что диагональные элементы \tilde{A} - принимают только значения $+1, -1$ и/или 0 .

Физически, матричное унитарное преобразование $\tilde{A} = T^* A T$ означает смену представления (или базиса). Таким образом, чистое состояние системы всегда может быть представлено в виде собственного состояния какого-нибудь оператора. Например, рассмотрим когерентную суперпозицию двух состояний или кубит:

$$\Psi = a|0\rangle + b|1\rangle, \quad |a|^2 + |b|^2 = 1.$$

Пусть $a = b = 1/\sqrt{2}$. Полным аналогом такого состояния является состояние поляризации света, когда поляризация составляет угол 45° с вертикалью. Действительно, измерения поляризации отдельных фотонов в этом состоянии будут давать либо горизонтальную, либо вертикальную поляризации с вероятностью $1/2$. В то же время. Измерения, проводимые в базисе $+45^\circ$ - всегда будут давать достоверный результат.

Эти рассуждения можно обобщить на случай произвольной (эллиптической) поляризации, когда в разложении волновой функции отличны от нуля два комплексных коэффициента.

Энтропия фон Неймана, определяемая через матрицу плотности, инвариантна относительно выбора базиса или представления, т.е. переходя к диагональному представлению будем получать:

$$S = - \sum_n \rho_n \ln \rho_n. \quad (8)$$

Но в чистом состоянии (*), как было только что показано, лишь один элемент матрицы плотности отличен от нуля, т.е. $\rho_n = 0$ или 1 , а значит $S = 0$. Как было показано на предыдущих лекциях, равенство нулю энтропии интерпретируется как минимальная неопределенность (хаотичность). Вопрос: а когда неопределенность будет максимальной?

2. Смешанное состояние. Рассмотрим однородную смесь состояний: $\rho_n = \text{const.} = 1/\Gamma$, где, как обычно, Γ - число состояний с данной энергией, т.е. микроканонический ансамбль Гиббса.

В смешанном состоянии, как было показано выше, диагональные элементы матрицы плотности равны нулю - матрица имеет диагональный вид с диагональными элементами $\rho_n = \text{const.} = 1/\Gamma$.

Известно, что в диагональном представлении функции от операторов удовлетворяют соотношению:

$$\left[F(\hat{f}) \right]_{nn} = F(f_{nn}), \text{ где функционал } F \text{ в данном случае - логарифм.}$$

Тогда, $\hat{\rho} = \hat{I}/\Gamma$, $\hat{\rho}^2 = \hat{I}/\Gamma^2$ и из (7) следует, что

$$S = - \sum_{n=1}^{\Gamma} (1/\Gamma) \ln(1/\Gamma) = \ln \Gamma.$$

Отсюда видно, что выполняется неравенство $0 \leq S \leq \ln \Gamma$.

Рассмотрим двухуровневую систему, когда волновая функция имеет вид:

$$\Psi = a|0\rangle + b|1\rangle. \quad (9)$$

Такой волновой функцией описываются, например, электронные или ядерные спины, двухуровневые атомы и проч. Это объект, который называется кубит - квантовый бит. Пусть основному состоянию атома приписывается значение собственного вектора $|0\rangle$, а возбужденному - собственный вектор $|1\rangle$ (или значение проекции на ось z спина). Эти векторы в квантовой механике записываются в виде столбцов $|\alpha\rangle$ ($\alpha = 0, 1$)

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Собственные “бра” векторы $\langle\alpha|$ образуют эрмитово-сопряженные строки:

$\langle\alpha| = |\alpha\rangle^+$. Вектор состояния оканчивается на окружности единичного радиуса в двумерном гильбертовом пространстве. Измерение такого состояния состоит в определении коэффициентов разложения, или проекций измеряемого состояния на базисные состояния:

$$a = \langle 0 | \Psi \rangle, \quad b = \langle 1 | \Psi \rangle.$$

Собственному представлению оператора плотности двухуровневой системы, находящейся в чистом состоянии, соответствует диагональная матрица, выраженная через собственные векторы:

$$\hat{\rho}(\alpha) \equiv |\alpha\rangle\langle\alpha|,$$

причем двум возможным (собственным) состояниям отвечают следующие матрицы плотности:

$$|0\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{Видно, что } Sp\hat{\rho}(\alpha) = 1). \quad \text{Т.о. для каждого } \alpha = 0, 1$$

у двухуровневой системы, находящейся в чистом состоянии, имеется только одно ненулевое значение матрицы, равное 1

Для смешанного состояния и выбранного базиса матрица плотности имеет диагональный вид, поскольку недиагональные элементы, отвечающие за “когерентность” суперпозиции (9) равны нулю:

$$\hat{\rho} = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \hat{\rho}(\alpha) = \begin{pmatrix} p_0 & 0 \\ 0 & p_1 \end{pmatrix}, \quad \sum_{\alpha} p_{\alpha} = 1.$$

Отсюда сразу следует, что энтропия S совпадает с классической энтропией Шеннона случайной величины p_{α} . Забегая вперед, можно сказать, что энтропия фон Неймана совпадает с энтропией Шеннона.

Рассмотрим когерентную суперпозицию (9). Тогда вектор ее состояния:

$$|\Psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

$$\langle\Psi| = a^*|0\rangle + b^*|1\rangle = \begin{pmatrix} a^* & b^* \end{pmatrix}$$

Матрица плотности чистого состояния уже недиагональна и в базисном представлении имеет вид:

$$\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi| = \begin{pmatrix} |a|^2 & ab^* \\ a^*b & |b|^2 \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Собственные значения этой матрицы находятся по правилу:

Напоминание: Пусть A - квадратная матрица $n \times n$, тогда любой вектор x , из пространства V^n для которого выполняется $Ax = \lambda x$ называется собственным вектором, а λ - собственным значением матрицы. Это уравнение эквивалентно уравнению $(A - \lambda I)x = 0$. Это однородная система линейных уравнений. Нетривиальные решения имеются тогда, когда определитель равен нулю:

$$\det(A - \lambda I) = 0. \quad \text{Или } \det\{a_{mn} - \delta_{mn}\lambda\} = \det A_{mn} = 0, \quad \text{где } A_{mn} = a_{mn} - \delta_{mn}\lambda.$$

Составим уравнение для собственных значений матрицы (10):

$$\det(A - \lambda I) = \det \begin{pmatrix} |a|^2 - \lambda & ab^* \\ a^*b & |b|^2 - \lambda \end{pmatrix} = (aa^* - \lambda)(bb^* - \lambda) -$$

$$(ab^*)(a^*b) = 0. \rightarrow aa^*bb^* + \lambda^2 - \lambda(aa^* + bb^*) - (ab^*)(a^*b) = \lambda^2 - \lambda = 0$$

и, тогда $\lambda_{1,2} = 0, 1$.

Далее, найдем энтропию Шеннона чистого состояния суперпозиции (9). Она похожа (совпадает) с энтропией смешанного состояния с заданными классическими вероятностями заполнения или населенностями $\rho_{00} = |a|^2$, $\rho_{11} = |b|^2 = 1 - |a|^2$, поскольку не учитывает вклада недиагональных членов

$\rho_{01} = \rho_{10}^* = ab^*$. Итак, энтропия Шеннона оказывается:

$$H(|a|^2) = -|a|^2 \log_2 |a|^2 - (1 - |a|^2) \log_2 (1 - |a|^2).$$

Максимальное значение эта величина достигает при $|a|^2 = |b|^2 = \frac{1}{2}$,

когда $\rightarrow H = \log_2 2 = 1 \text{ бит}$.

Отметим, что отличие матрицы плотности чистого состояния от смешанного состоит в том, что матрица плотности чистого состояния имеет только одно собственное значение, равное единице, в то время как для смешанного состояния у матрицы плотности отличны от нуля несколько собственных значений - т.н. парциальные (т.е. взвешенные с классическими вероятностями) населенности соответствующих чистых состояний.

Энтропия фон Неймана, определяемая через матрицу плотности, согласно (8), в отличие от энтропии Шеннона, инвариантна относительно выбора представления матрицы плотности. Из (8) видно, что

$$S = -\sum_n \rho_n \ln \rho_n, \quad \text{где } \lambda_n = 0, 1 \rightarrow S(\rho) = 0 < H.$$

Приложения. (необязательно)

В квантовой механике доказывается, что любой эрмитов оператор, действующий в гильбертовом пространстве двухуровневой системы, можно представить в виде суммы:

$$\hat{f} = aI + b\sigma_x + c\sigma_y + d\sigma_z, \quad (\text{П1})$$

где a, b, c, d - вещественные числа, а $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ - операторы Паули:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Операторы Паули удовлетворяют следующим коммутационным соотношениям:

$$\sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x = i\sigma_z,$$

$$\sigma_y \sigma_z = -\sigma_z \sigma_y = i\sigma_x, \quad \sigma_x \sigma_z = -\sigma_z \sigma_x = i\sigma_y,$$

$$\sigma_z \sigma_x = -\sigma_x \sigma_z = i\sigma_y.$$

Подставляя выражения для операторов Паули в разложение для f , находим:

$$\hat{f} = \begin{pmatrix} a+d & b-ic \\ b+ic & a-d \end{pmatrix}. \quad (\text{П2})$$

Часто разложение для f пишут в другом (эквивалентном) виде:

$$\hat{f} = \frac{1}{2} (I + a_x \sigma_x + a_y \sigma_y + a_z \sigma_z) \equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+a_z & a_x + ia_y \\ a_x - ia_y & 1-a_z \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (\hat{I} + a\hat{\sigma}). \quad (\text{Ё})$$

Заметим, что коэффициенты разложения (П1) произвольного оператора f по матрицам Паули имеют непосредственный физический смысл. Они определяют два разрешенных значения, которые принимает наблюдаемая f при отдельных измерениях (проблема измерений квантовых состояний - будет рассмотрена ниже). Найдем уравнение для собственных значений матрицы (Е):

Напоминание: Пусть A - квадратная матрица $n \times n$, тогда любой вектор x , из пространства V^n для которого выполняется $Ax = \lambda x$ называется собственным вектором, а λ - собственным значением матрицы. Это уравнение эквивалентно уравнению $(A - \lambda I)x = 0$. Это однородная система линейных уравнений. Нетривиальные решения имеются тогда, когда определитель равен нулю:

$$\det(A - \lambda I) = 0. \text{ Или } \det \{a_{mn} - \delta_{mn}\lambda\} = \det A_{mn} = 0, \text{ где } A_{mn} = a_{mn} - \delta_{mn}\lambda.$$

Составим уравнение для собственных значений (П2):

$$\det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} (a+d) - \lambda & (b-ic) \\ (b+ic) & (a-d) - \lambda \end{vmatrix} = (a+d-\lambda)(a-d-\lambda) -$$

$$(b+ic)(b-ic) = 0$$

и, тогда

$$\lambda_{1,2} = a \pm \sqrt{d^2 + b^2 + c^2}.$$