Лекція 1: Постулати квантової механіки

Нотація Дірака

H - гільбертів простір над $\mathbb{C}$, $\dim H = n < \infty$.

$|u\rangle \in H-$ "ket" вектор, $\langle u| \in H^*-$ відповідний "bra" вектор.

Якщо у H зафіксований базис, то можна записати

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix}, \langle u| = \begin{pmatrix} \overline{u_1} & \overline{u_2} & \cdots & \overline{u_n} \end{pmatrix},$$

де $u_i \in \mathbb{C}$. Тобто $\langle u| = (|u\rangle)^\dagger = (|u\rangle)^*$.

Зазвичай в H виділяють "стандартний" базис який позначають $|0\rangle, |1\rangle, \ldots, |n-1\rangle$, тобто

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \ldots, |n-1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$$

Наприклад, в цій нотації:

$\langle u|v\rangle = \langle u| \cdot |v\rangle-$ скалярний добуток (лінійний по другому аргументу).

$|u\rangle\langle u|-$ ортопроектор на $|u\rangle$, якщо $|u\rangle$ одиничний.

$\langle i|A|j\rangle = a_{ij}-$ елемент матриці A на місці (i, j).

$|i\rangle\langle j| = E_{ij}-$ матрична одиниця. $\forall A: \ A = a_{ij}|i\rangle\langle j|$.

$|u\rangle|v\rangle = |u\rangle \otimes |v\rangle-$ тензорний добуток.

$|011\rangle = |0\rangle|1\rangle|1\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle \otimes |1\rangle$.

Постулат 1: Простір станів системи

Постулат 1

Ізольованій квантовій фізичній системі відповідає комплексний гільбертів простір. Стан системи повністю визначається одиничним вектором цього простору.

Найпростіша абстрактна квантова система – це кубіт, тобто гільбертів простір $\mathbb{C}^2$. На відміну від класичного біту, квантовий біт окрім базових станів $|0\rangle$ та $|1\rangle$, може також перебувати і у "суперпозиції", тобто лінійній комбінації $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, $\alpha, \beta \in \mathbb{C}, |\alpha|^2 + |\beta^2| = 1$.

Зауваження 1 *Насправді, якщо два стани відрізняються лише комплексним множником $e^{i\phi}$ (його називають глобальною фазою), тобто $|u\rangle = e^{i\phi}|v\rangle$, то такі стани не можна розрізнити фізично. Тож в деяких формалізаціях стан системи – це промінь, а не вектор.*

Зауваження 2 *Вектори (чи промені) – це "чисті" стані квантової системи. Є також поняття змішаного стану.*

Змішаний стан – це ймовірністний розподіл на чистих станах:

$$\{p_i, |\phi_i\rangle\}_i, p_i \geq 0, \sum_i p_i = 1.$$

Змішаному стану можна поставити у відповідність матрицю (оператор) щільності:

$$\rho = \sum_i p_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|,$$

при цьому він повністю нею визначається, тобто розрізнити 2 змішані стани фізично можливо тоді й лише тоді, коли у них різні оператори щільності.

Оператор щільності – це невід'ємний самоспряжений оператор зі слідом 1. Множину таких операторів будемо позначати $S(H)$.

Узагальнений постулат 1

Стан квантової фізичної системи однозначно визначається оператором щільності $\rho \in S(H)$.

В такій формалізації чисті стани – це проектори на одновимірні підпростори – крайні точки опуклої множини $S(H)$.

Максимально змішаний стан: I/n.

Постулат 2: Простір станів складених систем

Постулат 2

Набору ізольованих квантових систем відповідає гільбертів простір, що є тензорним добутком відповідних гільбертових просторів: $H = H_1 \otimes H_2 \otimes \cdots \otimes H_m$*. При цьому, якщо стан системи з індексом "i" задається вектором* $|\phi_i\rangle \in H_i$*, то стан усієї системи це тензорний добуток* $|\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\phi_m\rangle$.

Не кожний вектор у тензорному добутку просторів є тензорним добутком векторів (хоча кожний вектор є лінійною комбінацією таких добутків). Якщо вектор є добутком, то такий чистий стан називають сепарабельним або станом-добутком. Інакше відповідний чистий стан називають **квантово сплутаним**.

Типовий приклад: стан Белла $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|0\rangle + |1\rangle|1\rangle) \in \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$.

Наслідок – стан на якійсь з підсистем чистого сплутаного стану – не чистий.

Оператор щільності вигляду $\rho_1 \otimes \rho_2 \otimes \cdots \otimes \rho_m \in S(H)$ називають станом-добутком.

Суміш станів добутків

$$\sum_k p_k \cdot \rho_1^{(k)} \otimes \rho_2^{(k)} \otimes \cdots \otimes \rho_n^{(k)}, p_k \geq 0, \sum_k p_k = 1,$$

називають сепарабельним станом.

Інакше стан з $S(H)$ називають сплутаним. До речі, такий стан також завжди є лінійною комбінацією $\sum_k \alpha_k \cdot A_1^{(k)} \otimes A_2^{(k)} \otimes \cdots \otimes A_n^{(k)}$, але при цьому $A_i^{(j)} \notin S(H_i)$.

Якщо є стан на усій складеній системі, можливо змішаний та сплутаний, то який стан буде відповідати йому на підсистемі? **Редукований стан**, що визначається частковим слідом.

Частковий слід.

Нехай $H = H_1 \otimes H_2$. Тоді $L(H) = L(H_1) \otimes L(H_2)$.

Частковий слід по першій системі це лінійний оператор $\mathrm{Tr}_1 : L(H) \to L(H_2)$, такий що $\forall A \in L(H_1), \forall B \in L(H_2)$:

$$\mathrm{Tr}_1(A \otimes B) = \mathrm{Tr}(A) \cdot B$$

Еквівалентне визначення:

$$\mathrm{Tr}_1(M) = \sum_i \langle i| \otimes I \cdot M \cdot |i\rangle \otimes I$$

(аналогічно до формули звичайного сліду $\mathrm{Tr}(A) = \sum_i \langle i|A|i\rangle$.)

Ще одна визначальна властивість: Tr_1 є спряженим до оператору $B \to I \otimes B$ (що діє з $L(H_2)$ до $L(H)$). Тобто $\mathrm{Tr}_1^*(B) = I \otimes B$.

Вправа.

Нехай $M \in L(H_1 \otimes H_2 \otimes H_3)$. Тоді $\mathrm{Tr}_{1,2}(M) = \mathrm{Tr}_1(\mathrm{Tr}_2(M)) = \mathrm{Tr}_2(\mathrm{Tr}_1(M))$.

Максимально сплутаний чистий стан двочасткової системи – такий, у якого редукований стан є максимально змішаним.

Постулат 3: Унітарна еволюція стану

Постулат 3

Еволюція в часі стану ізольованої квантової системи є детермінованою і визначається рівнянням Шредінгера:

$$i\hbar\frac{d|\phi(t)\rangle}{dt} = \mathcal{H}|\phi(t)\rangle,$$

де $\mathcal{H}-$ *це гамільтоніан квантової системи.*

З рівняння випливає, що зі станом системи відбувається унітарна еволюція в часі, тобто

$$|\phi(t_2)\rangle = U(t_1, t_2)|\phi(t_1)\rangle,$$

де

$$U(t_1, t_2) = exp(-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}(t_2 - t_1))$$

це деякий унітарний оператор.

В теорії квантової інформації вважається, що ми можемо маніпулювати гамільтоніаном як завгодно. Іншими словами, вважається що ми можемо подіяти на стан квантової системи будь-яким потрібним нам унітарним оператором (без вимірювання самого стану).

Постулат 4: Вимірювання стану

Постулат 4

Вимірювання квантової системи моделюється набором ортопроекторів $\{P_i\}_i, P_i^\dagger = P_i, P_i^2 = P_i$*, що діють на відповідному гільбертовому просторі* H *та утворюють розклад одиниці* $I = P_1 + P_2 + ... + P_k -$ *projection-valued measure (PVM).*

Якщо система перебувала у стані $|\phi\rangle \in H$*, то результатом вимірювання буде індекс проектору "*i*" із ймовірністю*

$$||P_i|\phi\rangle||^2 = \langle\phi|P_i|\phi\rangle,$$

при цьому система змінює свій стан (коллапсує) на новий:

$$\frac{P_i|\phi\rangle}{||P_i|\phi\rangle||}$$

Це називають правилом Борна.

Для матриці щільності ρ це відповідає ймовірності $\mathrm{Tr}(\rho P_i)$ отримати результат "i", при цьому новий стан буде $P_i \rho P_i / \mathrm{Tr}(\rho P_i)$.

PVM можна задати самоспряженим оператором $X = \sum_i \lambda_i P_i$, $\lambda_i \in \mathbb{R}$, $\lambda_i \neq \lambda_j$. І навпаки, самоспряжений оператор задає PVM.

В контексті квантової механіки самоспряжені оператори називають спостережуваними.

Вважається, що спостережувана X при взаємодії зі станом ρ набуває значення λ_i із ймовірністю $\mathrm{Tr}(\rho P_i)$, тобто з тою самою ймовірністю, з якою при відповідному вимірюванні спостерігається мітка "i".

Квантова теорія ймовірностей

$P(H)-$ множина ортопроекторів $-$ це події,

$S(H)-$ стани $-$ це ймовірнісний розподіл на подіях,

$O(H)-$ самоспряжені оператори (спостережувані) $-$ це випадкові величини.

Для випадкової величини $X \in O(H)$ її мат. сподівання (середнє) на ймовірністному розподілі $\rho \in S(H)$ дорівнює $\mathbb{E}_\rho(X) = \mathrm{Tr}(\rho X)$. А дисперсія дорівнює $\mathrm{Var}_\rho(X) = \mathrm{Tr}(\rho(X - \mathbb{E}_\rho I)^2) = \mathrm{Tr}(\rho X^2) - \mathrm{Tr}(\rho X)^2$.

Зауваження 3 *Для* $\rho = |\phi\rangle\langle\phi|$ *ми маємо*

$$Var_\rho(X) = \langle\phi|(X - \mathbb{E}_\rho I)^2|\phi\rangle = ||(X - \mathbb{E}_\rho I)|\phi\rangle||^2.$$

Це означає, що у квантовому випадку для "крайнього" випадкового розподілу завжди існує випадкова величина, дисперсія якої на цьому розподілі не дорівнює 0 — на відміну від класичного випадку.

Є також **узагальнене поняття вимірювання**.

Ідейно, замість $\rho \in S(H)$ можна побудувати $U\rho \otimes aU^\dagger \in S(H \otimes H_{anc})$, де $U-$ унітарний на $H \otimes H_{anc}$, і розглянути PVM на H_{anc}, що дасть інформацію про ρ. Можна довести, що таке **непряме** вимірювання еквівалентно моделюється наступним чином.

Нехай є набір операторів M_i на H, що задовольняють

$$I = \sum_i M_i^\dagger M_i.$$

Це дає розклад одиниці у суму невід'ємних операторів, що називають POVM – positive-operator valued measure. Зауважимо, що за POVM не можна однозначно відновити M_i (бо $\widetilde{M_i} = U_i M_i$, де U_i унітарний, дає той самий POVM).

Тепер, якщо система перебувала у стані $\rho \in S(H)$, то результатом узагальненого вимірювання буде індекс "i" з ймовірністю $\mathrm{Tr}(\rho M_i^\dagger M_i)$, при цьому новий стан буде $M_i \rho M_i^\dagger / \mathrm{Tr}(\rho M_i^\dagger M_i)$.