САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Физический факультет

Кафедра физики высоких энергий и элементарных частиц

Эволюция запутанных состояний в квантовой механике Линдблада-Франке

Дипломная работа студентки 408 группы
Изотовой Екатерины Александровны

Научный руководитель:
д.ф. - м.н., профессор Андрианов А. А.

Рецензент:
д.ф. - м.н., профессор Марачевский В. Н.

Заведующий кафедрой:
д.ф. - м.н., профессор Иоффе М. В.

Санкт-Петербург
2017 г.

Содержание

1 Введение

В классической квантовой механике для описания квантового состояния используется волновой вектор $|\psi\rangle$, принадлежащий гильбертову пространству $\mathcal{H}$. Эволюция вектора состояния во времени приводит тоже к некоторому вектору состояния.

Но проблема состоит в том, что после измерения система описывается уже не вектором состояния (чистое состояние), а ансамблем векторов состояния с определенными классическими вероятности, сумма которых равна 1 (смешанное состояние). Такое состояние описывается матрицей плотности ρ, которую можно записать в следующем виде:

$$\rho = \sum_{i=1}^{n} p_i P_{\psi_i} \tag{1}$$

где $P_{\psi_i} = |\psi_i\rangle \langle\psi_i|$ - проекция на состояние $|\psi_i\rangle$ (аналог чистого состояния в терминах матрицы плотности), $\sum_{i=1}^{n} p_i = 1$.

Докажем, что такое состояние не обязательно можно представить, как чистое. Например, рассмотрим двумерное гильбертово пространство с базисом $\{|0\rangle, |1\rangle\}$, и в нем матрицу плотности:

$$\rho = \frac{1}{2}(|0\rangle \langle 0| + |1\rangle \langle 1|) \tag{2}$$

Из произвольного вектора состояния $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$, $|a|^2 + |b|^2 = 1$, получается матрица плотности чистого состояния:

$$P_\psi = |\psi\rangle \langle\psi| = |a|^2 |0\rangle \langle 0| + |b|^2 |1\rangle \langle 1| + ab^* |0\rangle \langle 1| + ba^* |1\rangle \langle 0| \tag{3}$$

Сравнивая с 2, получаем, что $ab^* = 0$, значит или $|a|^2 = 0$, или $|b|^2 = 0$, значит матрицу плотности 2 нельзя представить в виде проекционного оператора, т.е. чистого состояния.

Таким образом, смешанное состояние, получающееся после измерения, в общем случае нельзя получить унитарной эволюцией (эволюцией Шредингера) вектора состояния. Поэтому мы будем рассматривать другие варианты эволюции, при которых такое состояние можно получить.

Далее будем рассматривать эволюцию во времени именно матрицы плотности, для этого есть ряд причин, но в любом случае и чистое, и смешанное состояние можно выразить в ее терминах. Поэтому в эволюции матрицы плотности одни могут легко переходить в другие.

Для одной и той же матрицы плотности существует несколько представлений ее в виде ансамбля векторов состояния с определенными вероятностями, что вызывает трудности в физической интерпретации, т.к., получив матрицу плотности, мы не сможем точно сказать, ансамбль каких именно состояний она описывает.

Матрица плотности обладает следующими свойствами:
0. Среднее значение оператора F равно $\mathrm{Tr}(F\rho)$. Это аналог величины $\langle\psi| F |\psi\rangle$ для чистого состояния.
1. $\rho = \rho^\dagger$, т.к. $\mathrm{Tr}(F\rho) \in \mathbb{R}$ для любой физической величины F.
2. $\mathrm{Tr}(\rho) = 1$, чтобы полная вероятность сохранялась (означает, что не происходит каких-либо распадов системы).
3. ρ - положительный оператор, т.к. должно существовать представление 1, в котором коэффициенты p_i имеют смысл вероятности ($p_i \geq 0$). (Определение положительного оператора будет дано позднее.)

Измерение - это некоторое взаимодействие рассматриваемой системы со средой. Так что далее мы будем изучать то, как может происходить это взаимодействие. Мы будем рассматривать эволюцию общей системы, подсистемами которой будут являться взаимодействующие системы.

Мы также исследуем, как самые необходимые условия ограничивают возможные эволюции системы. Тогда, например, имея на руках квантовую систему, мы будем знать, что ее предыдущие квантовые состояния -

не все возможные матрицы плотности, а только некоторое (небольшое) их множество (и, возможно, мы как-то сможем сузить это множество до одного элемента). Если же рассматривать в сторону положительного времени, то, если будет возможно для квантовых систем преобразовываться некоторым другим способом вместо общепринятого (унитарного, см. 3), то, возможно, удастся придумать эксперимент, на котором это можно будет заметить.

Вышеупомянутыми необходимыми условиями являются сохранение физического смысла матрицей плотности при симметриях (т.е сохранение эрмитовости и положительности), сохранение следа (чтобы нам не иметь дело с распадами), а также неубывание энтропии. Например, при произвольном физическом преобразовании квантово запутанной пары систем S и A, матрица плотности ρ_{S+A} должна сохранять физический смысл, а если рассматривается система со средой $S+E$, то, сводя эволюцию $S+E$ к эволюции системы S, взаимодействующей с E, мы предположим, что "редуцированная" матрица плотности ρ_S должна сохранять свои физические свойства. (ρ_S - сужение ρ_{S+E} на подсистему S.)

Помимо необходимого условия положительности преобразований ρ_S (положительность преобразования означает, что оно сохраняет положительность ρ_S) мы будем также рассматривать более сильное условие полной положительности преобразований, при которой предполагается, что система может связываться с произвольной инертной системой, и такая их совместная эволюция, при которой с инертной системой ничего не происходит, должна быть физической.

2 Редукция волнового пакета

Пусть есть некоторая наблюдаемая, у которой следующие собственные числа и вектора: $X\left|x_i\right\rangle = x_i\left|x_i\right\rangle$, тогда X можно записать в виде: $X = \sum_{i=1}^{n} x_i \left|x_i\right\rangle\left\langle x_i\right|$. Если $\left|\psi\right\rangle$ разложить в ряд по базису $\{\left|x_i\right\rangle\}$, то тогда вероятность того, что после измерения система будет в состоянии $\left|x_i\right\rangle$, равна $|\left\langle x_i|\psi\right\rangle|^2$. Поэтому после измерения матрица плотности становится следующего вида:

$$\sum_{i=1}^{n} |\left\langle x_i|\psi\right\rangle|^2 \left|x_i\right\rangle\left\langle x_i\right| = \sum_{i=1}^{n} \left|x_i\right\rangle\left\langle x_i\right|\left|\psi\right\rangle\left\langle\psi\right|\left|x_i\right\rangle\left\langle x_i\right| = \sum_{i=1}^{n} P_{x_i}\rho P_{x_i} \quad (4)$$

Видим, что чистое состояние перешло в смешанное.

3 Унитарная эволюция

Уравнение Шредингера эволюции чистого сотояния, описываемого волновым вектором, выглядит следующим образом (положим $\hbar = 1$):

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = -iH |\psi(t)\rangle \quad (5)$$

Тогда

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = \frac{\partial}{\partial t} \sum_{i=1}^{n} p_i |\psi_i(t)\rangle \langle\psi_i(t)| = -i[H, \rho(t)] \quad (6)$$

Это уравнение Лиувилля. Решение его представляется в виде

$$\rho(t) = U(t)\rho(0)U^\dagger(t) \quad (7)$$

где $U(t) = e^{-iHt}$. U - унитарный оператор, $UU^\dagger = U^\dagger U = I$.

При этом чистое состояние $\rho(0) = |\psi(0)\rangle \langle\psi(0)|$ переходит в чистое:

$$\rho(t) = (e^{-iHt} |\psi(0)\rangle \cdot (e^{-iHt} |\psi(0)\rangle)^\dagger \quad (8)$$

Такое преобразование обратимо. Обратное преобразование: $U^\dagger(t)\rho(t)U(t)$.

Введем оператор $\mathbb{L}_H[\rho] = -i[H, \rho]$. Тогда еще одна запись решения:

$$\rho(t) = \mathbb{U}_t[\rho(0)] = e^{t\mathbb{L}_H}[\rho(0)] \quad (9)$$

Но наверняка ли матрица плотности преобразуется именно унитарным образом?

4 Утверждения о вариантах преобразования матрицы плотности

Преобразование симметрии g произвольной матрицы плотности ρ: $g \mapsto g[\rho]$ - такое линейное преобразование, у которого выполнены следующие свойства: $g[\rho] = g[\rho]^\dagger$; $\mathrm{Tr}\, g[\rho] = 1$; $g[\rho]$-положительная матрица.
Каждому преобразованию g соответствует преобразование операторов в гильбертовом пространстве, имеющих смысл физических величин (возможно, только часть операторов): $A \mapsto g[A]$, такое что $g[A] = g[A]^\dagger$.
При этом $\mathrm{Tr}(g(A)g(\rho)) = \mathrm{Tr}(A\rho)$.

Будем считать, что физические величины - такие величины, к которым можно применить формулу нахождения среднего значения $\overline{A} = \mathrm{Tr}(A\rho)$.

Тогда выполнена следующая теорема:

Теорема 1. *Если все эрмитовы операторы, включая проекторы, являются физическими величинами, тогда матрицы плотности под действием обратимого преобразования симметрии g преобразуются унитарно:*
$g[\rho] = U\rho U^\dagger$, *$U$ - унитарный или антиунитарный оператор.*

4.1 Линейное преобразование симметрии

Пусть ρ преобразуется следующим образом:

$$g(\rho)_{M'N'} = \sum_{MN} K_{M'M,N'N}[g]\rho_{MN} \tag{10}$$

$K[g] \in \mathbb{C}$

Тогда свойства $g(\rho)^\dagger = g(\rho)$ и $\mathrm{Tr}(g(\rho)) = 1$ из произвольности ρ переносятся на ядро $K[g]$ (положительность $g(\rho)$ не написать в простом виде, будет обсуждаться позднее):

$$K_{M'M,N'N}[g]^* = K_{N'N,M'M}[g] \tag{11}$$

$$\sum_{M'} K_{M'M,M'N}[g] = \delta_{MN} \tag{12}$$

Из эрмитовости $K[g]$ (11) следует, что $K[g]$ можно разложить в следующий ряд:

$$K_{M'M,N'N}[g] = \sum_i \eta^{(i)}[g]u^{(i)}_{M'M}[g]u^{(i)*}_{N'N}[g] \tag{13}$$

где $\eta^{(i)}[g]$ и $u^{(i)}_{M'M}[g]$ - собственные числа и собственные матрицы $K[g]$:

$$\sum_{N'N} K_{M'M,N'N}[g]u^{(i)}_{N'N}[g] = \eta^{(i)}[g]u^{(i)}_{M'M}[g] \tag{14}$$

$$\mathrm{Tr}(u^{(i)\dagger)}[g]u^{(j)}[g]) = \delta_{ij} \tag{15}$$

Преобразование 10 теперь можно переписать в терминах $\eta^{(i)}[g]$ и $u^{(i)}[g]$:

$$g(\rho) = \sum_i \eta^{(i)}[g]u^{(i)}[g]\rho u^{(i)\dagger}[g] \tag{16}$$

Эрмитовость $g(\rho)$ повлекла за собой эрмитовость $K[g]$ и теперь заключается в том, что $\eta^{(i)}[g] \in \mathbb{R}$.
Свойство $\mathrm{Tr}(g(\rho)) = 1$ записывается следующим образом:

$$\sum_i \eta^{(i)}[g]u^{(i)\dagger}[g]u^{(i)}[g] = \mathbf{1} \tag{17}$$

Равенство 16 представляет собой обобщение унитарного преобразования ρ, а 17 - свойства эрмитовости матрицы преобразования U.

4.2 Преобразование симметрии ρ в окрестности тождественного преобразования

Тождественное преобразование матрицы плотности ρ: $K_{M'M,N'N}[\mathbf{I}] = \delta_{M'M}\delta_{N'N}$ имеет 2 собственных значения:
1. $\eta^{(1)}[\mathbf{I}] = d$, невырожденное
$u^{(1)}_{N'N}[\mathbf{I}] = \delta_{N'N}/\sqrt{d}$
2. $\eta^{(\alpha)}[\mathbf{I}] = 0$, (d^2-1) вырожденное
$\mathrm{Tr}\, u^{(\alpha)}_{N'N}[\mathbf{I}] = 0$
d - размерность пространства

Если рассматривать окрестность $\mathbf{I}$, то собственные значения и собственные вектора станут такими:
1. $\sqrt{\eta^{(1)}[g(\epsilon n)]}u^{(1)}[g(\epsilon n)] = 1 - i\epsilon n\tau + O(\epsilon^2)$
2. $\eta^{(\alpha)}[g(\epsilon n)] = \epsilon\Delta^{(\alpha)}(n), u^{(\alpha)}[g(\epsilon n)]$

τ - вектор матриц.

ϵ, n параметризуют элементы группы преобразования ρ в окрестности $\mathbf{I}$. $\epsilon \in \mathbb{R}$ задает норму, $n \in \mathbb{R}^k$ - направление в пространстве параметров. $\Delta^{(\alpha)}(n) \in \mathbb{R}$, т.к. $\eta^{(\alpha)}[g(\epsilon n)] \in \mathbb{R}$.

Условие $\mathrm{Tr}\, g(\rho) = 1$ запишется следующим образом:

$$-in\tau + in\tau^\dagger + \sum_\alpha \Delta^{(\alpha)}(n)u^{(\alpha)\dagger}(n)u^{(\alpha)}(n) = 0 \qquad (18)$$

И теперь изменение ρ в результате преобразования $g(\epsilon n)$ с точностью до первого порядка малости по ϵ равно:

$$i\epsilon[nT,\rho]+\epsilon\sum_\alpha \Delta^{(\alpha)}(n)[u^{(\alpha)}(n)\rho u^{(\alpha)\dagger}(n)-\frac{1}{2}u^{(\alpha)\dagger}(n)u^{(\alpha)}(n)\rho-\frac{1}{2}\rho u^{(\alpha)\dagger}(n)u^{(\alpha)}(n)] \qquad (19)$$

Здесь в первом слагаемом T - эрмитова часть τ ($\tau = -T - W$), второе слагаемое соответствует части ряда 16 с собственным числом $\eta^{(\alpha)}[g(\epsilon n)]$, третье и четвертое слагаемые соответствуют антиэрмитовой части τ, связанной с $\Delta^{(\alpha)}(n), u^{(\alpha)}(n)$ равенством 18.

Если все $\Delta^{(\alpha)}(n) = 0$, то в равенстве 19 остается только первое слагаемое. При этом, если написать подробнее групповое свойство

$$\sum_{M'N'} K_{M''M',N''N'}[g]K_{M'M,N'N}[\bar{g}] = K_{M''M,N''N}[g\bar{g}] \qquad (20)$$

то видно, что в этом случае выполнены коммутационные соотношения $[T_s, T_t] = i\sum_r C^r_{st}T_t$ группы симметрии алгебры Ли.

4.3 Компактные группы

Рассмотрим компактную группу преобразований матрицы плотности. $K[g]$ в формуле 10 представляет собой конечномерное представление преобразования, а значит такая группа эквивалентна унитарной, т.е.

$$\sum_{M''N''} K_{MM'',NN''}[g] K^*_{M'M'',N'N''}[g] = \sum_{M''N''} K^*_{M''M',N''N'}[g] K_{M''M,N''N}[g] = \delta_{M'M}\delta_{N'N} \tag{21}$$

Если переписать это через $\eta^{(i)}[g]$, $u^{(i)}[g]$ в окрестности $\mathbf{I}$, то из этого равенства будет следовать, что $\tau_r = -T_r$, т.е. третье и четвертое слагаемые в 19 исчезают, но преобразование все еще имеет нестандартный вид, т.к. помимо первого слагаемого в 19 есть еще и второе.

5 Энтропия

Разложим ρ по базису из собственных векторов $\rho\,|r_i\rangle = r_i\,|r_i\rangle$, $\langle r_i|r_j\rangle = \delta_{ij}$:

$$\rho = \sum_{i=1}^{n} r_i\,|r_i\rangle\langle r_i| \tag{22}$$

Энтропия фон Неймана вычисляется по формуле

$$S(\rho) = -\operatorname{Tr}(\rho\log\rho) = -\sum_{i=1}^{n} r_i \log r_i \tag{23}$$

$S(\rho) = 0$ в случае чистого состояния, $\max S(\rho) = \log n$, когда $r_i = 1/n\ \forall i$.

Таким образом, т.к. унитарное преобразование переводит чистые состояния в чистые, энтропия при этом не возрастает. Если же чистое состояние переходит в смешанное, то энтропия возрастает.

6 Положительность

Определение 1. *Оператор X называется положительным, если $\langle\psi|X|\psi\rangle \geq 0\ \forall\,|\psi\rangle$.*

Утверждение 1. *Если X - эрмитов оператор, то положительность X равносильна неотрицательности его собственных чисел.*

Комментарий. Из собственных векторов эрмитового оператора можно составить базис. Тогда X можно представить в виде $X = \sum_{i,\alpha} x_i\,|\psi_{i,\alpha}\rangle\langle\psi_{i,\alpha}|$, где x_i - собственные числа, а $|\psi_{i,\alpha}\rangle$ - собственные вектора X, ортогональные друг другу. Если $x_i \geq 0\ \forall i$, тогда $\langle\phi|X|\phi\rangle \geq 0\ \forall\,|\phi\rangle$, аналогично, если $\langle\phi|X|\phi\rangle \geq 0\ \forall\,|\phi\rangle$, то если в качестве ϕ взять $|\psi_{i,\alpha}\rangle$ и использовать разложение X, то из этого неравенства будет следовать, что $x_i \geq 0$. □

Таким образом, матрица плотности ρ, имеющая хотя бы одно представление 1, обязана быть положительной. Действительно, если подставить разложение 1 для ρ в $\langle\phi|\rho|\phi\rangle$, то

$$\langle\phi|\rho|\phi\rangle = \sum_i p_i\,\langle\phi|\psi_i\rangle\langle\psi_i|\phi\rangle = \sum_i p_i|\,\langle\phi|\psi_i\rangle\,|^2 \geq 0\ \forall\,|\phi\rangle \tag{24}$$

Пусть матрица плотности и другие эрмитовы операторы принадлежат определенному пространству размерности $n \times n$: M_n.

Определение 1. *Линейное преобразование Λ называется положительным, если оно, действуя на произвольный положительный эрмитов оператор X из пространства M_n, сохраняет его положительность.*

Теорема 1. *Если непрерывное обратимое преобразование симметрии $g(\rho)$ является положительным, то это унитарное преобразование, т.е. $g(\rho) = U\rho U^\dagger$, U-унитарное или антиунитарное.*

Получается, либо все преобразования симметрии матриц плотности должны быть положительными (и тогда, если оно обратимо, невозможно иное преобразование, кроме эрмитового), либо они могут не быть положительными, тогда те эрмитовы матрицы, на которые эти преобразования подействовали не положительным образом - не входят в число матриц плотности (т.е. мы сужаем множество матриц плотности в этом случае).

Утверждение 1. *Преобразование $K[g]$ является положительным, если все его собственные числа $\eta^{(i)} \geq 0$ (см. 16). В таком случае преобразование можно записать в форме Крауса:*

$$g(\rho) = \sum_i A^{(i)}[g]\rho A^{(i)\dagger}[g] \tag{25}$$

$A^{(i)}[g] = \eta^{(i)}[g]^{1/2}u^{(i)}[g]$
при этом $\sum_i A^{(i)\dagger}[g]A^{(i)}[g] = 1$ (см. 17)

Теорема 1. *Если группа симметрии g (с представлением $K[g]$), дискретная или непрерывная, имеет только неотрицательные собственные числа $\eta^{(i)}$, то такая группа симметрии эквивалентна унитарной, т.е. $g(\rho) = U\rho U^\dagger$, U-унитарное или антиунитарное.*

Это легко можно увидеть для непрерывных преобразований в окрестности I. $\eta^{(\alpha)}[g(\epsilon n)] = \epsilon\Delta^{(\alpha)}(n)$, тогда, если это группа, т.е. предполагается существование обратных элементов, ϵ может быть как положительно, так и отрицательно, а $\eta^{(i)} \geq 0$, значит $\Delta^{(\alpha)}(n) = 0$, и преобразование 16 имеет унитарный вид.

Для того, чтобы преобразование могло иметь нестандартный (не унитарный) вид в случае неотрицательных собственных значений, можно рассматривать полугруппы, т.е. не предполагать существование обратных элементов. Например, в случае трансляций во времени это означает, что мы изучаем эволюцию матрицы плотности только в сторону будущего времени. (Это можно оправдать, например, тем, что мы не хотим ничего знать о том, что было с системой S до ее формирования, а после уже начинаем рассматривать ее эволюцию.)

Если так поступить и рассматривать только положительное время и предположить $\eta^{(i)} \geq 0 \; \forall i$ (что гарантирует положительность), то можно получить уравнение Линдблада. Раскладывая в (7) в ряд $U(t) = e^{-iHt}$ и сравнивая с выражением 19, получаем, что $nT = -H$, и выражение 19 становится уравнением Линдблада:

$$\frac{d\rho}{dt} = -i[H, \rho] + \sum_{\alpha}(L_\alpha \rho L_\alpha^\dagger - \frac{1}{2}L_\alpha^\dagger L_\alpha \rho - \frac{1}{2}\rho L_\alpha^\dagger L_\alpha) \tag{26}$$

7 Полная положительность

Если есть только система S, и она не спутана ни с какой другой квантовой системой, то ее эволюция во времени (под действием оператора симметрии Λ) должна быть такой, чтобы матрица плотности ρ_S оставалась эрмитовой, положительной, и ее след не менялся. Но если система S вдруг окажется спутанной с какой-то другой системой A, которая никак не меняется со временем, то тогда система $S + A$ будет описываться матрицей плотности ρ_{S+A}, и тогда уже именно эта матрица плотности должна будет оставаться положительной, эрмитовой и не менять след.

Определение 1. *Преобразование симметрии $\Lambda : M_n \mapsto M_n$, действующее на эрмитовы операторы из S, называется полностью положительным, если преобразование $\Lambda \otimes id_k : M_n \otimes M_k \mapsto M_n \otimes M_k$, действующее на эрмитовы операторы из $S + A$, - положительно для любой размерности $k \times k$ операторов в A.*

Под A можно подразумевать среду, в которой находится система S. Если система S и среда взаимодействуют слабо, то среда как раз почти не меняется, и перебор всех размерностей - попытка перечислить все возможные спутывания S с чем-то внешним. Также под A можно подразумевать просто спутывание S с какой-либо системой (например, удаленной), и тогда они вместе развиваются под действием $\Lambda \otimes id_A$. Вообще, необходимость рассматривать полную положительность вместо обычной положительности вызывает споры. Полная положительность - более сильное свойство, чем положительность, т.к. положительность $\Lambda \otimes id_1$ равносильна положительности Λ.

Теорема 1. *Полная положительность линейного преобразования $\Lambda : M_n \mapsto M_n$ равносильна положительности $\Lambda \otimes id_n : M_n \otimes M_n \mapsto M_n \otimes M_n$.*

Т.е. для того, чтобы понять, что Λ - полностью положительное, достаточно проверить только одну размерность из всех - n.

Теорема 1. *Полная положительность линейного преобразования $\Lambda : M_n \mapsto M_n$ равносильна тому, что преобразование принимает форму Крауса (25):*

$$\Lambda[X] = \sum_{\alpha} \nu_\alpha^\dagger X \nu_\alpha \tag{27}$$

и $\sum_\alpha \nu_\alpha^\dagger \nu_\alpha$ сходится.

Пусть преобразование Λ представляется в виде $\Lambda[X] = \sum_\alpha C_{\alpha\beta} W_\alpha^\dagger X W_\beta$. Т.к. $\Lambda[X]$ должно эрмитовы операторы переводить в эрмитовы, то $C_{\alpha\beta}$ - эрмитова матрица. Тогда ее можно диагонализовать с помощью унитарной матрицы U, и тогда $C_{\alpha\beta} = \sum_j d_j U_{j\alpha}^* U_{j\beta}$. Если $C_{\alpha\beta}$ - положительно определенная, то $d_j \geq 0$. И тогда, обозначив за $\nu_j = \sum_\alpha \sqrt{d_j} U_{j\beta} W_\beta$, получаем форму Крауса 27. Если же $C_{\alpha,\beta}$ - не положительно определенная, то у нее существуют некоторые отрицательные собственные числа. Тогда аналогично получаем, что $\Lambda = \Lambda_1 - \Lambda_2$, при этом $\Lambda_{1,2}$-в форме Крауса. Так что в таком случае, по всей видимости, Λ не получится представить в форме Крауса, и Λ не будет являться полностью положительным. Получается, Λ в виде $\Lambda[X] = \sum_\alpha C_{\alpha\beta} W_\alpha^\dagger X W_\beta$ - полностью положительна тогда и только тогда, когда $C_{\alpha,\beta}$ - положительно определенная.

Аналогичное рассуждение можно применить к разложению 16. По всей видимости, $\eta^{(i)} \geq 0\ \forall i$ равносильно тому, что разложение можно представить в форме Крауса, и тогда для разложения 16 полная положительность g равносильна тому, что все $\eta^{(i)} \geq 0$.

Пример. Рассмотрим операцию транспонирования матрицы. Например, $\mathbb{T}_2$: $\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \mapsto \begin{bmatrix} a & c \\ b & d \end{bmatrix}$ Положительность эрмитовой матрицы равносильна тому, что все ее собственные числа неотрицательны. Транспонирование не меняет собственные числа. Поэтому неотрицательные собственные числа останутся теми же, а значит положительная матрица перейдет в положительную.

Теперь покажем, что транспонирование не является полностью положительным. Воспользуемся теоремой и проверим только преобразование $\mathbb{T}_n \otimes id_n$. Предъявим такую матрицу, которая переходит в не положительную матрицу:

$$P_+^{(n)} = |\psi_+^{(n)}\rangle \langle\psi_+^{(n)}| \tag{28}$$

$$|\psi_+^{(n)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{j=1}^{n} |j\rangle \otimes |j\rangle \tag{29}$$

$$P_+^{(n)} = \frac{1}{n} \sum_{j,k=1}^{n} |j\rangle \langle k| \otimes |j\rangle \langle k| \tag{30}$$

$$\mathbb{T}_n \otimes id_n[P_+^{(n)}] = \frac{1}{n} \sum_{j,k=1}^{n} |k\rangle \langle j| \otimes |j\rangle \langle k| \tag{31}$$

Правая часть последнего равенства, умноженная на n, - оператор перестановки V: $V(|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle) = |\phi\rangle \otimes |\psi\rangle$. Поэтому оператор из равенства 31 имеет собственное значение -1 с собственным вектором

$\frac{1}{\sqrt{2(1-|\langle\phi|\psi\rangle|^2)}}(|\phi\rangle\otimes|\psi\rangle-|\psi\rangle\otimes|\phi\rangle)$. А значит $\mathbb{T}_n\otimes id_n$ - не положительно, $\mathbb{T}_n$ - не полностью положительно.

Так как транспонирование связано с отражением времени, то из отсутствия полной положительности в некотором смысле вытекает, что отражение времени нельзя применять только к подсистемам, а если применять, то к системе в целом. (Действительно, если предполагать, что все системы вида $S+Y$, где Y произвольной целой размерности, физически должны существовать. И тогда после применения транспонирования к S не может так получиться, что все будет в порядке со всеми системами вида $S+Y$.) $\square$

Примечание. Рассмотрим пространство эрмитовых матриц и состояний M_2. Это матрицы 2×2, их можно разложить по базису из единичной матрицы σ_0 и трех матриц Паули σ_i:

$$X=\sum_{\mu=0}^{3}X_\mu\sigma_\mu \tag{32}$$

Так как $\sigma_i\sigma_j=i\epsilon_{ijk}\sigma_k+\delta_{ij}\sigma_0$, то $X_\mu=\frac{1}{2}\operatorname{Tr}(X\sigma_\mu)$.

Рассмотрим преобразование

$$\mathbb{Z}[X]=\frac{1}{2}(\sigma_0X\sigma_0+\sigma_1X\sigma_1-\sigma_2X\sigma_2+\sigma_3X\sigma_3) \tag{33}$$

Подставив в это выражение разложение 32 и воспользовавшись свойствами матриц Паули, можно получить, что

$$\mathbb{Z}[X]=X_0\sigma_0+X_1\sigma_1-X_2\sigma_2+X_3\sigma_3 \tag{34}$$

Если подействать на разложение 32 операцией транспонирования, то видно, что только σ_2 изменит знак, и получается, что 33 - еще одна форма записи операции транспонирования. $\square$

Примечание. Для разложения $\Lambda[X]=\sum_\alpha C_{\alpha\beta}W_\alpha^\dagger XW_\beta$ ранее мы показывали, что полная положительность $\Lambda[X]$ равносильна тому, что матрица $C_{\alpha\beta}$ - положительно определенная. Теперь в случае M_2 можно матрицы W_α разложить по матрицам Паули, и тогда $\Lambda[X]$ перепишется в виде $\Lambda[X]=\sum_\alpha\widetilde{C}_{\alpha\beta}\sigma_\alpha X\sigma_\beta$. И полная положительность $\Lambda[X]$ будет равносильна положительной определенности $\widetilde{C}_{\alpha\beta}$. $\square$

С помощью $P_+^{(n)}$ 28 нам удалось показать, что транспонирование - не полностью положительно, т.е. $P_+^{(n)}$ было примером такого состояния, которое $\mathbb{T}_n\otimes id_n$ переводит в нефизическое состояние, не положительное. Тогда нам пришлось рассмотреть антисимметричное состояние $\frac{1}{\sqrt{2(1-|\langle\phi|\psi\rangle|^2)}}(|\phi\rangle\otimes|\psi\rangle-|\psi\rangle\otimes|\phi\rangle)$, чтобы увидеть, что оно является собственным вектором с отрицательным собственным числом.

Теорема 1. *Положительность* $\Lambda : M_n \mapsto M_n$ *равносильна условию*

$$\langle \psi \otimes \phi | \Lambda \otimes id_n [P_+^{(n)}] | \psi \otimes \phi \rangle \geq 0 \ \forall \psi, \phi \tag{35}$$

Полная положительность $\Lambda : M_n \mapsto M_n$ *равносильна условию*

$$\langle \Psi | \Lambda \otimes id_n [P_+^{(n)}] | \Psi \rangle \geq 0 \ \forall \Psi \tag{36}$$

$|\Psi\rangle$ включает в себя все вектора вида $|\psi \otimes \phi\rangle$, а также все их линейные комбинации.

Т.е. если бы, рассматривая транспонирование, мы перебирали бы все факторизованные состояния, то не нашли бы ни одного, которое было бы собственным вектором $\Lambda \otimes id_n [P_+^{(n)}]$ с отрицательным собственным числом. Перебирая далее уже не факторизованные состояния, мы бы увидели, что какое-то из них нарушит неравенство из 36, т.к. транспонирование не полностью положительно. (Это может случиться для собственного вектора $\Lambda \otimes id_n [P_+^{(n)}]$, а может и для какого-то другого.)

8 Запутанность

Рассмотрим для начала чистые состояния, их представление в виде векторов состояния (а не матриц плотности).

Пусть есть два независимых гильбертовых пространства векторов состояния. Базисы в первом и втором пространствах соответственно $\{|\psi_i\rangle\}$ и $\{|\phi_j\rangle\}$. Вектор из первого пространства в общем случае имеет вид $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} a_i |\psi_i\rangle$, вектор из второго пространства $|\phi\rangle = \sum_{j=1}^{m} b_j |\phi_j\rangle$. Тогда можно построить вектор состояния, являющееся тензорным произведением вектора состояния из первого пространства и вектора состояния из второго пространства:

$$|\psi \otimes \phi\rangle = \sum_{\substack{i=1\ldots n \\ j=1\ldots m}} a_i b_j |\psi_i \otimes \phi_j\rangle \tag{37}$$

Это так называемое сепарабельное состояние. Вероятность того, что система 1 будет в состоянии $|\psi_i\rangle$, а система 2 в состоянии $|\phi_j\rangle$, равна $(a_i b_j)(a_i b_j)^* = (a_i a_i^*)(b_j b_j^*)$, т.е. сепарабельное состояние - такое состояние общей системы 1+2, при котором подсистемы 1 и 2 абсолютно независимы.

В пространстве $n \otimes m$ помимо состояний вышеописанного вида существуют и другие состояния, не представимые в таком виде. Это запутанные состояния. Самый общий вид состояния в пространстве $n \otimes m$: $|\Phi\rangle = \sum_{\substack{i=1\ldots n \\ j=1\ldots m}} \Phi_{ij} |\psi_i \otimes \phi_j\rangle$.

Теперь обобщим понятие сепарабельного состояния до матриц плотности (означает некоторое наслоение состояний, суперпозиция состояний с классическими вероятностями). Т.е. чистое состояние обобщим до смешанного.

$$|\psi \otimes \phi\rangle \Leftrightarrow |\psi\rangle \langle\psi| \otimes |\phi\rangle \langle\phi| \to \rho^1 \otimes \rho^2 \to \sum_{ij} \lambda_{ij} \rho_i^1 \otimes \rho_j^2 = \rho_{S_1+S_2} \tag{38}$$

Это общий вид сепарабельного состояния. λ_{ij} имеют смысл вероятностей, поэтому $\lambda_{ij} \geq 0$. Из $\mathrm{Tr}[\rho_{S_1+S_2}] = 1$ следует, что $\sum \lambda_{ij} = 1$.

Все те состояния, которые нельзя представить в таком виде, называются запутанными.

Теорема 1. *ρ_{S+S} - запутанное, если $\mathbb{T}_n \otimes id_n[\rho_{S+S}]$ - не положительная матрица.*

Теорема 1. *Если ρ_{S+S} - запутанное, то существует положительное линейное преобразование $\Lambda : M_n \mapsto M_n$ такое, что $\Lambda \otimes id_n[\rho_{S+S}]$ - не положительная матрица.*

Доказательство. Подействуем положительным $\Lambda \otimes id_n$ на сепарабельное состояние:

$$R \equiv \Lambda \otimes id_n[\sum_{ij} \lambda_{ij} \rho_i^1 \otimes \rho_j^2] = \sum_{ij} \lambda_{ij} \Lambda[\rho_i^1] \otimes \rho_j^2 \tag{39}$$

Т.к. $\forall |\Psi\rangle$ можно разложить по базису из факторизованных состояний $\{|\psi \otimes \phi\rangle\}$, то из положительности $\Lambda[\rho_i^1]$ и ρ_j^2 следует, что $\langle\Psi|R|\Psi\rangle \geq 0 \, \forall |\Psi\rangle$. Значит, если вдруг $\Lambda \otimes id_n[\rho_{S+S}]$ - не положительная матрица, то не могло быть так, что ρ_{S+S} - сепарабельное, значит оно запутанное. □

Т.е. транспонирование может обнаружить "плохое" (запутанное) состояние, но может и не обнаружить. Но если состояние "плохое", то в любом случае найдется Λ, которая раскроет то, что оно "плохое".

Но в случае систем размерности 2 и некотором случае разных размерностей (2 и 3) ситуация упрощается:

Теорема 1. *Если первая система (S_1) размерности 2, а вторая (S_2) размерности 2 или 3, то запутанность $\rho_{S_1+S_2}$ равносильна не положительности матрицы $\mathbb{T}_n \otimes id_n[\rho_{S_1+S_2}]$.*

Пример. Рассмотрим матрицу плотности вида

$$\rho_F = \alpha \mathbf{1}_n \otimes \mathbf{1}_n + \beta V \tag{40}$$

$$V = \sum_{j,k=1}^{n} |k\rangle \langle j| \otimes |j\rangle \langle k| \tag{41}$$

V - оператор перестановки (=(31)$\cdot n$), $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$. Узнаем, когда ρ_F выражает запутанное состояние.

Среднее значение V: $F \equiv \mathrm{Tr}(\rho_F V)$.

Если базис в пространстве векторов $n \times n$ ($|\Psi\rangle$) выбрать состоящим из факторизованных состояний, то тогда, т.к. $V(|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle) = |\phi\rangle \otimes |\psi\rangle$, то $V^2 |\Psi\rangle = |\Psi\rangle \ \forall |\Psi\rangle$.

Поэтому $F = \alpha \,\mathrm{Tr}(V) + \beta \,\mathrm{Tr}(\mathbf{1}_n \otimes \mathbf{1}_n) = \alpha n + \beta n^2$.

Найдем собственные значения V:

$$V \sum d_{kj} |k\rangle \otimes |j\rangle = \sum d_{kj} |j\rangle \otimes |k\rangle = c \sum d_{kj} |k\rangle \otimes |j\rangle \tag{42}$$

$$d_{kj} = c d_{jk} = c^2 d_{kj}, c = \pm 1 \tag{43}$$

Тогда собственные значения ρ_F: $\alpha \pm \beta \geq 0$ ($\Leftrightarrow -\alpha \leq \beta \leq \alpha$). Это условие положительности. Эрмитовость очевидна.
$\mathrm{Tr}(\rho_F) = \alpha n^2 + \beta n = 1$.

Из всех этих соотношений получим

$$\rho_F = \frac{n-F}{n(n^2-1)} \mathbf{1}_n \otimes \mathbf{1}_n + \frac{nF-1}{n(n^2-1)} V, \ -1 \leq F \leq 1 \tag{44}$$

Это состояния Вернера.

Попробуем воспользоваться теоремой и подействовать на ρ_F оператором $\mathbb{T}_n \otimes id_n$. Все те F, при которых полученная матрица окажется не положительной, будут свидетельствовать о соответствующем запутанном ρ_F.

Из равенств 31 и 41 видим, что $\mathbb{T}_n \otimes id_n[V] = nP_+^{(n)}$, поэтому

$$\mathbb{T}_n \otimes id_n[\rho_F] = \frac{n-F}{n(n^2-1)} \mathbf{1}_n \otimes \mathbf{1}_n + \frac{nF-1}{(n^2-1)} P_+^{(n)} \tag{45}$$

Так как $P_+^{(n)}$ - проектор, то его собственные значения 1 (невырожденное) и 0 (n^2-1 вырожденное), тогда у $\mathbb{T}_n \otimes id_n[\rho_F]$ собственные значения $\frac{F}{n}$ и $\frac{n-F}{n(n^2-1)}$. Второе положительно при любом F, первое же отрицательно при $F < 0$. Поэтому при $F < 0$ ρ_F - запутанное. По теореме при $F \geq 0$ про запутанность ρ_F мы ничего сказать не можем, но известно, что все-таки верно, что при $F \geq 0$ ρ_F - обязательно сепарабельное. Поэтому нахождение знака F - хороший индикатор запутанности состояний Вернера для любой размерности n. □

В случае двух систем, каждая размерности 2, помимо простого способа определения запутанности через $\mathbb{T}_2 \otimes id_2$ существует и другой способ:

Теорема 1. *Пусть S - система размерности 2. Рассмотрим систему $S+S$ с матрицей плотности ρ_{S+S}. Вычислим следующую матрицу:*

$$R \equiv \rho_{S+S}(\sigma_2 \otimes \sigma_2)\rho^*_{S+S}(\sigma_2 \otimes \sigma_2) \tag{46}$$

Ее собственные числа неотрицательны для любой ρ_{S+S}, за R_i обозначим корни из собственных чисел в порядке убывания.

Тогда запутанность ρ_{S+S} равносильна неравенству

$$C(\rho_{S+S}) \equiv \max\left(R_1 - R_2 - R_3 - R_4, 0\right) > 0 \tag{47}$$

Пример. Применим этот критерий к состояниям Вернера (размерности 2).

$$V = \sum_{j,k=1}^{2} |k\rangle\langle j| \otimes |j\rangle\langle k| = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{48}$$

Из 44 получим тогда

$$\rho_F = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} 1+F & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2-F & 2F-1 & 0 \\ 0 & 2F-1 & 2-F & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1+F \end{bmatrix}, -1 \le F \le 1 \tag{49}$$

Посчитав R (46), найдем R_i: $\frac{1+F}{6}$ (3) и $\frac{1-F}{2}$ (1). Тогда

$$F \ge \frac{1}{2} \Leftrightarrow \frac{1+F}{6} \ge \frac{1-F}{2} \Rightarrow C(\rho_{S+S}) = -\frac{1-F}{2} - \frac{1+F}{6} = \frac{F-2}{3} \tag{50}$$

$$F < \frac{1}{2} \Leftrightarrow \frac{1+F}{6} < \frac{1-F}{2} \Rightarrow C(\rho_{S+S}) = \frac{1-F}{2} - 3\frac{1+F}{6} = -F \tag{51}$$

Таким образом, по теореме ρ_F - запутана тогда и только тогда, когда $F < 0$. При $F \ge 0$ ρ_F - сепарабельная.

□

9 Эволюция системы S

Будем считать, что есть система S и среда E. Вместе они образуют закрытую систему, эволюционирующую унитарно (как описано в одной глав раньше) с гамильтонианом $H = H_S + H_E + \lambda H'$, где H_S и H_E - свободные гамильтонианы систем S и E, а H' - гамильтониан взаимодействия, λ - маленькое, что выражает слабое взаимодействие между S и E.

Пусть система $S+E$ описывается матрицей плотности ρ_{S+E}. Найдем "редуцированную" матрицу плотности системы S, ту, с помощью которой можно находить средние значения операторов $M \otimes id_E$, действующих исключительно только в системе S, а в E действующие тождественно. Среднее значение такого оператора равно $\mathrm{Tr}(\rho_{S+E}(M \otimes id_E)) = \mathrm{Tr}_{(S)}(\rho_S M)$, где $\rho_S = \mathrm{Tr}_E\, \rho_{S+E} = \sum_j \langle\psi_j^E|\rho_{S+E}|\psi_j^E\rangle$, $\{|\psi_j^E\rangle\}$ - ортонормированный базис в подпространстве E. Из свойств ρ_{S+E} следует, что полученная матрица плотности обладает всеми свойствами матрицы плотности.

Таким образом,

$$\rho_S(t) = \mathrm{Tr}_E(\rho_{S+E}(t)) = \mathrm{Tr}_E(\mathbb{U}_t^{S+E}[\rho_{S+E}(0)]) \equiv \mathbb{G}_t[\rho_S(0)] \tag{52}$$

Так как далее мы будем рассматривать свойства именно линейных преобразований на пространстве состояний $\rho_S(0)$, то заметим, что в 52, если предположить, что $\rho_{S+E}(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_E(0)$, то операция $\mathbb{G}_t[\rho_S(0)]$ будет линейной. $\mathbb{U}_t^{S+E} = e^{t\mathbb{L}_{S+E}}$, а $\mathbb{L}_{S+E}$ - операция коммутирования с гамильтонианом. Ясно, что коммутирование с H_S и H_E - линейно по $\rho_S(0)$. Если H' факторизуется, то видно, что есть линейность и по операции коммутирования с ним.

Так что далее будем предполагать начальное состояние $\rho_{S+E}(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_E(0)$, что означает отсутствие каких-либо корреляций в начальный момент времени. Но, тем не менее, системы S и E квантово запутаны и развиваются совместно.

Если разложить $\rho_E(0)$: $\rho_E(0) = \sum_k r_k^E \left|r_k^E\right\rangle \left\langle r_k^E\right|$
$(\rho_E(0) \left|r_k^E\right\rangle = r_k^E \left|r_k^E\right\rangle, r_k^E \geq 0)$, то

$$\rho_S(t) = \mathrm{Tr}_E(U_t^{S+E} \rho_S(0) \otimes \rho_E(0) U_{-t}^{S+E}) = \sum_{j,k} r_k^E \left\langle r_j^E \middle| U_t^{S+E} \middle| r_k^E \right\rangle \rho_S(0) \left\langle r_k^E \middle| U_{-t}^{S+E} \middle| r_j^E \right\rangle \tag{53}$$

Если обозначить $\nu_\alpha(t) \equiv \sqrt{r_k^E} \left\langle r_j^E \middle| U_t^{S+E} \middle| r_k^E \right\rangle$, то

$$\mathbb{G}_t[\rho_S(0)] = \rho_S(t) = \sum_\alpha \nu_\alpha(t) \rho_S(0) \nu_\alpha^\dagger(t) \tag{54}$$

α - индекс двойного суммирования.

Чтобы перейти от эволюции Шредингера к эволюции Гейзенберга, можно воспользоваться следующим равенством:

$$\mathrm{Tr}(\mathbb{U}_t[\rho] X) = \mathrm{Tr}(X \mathbb{U}_t^*[\rho]) \tag{55}$$

Тогда можно написать, как выглядит дуальное преобразование эрмитовых матриц:

$$\mathbb{G}_t^*[X(0)] = X(t) = \sum_\alpha \nu_\alpha^\dagger(t) X(0) \nu_\alpha(t) \tag{56}$$

Свойство $\mathbb{G}_t^*[\mathbf{1}_n] = \mathbf{1}_n$ называется унитальностью. Его можно иначе записать $\sum_\alpha \nu_\alpha^\dagger(t) \nu_\alpha(t) = \mathbf{1}_n$, и это то же самое, что $\mathrm{Tr}\, \rho_S(t) = 1$.

Из вида $\mathbb{G}_t, \mathbb{G}_t^*$ ясно, что такие эволюции являются полностью положительными. Механизм редукции волнового пакета, описанный выше, также имеет такой вид (Крауса), а значит является полностью положительным.

10 Другой подход к рассмотрению эволюции системы S

Мы уже нашли выражение для эволюции $\rho_S(t)$ (см. выражения 53 и 54). Но в них эволюция S как бы происходит вместе с E, и в общем случае $\mathbb{G}_t \circ \mathbb{G}_t \neq \mathbb{G}_{t+s}$. Мы же здесь хотим предположить $\gamma_t \circ \gamma_s = \gamma_{t+s}$ (обозначим решение за γ_t: $\gamma_t[\rho_S(0)] = \rho_S(t)$). Тогда это условие того, что преобразование во времени образует полугруппу (не группу, т.к. замыслим выполнение это равенства только в сторону положительного времени). Для этого предположим, что типичное время корреляции среды E гораздо меньше времени корреляции системы S. Т.е. среда меняется очень быстро, и тогда эволюция системы S происходит как бы независимо от E, развиваясь свободно, а ее E немного подправляет, и при этом все еще $\gamma_t \circ \gamma_s = \gamma_{t+s}$ (после добавления взаимодействия; для унитарного преобразования (свободной эволюции S) условие $\gamma_t \circ \gamma_s = \gamma_{t+s}$ выполнено, т.к. оно имеет вид $\rho(t) = e^{-iHt}\rho(0)e^{iHt}$).

Далее будем предполагать непрерывность решения γ_t по времени, тогда решение обязано представляться в виде $\gamma_t = e^{t\mathbb{L}}$, и генератор $\mathbb{L}$ обязан существовать.

Следующую теорему сформулируем в представлении Гейзенберга, но с помощью соотношения 55 всегда можно перейти обратно к Шредингеру.

Теорема 1. *Пусть* $\gamma_t^* : M_n \mapsto M_n, t \geq 0$ *- непрерывная во времени полугруппа унитальных* ($\gamma_t^*[\mathbf{1}_n] = \mathbf{1}_n$) *преобразований, переводящих эрмитовы матрицы в эрмитовы. Тогда* γ_t *имеет вид* $\gamma_t = e^{t(\mathbb{L}_H^* + \mathbb{D}^*)}$*, при этом*

$$\mathbb{L}_H^*[X] = i[H, X] \tag{57}$$

$$\mathbb{D}^*[X] = \sum_{i,j=1}^{n^2-1} C_{ij}(F_i X F_j^\dagger - \frac{1}{2}\{F_i F_j^\dagger, X\}) \tag{58}$$

C_{ij} *- матрица Коссаковски, эрмитова.* H *- эрмитов.* $F_{n^2} = \mathbf{1}_n/\sqrt{n}$, $\mathrm{Tr}(F_j^\dagger F_k) = \delta_{jk}$, $0 \leq j, k \leq n^2$.

$\mathbb{D}^*$ имеет смысл некоторой поправки, заключает в себе эффект диссипации, при которой система S отдает энергию в среду, и эффект шума, декогеренции, при котором чистые состояния S переходят в смешанные; какое бы ни было начальное состояние системы S, все они стремятся к некоторому усреднению, одному общему среднему состоянию, так что теряется информация о начальном состоянии; при этом, грубо говоря, система теряет свои квантовые свойства, остаются только классические вероятности.

Теперь на преобразование γ_t осталось только наложить условие положительности или полной положительности. В первом случае все не очень ясно, в во втором выполнена следующая теорема:

Теорема 1. *Полугруппа $\gamma_t, t \geq 0$ содержит полностью положительные преобразования тогда и только тогда, когда матрица C_{ij} - положительно определеннная.*

(Эта теорема выражает очевидную выгоду требовать вместо положительности полную положительность.)

Теперь с помощью 55 получаем дуальное преобразование, действующее на ρ:

$$\mathbb{L}[\rho] = -i[H, \rho] + \sum_{i,j=1}^{n^2-1} C_{ij}(F_j^\dagger \rho F_i - \frac{1}{2}\{F_i F_j^\dagger, \rho\}) \tag{59}$$

Второе слагаемое вместе с суммированием можно интерпретировать, как шум со стороны среды на систему S. Оно имеет вид Крауса, если преобразование полностью положительно. Похожий вид имеет операция редукции волнового пакета. Остальные же слагаемые вместе с суммированием выражают собой эволюцию распадающейся (диссипирующей) системы.

Если вспомнить главу 4.2, то там у линейного представления преобразования симметрии матриц плотности были специфические собственные числа и собственные вектора, так что последние не были из класса матриц плотности. И там было два типа собственных чисел в окрестности **I**: $\eta^{(1)}$ (одно) и $\eta^{(\alpha)}$ ((d^2-1) штук). И, получается, первое заключает в себе свойства распадающейся системы, вторые - шум от среды.

В случае компактных групп (4.3), получается, есть шум из среды, но нет распада системы.

В равенстве 18 можно увидеть, что с суммой с $\Delta^{(\alpha)}(n)$ (шум) связана именно антиэрмитова часть τ, а она означает диссипативные свойства системы, отделенные от ее свободной эволюции (так как вся свободная эволюция заключается в коммутаторе с T (эрмитовой части τ), позднее H).

Преобразование $\rho(t) = \gamma_t[\rho(0)] = e^{t(\mathbb{L}_H + \mathbb{D})}[\rho(0)]$ можно иначе переписать, как

$$\partial_t \rho(t) = (\mathbb{L}_H + \mathbb{D})[\rho(t)] \tag{60}$$

Пример. Рассмотрим систему S размерности 2. Здесь положительность проверить просто: нужно только найти собственные числа ρ.

$F_i, 1 \leq i \leq 3$ можно выбрать равными $\frac{\sigma_i}{\sqrt{2}}$, тогда

$$\mathbb{L}[\rho] = -i[H, \rho] + \sum_{i,j=1}^{n^2-1} C_{ij}(\sigma_j^\dagger \rho \sigma_i - \frac{1}{2}\{\sigma_i \sigma_j^\dagger, \rho\}) \tag{61}$$

с новыми C_{ij}.

Теперь ρ разложим в ряд по матрицам Паули, так определим векторное представление ρ:

$$\rho = \frac{1}{2}(\mathbf{1}_n + \vec{\rho}\,\vec{\sigma}) = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1+\rho_3 & \rho_1 - i\rho_2 \\ \rho_1 + i\rho_2 & 1-\rho_3 \end{bmatrix} \tag{62}$$

Нулевая компонента $\vec{\rho}$ - ρ_0 должна оставаться равной 1, т.к. $\operatorname{Tr}\rho = 1$.

Если найти у этой матрицы 62 собственные числа, то окажется, что положительность их равносильна $\det\rho = \frac{1}{4}(1 - \sum_{j=1}^{3}\rho_j^2) \geq 0$.

Для эрмитовости ρ необходимо $\rho_i \in \mathbb{R}$.

То, что состояние является чистым (ρ - проектор) равносильно тому, что $\rho^2 = \rho$. Поэтому посчитаем ρ^2:

$$\rho^2 = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} \frac{1}{2}(1 + (\rho_1^2+\rho_2^2+\rho_3^2)) + \rho_3 & \rho_1 - i\rho_2 \\ \rho_1 + i\rho_2 & \frac{1}{2}(1 + (\rho_1^2+\rho_2^2+\rho_3^2)) - \rho_3 \end{bmatrix} \tag{63}$$

И тогда $\rho^2 = \rho \Leftrightarrow \sum_{j=1}^{3}\rho_j^2 = 1$. В этом случае $\det\rho = 0$.

Уравнение 60 равносильно уравнению

$$\partial_t \left|\rho_t\right\rangle = -2(\mathcal{H} + \mathcal{D})\left|\rho_t\right\rangle \tag{64}$$

здесь принято обозначение $\left|\rho_t\right\rangle = (1, \rho_1, \rho_2, \rho_3)$.

Если принять $H = \omega_\mu \sigma_\mu$, подставить разложение ρ через $\vec{\rho}$ (62) в 60 и сравнить с 64, то найдем

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \omega_3 & -\omega_2 \\ 0 & -\omega_3 & 0 & \omega_1 \\ 0 & \omega_2 & -\omega_1 & 0 \end{bmatrix} \tag{65}$$

Так что теперь можем принять $\omega_0 = 0$, от этого ничего не изменится.

Найдем теперь вид матрицы $\mathcal{D}$:

$$\mathcal{D} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ u & a & b & c \\ v & b & \alpha & \beta \\ w & c & \beta & \gamma \end{bmatrix} \tag{66}$$

Первая строчка состоит из нулей, т.к. ρ_0 должно оставаться равным 1 для любого $\left|\rho_t\right\rangle$. Антисимметричную часть нижней матрицы 3×3 мы перекинули в $\mathcal{H}$ (как некоторую поправку).

Найдем условие сохранения положительности ρ.

$$\frac{d\det[\rho(t)]}{dt} = -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{3}\dot{\rho}_j\rho_j = \sum_{j=1}^{3}\sum_{\mu=0}^{3}\rho_j(\mathcal{H}_{j\mu} + \mathcal{D}_{j\mu})\rho_\mu = \sum_{j=1}^{3}\sum_{\mu=0}^{3}\rho_j\mathcal{D}_{j\mu}\rho_\mu = \tag{67}$$

$$= \sum_{i,j=1}^{3} \mathcal{D}_{ij}\rho_i\rho_j + \sum_{j=1}^{3} \mathcal{D}_{j0}\rho_j \geq 0 \tag{68}$$

Теперь предположим неубывание энтропии. Тогда, например, состояние $\mathbf{1}_2$, имеющее максимальную энтропию $\log 2$, не должно меняться со временем. Ему соответствует вектор $\vec{\rho} = (1, 0, 0, 0)$, и тогда $u = v = w = 0$, т.е. $\mathcal{D}_{j0} = 0$, а значит условие сохранения положительности матрицы ρ:

$$\sum_{i,j=1}^{3} \mathcal{D}_{ij}\rho_i\rho_j \geq 0 \tag{69}$$

Отсюда следует, что

$$\mathcal{D}^{(3)} = \begin{bmatrix} a & b & c \\ b & \alpha & \beta \\ c & \beta & \gamma \end{bmatrix} \tag{70}$$

- положительно определенная.

Сравнив аналогичным образом (как в случае с $\mathbb{L}_H$ и $\mathcal{H}$) выражения для $\mathbb{D}$ (из 61) и $\mathcal{D}$ (66, где по предположению о неубывании энтропии $u = v = w = 0$), получим

$$\mathcal{D} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & C_{22} + C_{33} & -C_{12} & -C_{13} \\ 0 & -C_{12} & C_{11} + C_{33} & -C_{23} \\ 0 & -C_{13} & -C_{23} & C_{11} + C_{22} \end{bmatrix} \tag{71}$$

И теперь можно найти условия на $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$, при которых C_{ij} - положительно определенная, и это будут условия полной положительности преобразования $\rho(t)$. □

11 Переход от унитарной эволюции $S + E$ к эволюции системы S

Здесь сведем унитарную эволюцию $S+E$ к той эволюции системы S, что мы рассматривали в предыдущей главе.

Унитарная эволюция $S + E$:

$$\partial_t \rho_{S+E}(t) = \mathbb{L}_{S+E}[\rho_{S+E}(t)] \tag{72}$$

$\mathbb{L}_{S+E}[\rho] = -i[H, \rho]$, $H = H_S + H_E + \lambda H'$, $\mathbb{L}_{S+E} = \mathbb{L}_S + \mathbb{L}_E + \lambda \mathbb{L}'$.

Определим проекции P и Q:

$$P[\rho_{S+E}(t)] = \mathrm{Tr}_E(\rho_{S+E}(t)) \otimes \rho_E \equiv \rho_S(t) \otimes \rho_E, \; Q \equiv \mathbf{1}_{S+E} - P \tag{73}$$

где ρ_E - некоторое фиксированное состояние среды E.

Теперь из уравнения 72 получим два уравнения:

$$\partial_t P[\rho_{S+E}(t)] = P \circ \mathbb{L}_{S+E} \circ P[\rho_{S+E}(t)] + P \circ \mathbb{L}_{S+E} \circ Q[\rho_{S+E}(t)] \tag{74}$$

$$\partial_t Q[\rho_{S+E}(t)] = Q \circ \mathbb{L}_{S+E} \circ P[\rho_{S+E}(t)] + Q \circ \mathbb{L}_{S+E} \circ Q[\rho_{S+E}(t)] \tag{75}$$

Найдем $Q[\rho_{S+E}(t)]$ из второго уравнения:

$$Q[\rho_{S+E}(t)] = e^{tQ\circ\mathbb{L}_{S+E}\circ Q}[Q[\rho_{S+E}(0)]] + \int_0^t ds\; e^{(t-s)Q\circ\mathbb{L}_{S+E}\circ Q}\circ Q\circ\mathbb{L}_{S+E} P[\rho_{S+E}(s)] \tag{76}$$

Затем предположим, что $\rho_{S+E}(0)$ факторизуется: $\rho_{S+E}(0) = \rho_S(0) \otimes \rho_E(0)$, так что $Q[\rho_{S+E}(0)] = 0$, и после этого подставим решение $Q[\rho_{S+E}(t)]$ в первое уравнение:

$$\partial_t \rho_S(t) \otimes \rho_E = P \circ \mathbb{L}_{S+E}[\rho_S(t) \otimes \rho_E] + \tag{77}$$

$$+ \int_0^t ds\; P \circ \mathbb{L}_{S+E} \circ Q \circ e^{(t-s)Q\circ\mathbb{L}_{S+E}\circ Q} \circ Q \circ \mathbb{L}_{S+E}[\rho_S(s) \otimes \rho_E] \tag{78}$$

ρ_E - некоторое фиксированное состояние среды, пусть оно не развивается с помощью свободного гамильтониана:

$$\mathbb{L}_E[\rho_E] = -i[H_E, \rho_E] = 0 \tag{79}$$

И пусть гамильтониан взаимодействия факторизуется:

$$\widetilde{H}' = V_\alpha \otimes \widetilde{B}_\alpha \tag{80}$$

V_α действует в пространстве S, $\widetilde{B}_\alpha$ - в пространстве E. Но теперь введем новую B_α: $B_\alpha = \widetilde{B}_\alpha - \mathrm{Tr}(\widetilde{B}_\alpha \rho_E)\mathbf{1}_E$, так что

$$\mathrm{Tr}(B_\alpha \rho_E) = 0 \tag{81}$$

B_α оставим в H', а $\mathrm{Tr}(\widetilde{B}_\alpha \rho_E)\mathbf{1}_E$ перекинем в H_S в качестве поправки:

$$H_S^\lambda = H_S + \lambda \sum_\alpha V_\alpha \,\mathrm{Tr}(\widetilde{B}_\alpha \rho_E) \tag{82}$$

$$H' = \sum_\alpha V_\alpha \otimes B_\alpha \tag{83}$$

Упрощая далее уравнение 77 (подставив $\mathbb{L}_{S+E} = \mathbb{L}_S + \mathbb{L}_E + \lambda\mathbb{L}'$) и применяя к нему Tr_E, получим

$$\partial_t \rho_S(t) = \mathbb{L}_S^\lambda[\rho_S(t)] + \lambda^2 \int_0^t ds\;\; \mathrm{Tr}_E(\mathbb{L}' \circ e^{(t-s)Q\circ\mathbb{L}_{S+E}\circ Q} \circ \mathbb{L}'[\rho_S(s) \otimes \rho_E]) \tag{84}$$

Пример. Рассмотрим H_{S+E} вида

$$H = \frac{\Omega}{2}\sigma_3 \otimes \mathbf{1}_E + \mathbf{1}_S \otimes \sum_k \omega_k a_k^\dagger a_k + \sigma_3 \otimes \sum_k (\lambda_k a_k^\dagger + \overline{\lambda}_k a_k) \tag{85}$$

Собственные значения $\frac{\Omega}{2}\sigma_3$: $\pm\frac{\Omega}{2}$, так что Ω - расстояние между уровнями энергии. В качестве H_E берется набор квантовых осцилляторов. Для $a_k, a_k^\dagger$ выполнены коммутационные соотношения: $[a_k^\dagger, a_l] = \delta_{kl}$, $[a_k^\dagger, a_l^\dagger] = [a_k, a_l] = 0$.

Перейдем в представление взаимодействия, тогда

$$H_I'(t) = e^{i(\frac{\Omega}{2}\sigma_3 \otimes \mathbf{1}_E + \mathbf{1}_S \otimes \sum_l \omega_l a_l^\dagger a_l)t} \sigma_3 \otimes \sum_k (\lambda_k a_k^\dagger + \overline{\lambda}_k a_k) e^{-i(\frac{\Omega}{2}\sigma_3 \otimes \mathbf{1}_E + \mathbf{1}_S \otimes \sum_m \omega_m a_m^\dagger a_m)t} \tag{86}$$

$e^{i\frac{\Omega}{2}\sigma_3 \otimes \mathbf{1}_E}$ сокращается с $e^{-i\frac{\Omega}{2}\sigma_3 \otimes \mathbf{1}_E}$, так как H выбран так, что S-часть свободного гамильтониана коммутирует с S-частью гамильтониана взаимодействия.

В итоге

$$H_I'(t) = \sum_k (\lambda_k e^{i\omega_k t}\sigma_3 \otimes a_k^\dagger + \overline{\lambda}_k e^{-i\omega_k t}\sigma_3 \otimes a_k) \tag{87}$$

Если найдем теперь оператор эволюции:

$$U_I(t_0, t) = \mathcal{T} e^{-i\int_{t_0}^t d\tau H_I'(t)} \tag{88}$$

а затем рассмотрим факторизованное начальное состояние: $\rho_{S+E}(t_0) = \rho_S(t_0) \otimes \rho_E$, $\rho_E = \frac{e^{-\beta H_E}}{\operatorname{Tr} e^{-\beta H_E}}$ $(\beta = \frac{1}{T})$, то получим

$$\rho(t) = \operatorname{Tr}_E(U_I(t_0, t)\rho(t_0) \otimes \rho_E U_I^\dagger(t_0, t)) \tag{89}$$

в представлении взаимодействия.

Если теперь запишем эту матрицу в базисе $\{|0\rangle, |1\rangle\}$: $\sigma_3 |0\rangle = -|0\rangle$, $\sigma_3 |1\rangle = |1\rangle$, то $\rho_{ij}(t) = \langle i|\rho(t)|j\rangle$ будет

$$\rho(t) = \begin{bmatrix} \rho_{00}(t_0) & e^{-\Gamma(t_0,t)}\rho_{01}(t_0) \\ e^{-\Gamma(t_0,t)}\rho_{10}(t_0) & \rho_{11}(t_0) \end{bmatrix} \tag{90}$$

$$\Gamma(t_0, t) = 4\sum_k \frac{|\lambda_k|^2}{\omega_k^2}(1 - \cos\omega_k(t - t_0)) \coth\frac{\beta\omega_k}{2} \tag{91}$$

Получилось, что диагональные элементы не меняются со временем. Это связано с таким выбором H', при котором его S-часть коммутирует с S-частью свободного гамильтониана.

Пусть начальное состояние было чистым, т.е. если разложить его по матрицам Паули (см. 62), то для коэффициентов ρ_i было выполнено:

$\rho_1^2+\rho_2^2+\rho_3^2=1$. Теперь же, когда недиагональные элементы умножились на $e^{-\Gamma}$:

$$\rho_1 \mapsto e^{-\Gamma}\rho_1;\ \rho_2 \mapsto e^{-\Gamma}\rho_2;\ \rho_3 \mapsto \rho_3 \tag{92}$$

При $\Gamma > 0$ это смешанное состояние. Т.к. не получится, чтобы сразу для всех k было $\cos\omega_k(t-t_0)=1$, то состояние в любой момент будет смешанным. Но точно ли Γ с таким осциллирующим слагаемым обеспечит неубывание энтропии?

Для проверки этого посчитаем собственные числа матрицы 90, $\rho(0)$ зависит от ρ_1, ρ_2, ρ_3 (см. 62):

$$\lambda = \frac{1}{2}(1 \pm \sqrt{\rho_3^2 + e^{-2\Gamma}(\rho_1^2+\rho_2^2)}) \tag{93}$$

Обозначим $R \equiv \sqrt{\rho_3^2 + e^{-2\Gamma}(\rho_1^2+\rho_2^2)}$. Теперь найдем энтропию:

$$S(\rho(t)) = -\frac{1}{2}(1-R)\log\frac{1}{2}(1-R) - \frac{1}{2}(1+R)\log\frac{1}{2}(1+R) \tag{94}$$

$$\partial_t S(\rho(t)) = (\rho_1^2+\rho_2^2)e^{-2\Gamma}\Gamma'\frac{1}{2R}(\log\frac{2}{1-R} - \log\frac{2}{1+R}) \tag{95}$$

Т.к. для положительности ρ: $0 \le R^2 \le 1$ (см. 92 и 62), то и $0 \le R \le 1$, и последняя скобка в уравнении 95 неотрицательна. И значит для неубывания энтропии должно быть $\Gamma' \ge 0$,

$$\Gamma'(t_0,t) = 4\sum_k \frac{|\lambda_k|^2}{\omega_k^2}(1+\omega_k\sin\omega_k(t-t_0))\coth\frac{\beta\omega_k}{2} \ge 0 \tag{96}$$

Например, если все $\omega_k \le 1$, это автоматически выполнено для любого t.

Вернемся опять к рассмотрению $\Gamma(t_0,t)$, 91. Заменим дискретные ω_k на непрерывный ω ("термодинамический предел"), примем $\lambda(\omega) \sim \sqrt{\omega}$, $\sum_k \mapsto \frac{1}{2\pi}\int_0^\infty d\omega$:

$$\Gamma(t_0,t) = \frac{2\lambda^2}{\pi}\int_0^\infty d\omega\frac{1-\cos\omega(t-t_0)}{\omega}\coth\frac{\beta\omega}{2}e^{-\epsilon\omega} \equiv \Gamma(t-t_0) \tag{97}$$

Здесь вставлена $e^{-\epsilon\omega}$, что определяет $\frac{1}{\epsilon}$ - характерный масштаб обрезания частот (ϵ - мала).

Теперь можно разделить $\Gamma(t)$ на два слагаемых, первое

$$\Gamma_0(t) \equiv \frac{2\lambda^2}{\pi}\int_0^\infty d\omega\frac{1-\cos\omega(t-t_0)}{\omega}(\coth\frac{\beta\omega}{2}-1)e^{-\epsilon\omega} = \frac{\lambda^2}{\pi}\ln(1+\frac{t}{\epsilon}) \tag{98}$$

не зависящее от β (T), - вакуумное слагаемое, и второе $\Gamma_\beta(t) = \Gamma(t) - \Gamma_0(t)$, зависящее от β (T). □

Рассмотрим поведение $\Gamma(t)$ (97) на разных временных масштабах:
при $t \ll \epsilon$: $\Gamma(t) \sim \frac{\lambda^2}{\pi}(\frac{t}{\epsilon})^2$. Здесь $e^{-\Gamma}$ еще очень близко к 1.
при $\epsilon < t < \beta$: $\Gamma(t) \sim \frac{2\lambda^2}{\pi} \ln \frac{t}{\epsilon}$, что означает, что по большей части влияет вакуумное слагаемое.
при $t \gg \beta$: $\Gamma(t) \sim \frac{2\lambda^2}{\beta} t$, это тот режим, который мы предполагали для того, чтобы было выполнено $\gamma_t \circ \gamma_s = \gamma_{t+s}$. В этом случае характерное время распада корреляций в среде $\beta = \frac{1}{T}$ ("быстрое изменение среды") гораздо меньше времени распада корреляций в системе (S) t. Он называется режимом Маркова.

12 Заключение

Далее приближение $t \gg \beta$ можно применить к уравнению 84 и затем вспомнить теоремы главы 10, использующие $\gamma_t \circ \gamma_s = \gamma_{t+s}$.

Также интересно рассматривать разные H_{S+E} и затем изучать уравнение эволюции ρ_S (84). Можно обсуждать систему нескольких систем S в среде E, каким-либо образом взаимодействующих друг с другом.

Например, это могут быть невзаимодействующие сейчас Вселенные в модели Мультивселенной. Или просто атомы, квантово изолированные, слабо взаимодействующие со средой. Эту теорию также можно применить к криптографии и квантовой информации, т.к. много проблем там связано с потерей когеренции, квантовых свойств, используемыми квантовыми системами. Можно пытаться понять, например, каково было исходное квантовое состояние системы, если ее состояние уже в значительной степени потеряло когерентность из-за взаимодействия со средой.

Если мы будем хорошо понимать, как устроены взаимодействующие со средой квантовые системы, то мы будем понимать гораздо больше о связи квантового мира и классического, ведь в процессе измерения классический мир врывается в квантовый, при взаимодействии со средой система теряет свои квантовые свойства и приобретает классические.

Список литературы

[1] Киселёв В.В. "Квантовая механика. Курс лекций", Изд. МЦНМО, 2009

[2] M. L. Bellac, A Short Introduction to Quantum Information and Quantum Computation, Casmbridge U.Press, 2006.

[3] S. Weinberg, Quantum Mechanics Without State Vectors, Phys. Rev. A **90**, no. 4, 042102 (2014) doi:10.1103/PhysRevA.90.042102

[4] F. Benatti and R. Floreanini, Open quantum dynamics: complete positivity and entanglement, Int. J. Mod. Phys. B **19**, 3063 (2005) doi:10.1142/S0217979205032097