

МОСКОВСКИЙ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
(государственный университет)

Л.В. Акобян, В.И. Манько

ВЕРОЯТНОСТНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ

Квантовая Томография

Москва — 2009

Содержание

1	Глава I. Классические и квантовые состояния	3
1.1	Классические состояния	3
1.2	Квантовые состояния	8
1.3	Функция Вигнера	22
1.4	Оператор плотности	24
1.5	Сепарабельные и запутанные состояния	29
1.6	Энтропия и Информация	33
1.7	Вопросы и задачи	38
2	Глава II. Сжатые состояния	39
2.1	Звездочное произведение	40
2.2	Интегралы движения и функции Грина	51
2.3	Интегралы по траекториям	59
2.4	Томограммы классических состояний	64
2.5	Томограммы квантовых состояний	66
2.6	Сжатые когерентные состояния	71
2.7	Вопросы и задачи	77
3	Глава IV. Квантовая Теория Информации	78
3.1	Кубит	79
3.2	Ответы на Вопросы и задачи	82

Предисловие

Основу пособия составляют лекции начитанные автором в МФТИ для студентов старших курсов и аспирантов. Цель пособия дать подробные и систематические знания по современной квантовой механике, научить молодым исследователям практическим навыкам работы с математическими объектами¹ и математическими операциями² и главным образом позволить физику-теоретику смотреть на квантовую и классические теории *единым образом*. Последняя цель в пособии занимает центральное место: уже с самого начала мы пользуемся новейшими представлениями квантовой теории³. При составлении пособия большое место уделялось различным вопросам и задачам которые разбирались на лекциях и семинарах. При всем изложении книги авторы стремились описать "те частные случаи, которые содержат все зародыши общности"⁴ квантовой теории. Первую часть книги, а именно главы *I – III* необходимо считать вспомогательными/вступлением к основной части книги начиная от главы *IV*. При написании пособия авторы стремились сделать физические понятия и связанные с ними терминологию понятными и естественными. В какой мере это удалось, судить читателю.

Переход от классического описания к квантовому осуществляется традиционно в пределе $\hbar \ll S$. По мере развития квантовой теории, физики-исследователи все чаще и чаще возвращались к классической, построенной теории пытаясь найти в ней информацию которая бы помогла лучше понять законы квантовой механики. Мойал В свою очередь, эти попытки невероятно обогатили классическую формулировку механики и в ряде мест привели к существенно иному взгляду на вещи.

Хотя с самого начала квантовой механики стала ясным, что квантовые состояния описываются стохастическими векторами, полная значимость этого факта привлекло серьезное внимание сравнительно недавно.

Подробнее:

- 1 статистический ансамбль(с примерами, термодинамический ансамбль, квантовый ансамбль, микроканонический, канонический, Большой канонический)
- 2 преобразование Радона, Гринштейн, Зайонтц, основание современной кв. механики
- 3 канонические и симплектические преобразования(примеры)
- 4 способы квантования(желательно перечислить, указать связи между ними)
- 5 различные *интерпретации* квантовой механики, с указанием на те которые используются в квантовой теории информации (Copenhagen interpretation, Many-worlds interpretation, Ensemble Interpretation or Statistical Interpretation)
- 6 квантовая декогерентность и эффект Зенона как иллюстрация влияния измерений в квантовой механике на эволюцию системы (см. стр. 158 методички, с примерами, например система из двух кубитов в термической ванне)
- 7 Эргодичность и Эргодическая гипотеза в классической и квантовой статистиках, связь с уравнением Лиувилля
- 8 невозможность клонирования квантовых состояний

¹операторы, базисы, представления, матрицы, группойды т.д.

²различные произведения между математическими объектами, абстрактные алгебры т.д.

³Открытых на сегодняшний день представления Вигнера-Вейля и томмографическое представление квантовых и классических состояний

⁴Цитировано из книги Л. Биденхарна и Дж. Лаук

1 Глава I. Классические и квантовые состояния

В этой главе мы вкратце изложим основные моменты классической (квантовой) и классической (квантовой) статистической механики. Разделение способов описания физических систем на классические и квантовые носит лишь условный, а точнее даже исторический характер. Реальные системы, конечно не различают свои поведения на классические и квантовые. Важно также отметить, что математический аппарат развитой как в той так и в другой теории ни чуть не теряют свою правоту. Так почему же в течении многих лет физики продолжают такую традицию отдельного рассмотрения квантовых и классических описаний мира?

1.1 Классические состояния

Рассмотрим физическую систему с s степенями свободы в отсутствии флуктуаций т.е. не принимая во внимания окружающую ее среду. Тогда, состояние системы задается положением системы на *фазовом пространстве* Ω ее обобщенных координат $q_1, q_2, \dots, q_s$ и обобщенных импульсов $p_1, p_2, \dots, p_s$. На геометрическом языке (см. картину 1) это означает, что любое состояние системы отождествляется с положением $P(q, p)$ материальной точки $\mathfrak{G}$ в $2s$ -мерном фазовом пространстве. Изменению состояния системы во времени или *переходам* из заданного состояния в другой соответствует передвижение точки $G(q, p)$ вдоль некоторой кривой которую можно называть траекторией или *конфигурацией* системы на фазовом пространстве.

Состояния системы в точке $\Gamma(p(t), q(t))$ в каждый момент времени t , можно тогда описать *функцией плотности распределения*

$$\varrho(q, p, t) = \delta(p - p(t))\delta(q - q(t)) \quad (1.1.1)$$

Форма (1.1.1) положительно определена всюду на фазовой плоскости и интеграл от нее взятый по всей фазовой плоскости равен единице

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \varrho(q, p, t) dq dp \quad (1.1.2)$$

Беря частное производное по времени по форме (1.1.1) можем составить уравнение

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \dot{q}(t)\delta'(q - q(t))\delta(p - p(t)) + \dot{p}(t)\delta'(p - p(t))\delta(q - q(t)) = 0 \quad (1.1.3)$$

Заменяв производные от дельта-функций частными производными по p и по q соответственно, уравнение на функцию плотности перепишется в общем виде

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \dot{q}(t)\frac{\partial \varrho}{\partial q} + \dot{p}(t)\frac{\partial \varrho}{\partial p} = 0 \quad (1.1.4)$$

или в векторной форме

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \dot{\mathbf{q}}(t)\frac{\partial \varrho}{\partial \mathbf{q}} = 0 \quad (1.1.5)$$

которое совпадает с уравнением Эйлера для движения идеальной жидкости со скоростью $\mathbf{v}$ под действием поле сил с плотностью $\mathbf{grad} \varrho$

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \mathbf{v} \mathbf{grad} \varrho = 0 \quad (1.1.6)$$

Эволюция системы задается *классическими законами движения Ньютона* записанную либо в виде

$$\ddot{q}(t) = \mathfrak{F}(q, \dot{q}, t) \quad (1.1.7)$$

либо в форме канонических уравнений Гамильтона

$$\begin{cases} \dot{q}_\mu(t) = \frac{\partial H}{\partial p_\mu} \\ \dot{p}_\nu(t) = -\frac{\partial H}{\partial q_\nu} \end{cases} \quad (1.1.8)$$

где $\mathfrak{F}(q, \dot{q}, t)$ результирующая сила действующая на систему, H функция Гамильтона системы⁵.

Решения уравнения Ньютона в форме (2.01) или (2.02) т.е. законы движения точки на фазовом пространстве имеют вид

$$\begin{cases} q(t) = f_q(q_0, p_0, t) \\ p(t) = f_p(q_0, p_0, t) \end{cases} \quad (1.1.9)$$

и функция распределения:

$$\varrho(q, p, t) = \delta(p - f_p(q_0, p_0, t))\delta(q - f_q(q_0, p_0, t)) \quad (1.1.10)$$

Подставив уравнения движения в форме Гамильтона в уравнение для функции плотности, получим

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \{H, \varrho\} = 0 \quad (1.1.11)$$

где скобками обозначены скобки Пуассона функции распределения с функцией Гамильтона

$$\{H, \varrho\} = \sum_{\mu=1}^s \frac{\partial(H, \varrho)}{\partial(p_\mu, q_\mu)} = \sum_{\mu=1}^s \left(\frac{\partial H}{\partial p_\mu} \frac{\partial \varrho}{\partial q_\mu} - \frac{\partial H}{\partial q_\mu} \frac{\partial \varrho}{\partial p_\mu} \right) \quad (1.1.12)$$

Уравнение (1.1.11) означает, что функция распределения остается постоянным при движении системы. Иными словами, ее значения вдоль траекторий системы на фазовой плоскости сохраняются в течении всей эволюции системы. Как известно, такие функции называются *интегралами движения*.

Итак, в *классической механике* состояние системы в каждый момент времени t задается $2s$ -мерным вектором

$$\mathbf{Q}(t) = \begin{pmatrix} p_1(t) \\ \vdots \\ p_s(t) \\ q_1(t) \\ \vdots \\ q_s(t) \end{pmatrix}$$

Движение материальной точки в конфигурационном пространстве (эволюцию системы в фазовом пространстве) можно, тогда представить как каноническое преобразование

$$\mathbf{Q}(t + \tau) = \mathbf{K}(\mathbf{Q}(t), \tau) \quad (1.1.13)$$

⁵В случае действия только потенциальных сил на систему, функцию $\mathfrak{F}$ можно представить в виде градиента $-\nabla_q U(q)$

производящая функция которой является действие $S(q(t), q(t + \tau))$ механической системы. *Канонические преобразования* должны сохранить фазовый объем и *скобки Пуассона*

$$\int d\Gamma = 1 \quad (1.1.14)$$

и

$$\{p_\mu q_\nu\}_t = \{p_\mu q_\nu\}_{t+\tau} = \delta_{\mu\nu} \quad (1.1.15)$$

Если преобразование $\hat{\Lambda}(t, \tau)$ линейно, его называют *симплектической*. Например в случае свободного движения, эволюцию материальной точки можно представить уравнением

$$\begin{pmatrix} p(t) \\ q(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ t & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_0 \\ q_0 \end{pmatrix} \quad (1.1.16)$$

т.е. эволюцию свободного движения вдоль оси z соответствует симплектическая матрица

$$\hat{\Lambda}_{free}(t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ t & 1 \end{pmatrix} \quad (1.1.17)$$

а в случае гармонического осциллятора с частотой ω симплектическая матрица имеет вид

$$\hat{\Lambda}_{osc}(t) = \begin{pmatrix} \cos \omega t & \sin \omega t \\ -\sin \omega t & \cos \omega t \end{pmatrix} \quad (1.1.18)$$

Реальные системы всегда окружены некоторой средой, что неизбежно приводит к появлению *флуктуаций*⁶ (шумов) в системе. Описание таких систем тогда становится задачей *классической статистической механики*. При этом в классической статистической механике состояние системы по-прежнему определяется функцией распределения $\varrho(p, q, t)$ имеющей смысл вероятности нахождения системы в данный момент времени в единичном фазовом объеме. Тогда, вероятность нахождения системы в элементарной фазовой ячейке $dqdp$ дается выражением,

$$d\Gamma_{p,q} = \varrho(q_1, p_1, \dots, q_s, p_s, t) dq_1 dp_1 \cdot \dots \cdot dq_s dp_s \quad (1.1.19)$$

Из определения функции распределения (1.1.8) вытекают следующие ее свойства:

1. Функция распределения системы неотрицательна всюду на фазовой плоскости

$$\varrho(q, p) \geq 0 \quad (1.1.20)$$

Плотность вероятности распределения координат и импульсов даются соответствующими *маргинальными* распределениями

$$\varrho(q_\mu) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varrho(q, p) \frac{d\Gamma}{dq_\mu}, \quad \varrho(p_\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varrho(q, p) \frac{d\Gamma}{dp_\nu} \quad (1.1.21)$$

2. Функция распределения нормирована на единицу

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \varrho(q, p, t) dq dp \quad (1.1.22)$$

⁶Например температурные флуктуации или акустические шумы

Описание системы в классической механике можно также задать посредством *функции Лагранжа* $L(q, \dot{q}, t)$ вводя *функционал действия* S системы

$$S\{q\} = \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) dt \quad (1.1.23)(1.1.24)$$

Вариация действия по "истинным траекториям" системы должна обращаться в нуль.

$$\text{Var}(S\{q\}) = 0 \quad (1.1.25)$$

Действие S может быть получено решением *уравнения Гамильтона-Якоби*

$$\frac{\partial S(q_i, t)}{\partial t} + H\left(\frac{\partial S}{\partial q_i}, q_i\right) = 0 \quad (1.1.26)$$

как функция от фазовой конфигурации $q_1(t), q_2(t), \dots, q_s(t)$ реализующая движение по принципу минимального действия (1.0.12) времени t .

В случае свободного одномерного движения

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 = 0 \quad (1.1.27)$$

Таким образом классическое состояние любой системы полностью дается неотрицательной, квадратируемой функцией распределения. Классическое состояние системы по этой причине можно вообще отождествлять с функцией $\varrho(q, p)$. Заметим, что в силу соотношения из имеющих под нашим распоряжением физически наблюдаемых величин мы можем составить только одну размерную величину из комбинации $[q][p]$. В силу фундаментального значения действия как в классической так и в квантовой механике, введем *масштабную переменную* s размерности действия

$$s = [S] \quad (1.1.28)$$

Действие имеет размерность единицы длины на единицу импульса т.е. имеет размерность момента импульса

$$[s] = [q][p] \quad (1.1.29)$$

Соответственно, функция распределения имеет размерность обратное к размерности действия

$$[\varrho] = \frac{1}{[s]} \quad (1.1.30)$$

Смысл масштабной переменной s на самом деле намного глубже, чем ее формальное определение посредством формулы. В квантовой механике, роль величины s играет *постоянная Планка* $\hbar$ не имеющей классического аналога. Таким образом, появление нового масштаба, означает переход от классического описания состояния системы к квантовому. Исследуем по-подробнее зависимость функции распределения от изменению масштаба действия.

Введем явно масштабную переменную s в функцию распределения

$$\varrho(q, p, t) \rightarrow \varrho(q, p, t, s) \quad (1.1.31)$$

и посмотрим как ведет себя $\varrho(q, p)$ при изменении масштаба. Для этого введем новую функцию

$$w(p, q, s) = s \cdot \varrho(p, q, s) \quad (1.1.32)$$

и перепишем условие сохранения полной вероятности в виде

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} w(p, q, s) \cdot \frac{dqdp}{s} \quad (1.1.33)$$

явно выделив параметр масштабности s .

Если мы теперь совершим *масштабное преобразование* т.е.

$$\begin{cases} q \rightarrow \lambda q \\ p \rightarrow \lambda p \\ s \rightarrow \lambda^2 s \end{cases} \quad (1.1.34)$$

легко проверить, что определенная таким образом функция $w(p, q, s) = s \cdot f(p, q, s)$ инвариантна относительно преобразования. В самом деле, из соотношения вытекает, что

$$w(p, q, s) = w(\lambda p, \lambda q, \lambda^2 s) \quad (1.1.35)$$

Сама же функция распределения при этом оказывается однородной функцией -2 -ого порядка по отношению к масштабной переменной λ .

$$\varrho(\lambda p, \lambda q, \lambda^2 s) = \frac{1}{\lambda^2} \varrho(p, q, s) \quad (1.1.36)$$

1.2 Квантовые состояния

Состояния физической системы в квантовой механике определяются комплексным вектор-состоянием $|\psi\rangle$. Из-за сохранения полной вероятности, квадрат модуля таких векторов должен быть нормирован,

$$||\psi||^2 = |\langle\psi|\psi\rangle| < \infty \quad (1.2.1)$$

поэтому вектор $|\psi\rangle$ и $c|\psi\rangle$, где c любое комплексное число, описывают одно и то же квантовое состояние⁷.

Таким образом, в квантовой механике состояния физических систем определяются не точкой а целым лучом в абстрактной (в общем случае бесконечномерном) *гильбертовом пространстве* H . Наблюдаемые величины системы $\mathbf{S}$ измеримые на опыте ассоциируются с эрмитовыми операторами $\hat{\Omega}$ действующими над пространством H .

Данное квантовое состояния является *линейной суперпозицией* других квантовых состояний. Это означает, что система находясь в состоянии $|\psi\rangle$ одновременно находится также в различных состояниях $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |i\rangle, \dots$. Это утверждение одно из самых ключевых гипотез квантовой механики, записывается в виде разложение (the collapse of the wave function) вектор-состояния

$$|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |i\rangle \quad (1.2.2)$$

Про разложение (1.2.2) говорят как о *когерентной суперпозиции* стабильных квантовых состояний $|i\rangle$.

Измерение $\mathcal{A}$ связанное с собственным базисом наблюдаемой A разрушает состояния $|\psi\rangle$ заменив его одним из состояний $|i\rangle$ с вероятностью (с достоверностью) $|\psi_i|^2$. Таким образом процесс измерения в квантовой механике является недетерминистическим стохастическим процессом⁸ в отличии от детерминистического процесса измерения в классической механике задаваемого уравнениями движения Ньютона. Если же мы в результате нашего опыта хотим обнаружить "более общее" состояние $|\phi\rangle$, система может "скачком" перейти в это состояние с вероятностью $|\langle\psi|\phi\rangle|^2$. Вероятности перехода в собственные состояния в процессе *коллапса или редукции* состояния (волновой функции) $|\psi\rangle$ иногда называют *Борновскими* в честь Макса Борна (1882–1970) который первый предложил вероятностную интерпретацию коэффициентов разложения ψ_i . Механизм квантового коллапса до сих пор не понят до конца.

Коллапс волновой функции является лишь формальным названием внутреннего глубокого *механизма декогеренции* лежащем в основе "внезапного резкого скачка системы в одно из собственных состояний измеряемой наблюдаемой величины. Современное физическое объяснение этого процесса основана на взаимодействии квантовых систем с окружающей макроскопической средой с огромным количеством степеней свободы. Такие квантовые системы принято сейчас называть открытыми.

Хотя в принципе, любое физическое состояние может быть задано неким абстрактным кэт вектором $|\alpha\rangle$, гильбертово пространство может иметь также вполне ясный физический смысл. Таковы, например состояния $|\mathbf{x}\rangle$ или $|\mathbf{p}\rangle$ частицы локализованной в точке $\mathbf{x}$ или имеющий определенное значение импульса $\mathbf{p}$.

⁷ Не все состояния в квантовой механике можно описать Гильбертовыми векторами. В самом деле, если рассматриваемая система $\mathbf{S}$ является подсистемой более большой системы Σ с наличием взаимодействия между ее составными частями, описание с помощью векторов-состояний невозможно поскольку в каждый момент времени такие вектора описывают состояния системы в целом и не могут быть отнесены к какой-нибудь одной из ее подсистем. Тем не менее, мы начинаем изложение основных принципов квантовой механики с этого наиболее простого случая имея в виду дальнейшее обобщение на матрицу плотности и так же с целью продемонстрировать концептуальное преимущество способа квантования через томографические отображения излагаемый в разделе

⁸ Эргодическая гипотеза в квантовой механике?

При повторном осуществлении комплекса условий или проведении серий опытов $\mathfrak{S}_1, \mathfrak{S}_2, \dots, \mathfrak{S}_p, \dots$ над системой $\mathbf{S}$ подготовленной в состоянии $|\psi\rangle$ с целью измерения наблюдаемой $\hat{A}$ ⁹ мы будем получать некоторое распределение значений $A^1, A^2, \dots, A^p, \dots$. Квантовая механика постулирует, что среднее значение или математическое ожидание наблюдаемой A дается формулой

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \quad (1.2.3)$$

Следовательно, для предсказания всевозможных исходов экспериментов, необходимо знать как связать начальное состояние с вектором состоянием $|\psi\rangle$ и измеримую величину A с эрмитовым оператором $\hat{A}$.

Если найден *полный набор N наблюдаемых величин* (конечный или бесконечный) Ω_i представляемых набором операторов $\hat{\Omega}_k$, то произвольный оператор $\hat{A}$ может быть линейно разложен по базису этих операторов

$$\hat{A} = \sum_k^N c_k \hat{\Omega}_k \quad (1.2.4)$$

где c_k комплексные коэффициенты.

Взаимодействие квантовой системы $\mathbf{S}$ с окружающей системой приводит в результате полной или частичной потери когерентности к квантовым корреляциям. Этот процесс можно также называть *смешиванием состояний* (mixing of states) поскольку в его результате чистые состояния становятся смешанными а уже смешанные состояния "смешиваются" еще больше т.е. отклонение параметра чистоты от единицы возрастает.

При представлении кет и бра векторов в каком нибудь конкретном представлении α (например в координатном, импульсном, топографическом и т.д.) квантовые состояние $|\psi\rangle$ описываются обычными векторами, которые однако могут иметь и бесконечную размерность. При этом, как известно, мы можем трактовать вектор-столбец ψ (по английский column matrices или column vectors) как матрицу $n \times 1$.¹⁰

$$|\psi\rangle \doteq \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \psi_i = \langle \alpha_i | \psi \rangle \quad (1.2.5)$$

Комплексно-транспонированный¹¹ (по английский conjugate-transpose) вектор-столбец может быть тогда трактован как *вектор-строка* (по английский row matrix или row vector) φ т.е. матрица $1 \times n$ имеет стандартное обозначение

$$|\varphi\rangle^\dagger = \langle \varphi | \doteq (\varphi_1^* \quad \varphi_2^* \dots), \quad \varphi_i^* = \langle \varphi | \alpha_i \rangle \quad (1.2.6)$$

Алгебры этих векторов-состояния играют ключевую роль не только для конкретных вычислениях в квантомеханических задачах, но служат строительным материалом для построе-

⁹или набора наблюдаемых, каждый из которых представлен своим эрмитовым оператором

¹⁰Понятие представления в квантовой механике таким образом эквивалентно выбору определенного абстрактного *математического пространства* (Евклидовы, Гильбертовы, Банаховы т.д.) или универсальной алгебры в которых мы хотим *представить* состояния изучаемой квантомеханической системы. Ясно, что выбор того или иного представления есть вопрос определяемый самой поставленной задачей и на справедливость полученных результатов влиять не должно. С другой стороны, внутри различных алгебраических структур и пространств существует широкая иерархия позволяющая передать физическим результатам ту или иную общность и строгость.

¹¹Операция комплексного-транспонирования в квантовой механике называют также *эрмитовым сопряжением*

ния всей теории вообще¹². Важнейшими алгебраическими операциями в теории играет *умножения и сложения векторов-состояний*. При этом мы можем рассмотреть как обычное *точечное умножение* хорошо известное нам из теории линейных векторных пространств, так и другие виды умножений такие как *тензорное, векторное, звездочное* и т.д.

Внешнее произведение (по английский outer product) кет вектора $|\psi\rangle$ с бра вектором $\langle\varphi|$ определяет *квантомеханический оператор первого ранга*

$$\hat{Q}^1 = |\psi\rangle\langle\varphi| \quad (1.2.7)$$

Действие этого оператора на произвольный кет $|\phi\rangle$

$$\hat{Q}^1|\phi\rangle = \langle\varphi|\phi\rangle \cdot |\psi\rangle \quad (1.2.8)$$

Этот оператор широко используется для построения *проекционных операторов* вида $|\psi\rangle\langle\psi|$ поскольку позволяет проецировать квантовые состояния $|\phi\rangle$ на луч порождаемый вектором $|\psi\rangle$ с проекцией $\langle\psi|\phi\rangle$. Пусть например, экспериментатор желает *измерить* некоторое состояние $|\phi\rangle$ системы будучи имеющим под своим расположением изначально изготовленное состояние $|\psi\rangle$. Иными словами, ученый ставив ряд опытов над системой **S** желает добиться переходу из состояния $|\psi\rangle$ в новое состояние $|\phi\rangle$. В данном случае предметом измерения или наблюдаемое является само состояние $|\phi\rangle$. Но единственный оператор который может быть сконструирован из вектора $|\phi\rangle$ есть проекционный оператор

$$\hat{P}_\phi = |\phi\rangle\langle\phi| \quad (1.2.9)$$

Тогда, ожидание появления состояния $|\phi\rangle$ в ходе опыта, согласно постулату квантовой механики представится формулой

$$\langle\psi|\hat{P}_\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle\langle\phi|\psi\rangle = |\langle\psi|\phi\rangle|^2 \quad (1.2.10)$$

что соответствует вероятности перехода из состояния $|\phi\rangle$ в состояние $|\psi\rangle$.

Определим оператор следа, отображающей оператор $\hat{A}$ в сумму диагональных матричных элементов (собственных значений)

$$Tr\hat{A} = \sum_{\alpha_k} \langle\alpha_k|\hat{A}|\alpha_k\rangle = \sum_k \lambda_k \quad (1.2.11)$$

Под знаком следа можно произвести перестановку произведения операторов

$$Tr(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\dots\hat{Z}) = Tr(\hat{B}\hat{A}\hat{C}\dots\hat{Z}) = \dots = Tr(\hat{B}\hat{C}\dots\hat{Z}\hat{A}) \quad (1.2.12)$$

В частности, если $\hat{U}$ унитарный оператор, имеет место следующее важное соотношение

$$Tr(\hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger) = Tr\hat{A} \quad (1.2.13)$$

что попутно доказывает инвариантность следа оператора от выбора базиса. Имеется связь между следом и детерминантом матрицы оператора $\hat{A}$ выражаемая равенством

$$\det e^{\hat{A}} = e^{Tr\hat{A}} \quad (1.2.14)$$

которое получается из определения следа оператора как сумму собственных значений. С помощью оператора $\hat{Tr}$ можно выразить внутреннее произведение векторов состояний через их внешнее произведение

¹²В современной алгебре такие традиционные алгебраические структуры как группы и кольца заменяются более общими понятиями *универсальных алгебр*

$$Tr|\psi\rangle\langle\phi| = \langle\phi|\psi\rangle \quad (1.2.15)$$

В случае матричного представления квантомеханических состояний системы, внешнее произведение называется *тензорным*. Это название обусловлено тем, что тензорное произведение матриц позволяет строить тензоры более высоких порядков. Рассмотрим например тензорное произведение

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.2.16)$$

между вектором "нос на права" и вектором "нос налево". Поскольку такая операция соответствует просто внешнему произведению бра на кет, мы получаем матрицу как матричное представление оператора.

При внешнем умножении же двух векторов "нос на права"

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ 0 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.2.17)$$

мы получим снова вектор, с размерностью $2 \times 2 = 4$. Оператор $\hat{Q}^1$ теперь запишется в виде матрицы 2×2

$$\hat{Q}^1 = \begin{pmatrix} \psi_1\varphi_1^* & \psi_1\varphi_2^* \\ \psi_1^*\varphi_1^* & \psi_2\varphi_2^* \end{pmatrix} \quad (1.2.18)$$

Тензорное умножение состояний-векторов представляет собой наиболее общий вид *билинейных операций*. В этом контексте, мы можем говорить о тензорном произведении гильбертовых пространств, универсальных алгебр, и других математических объектов. Например тензорное произведение двух операторов в матричном представлении выглядит так

$$\hat{X} \otimes \hat{Y} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} \\ x_{21} & x_{22} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} y_{11} & y_{12} \\ y_{21} & y_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{11} \begin{pmatrix} y_{11} & y_{12} \\ y_{21} & y_{22} \end{pmatrix} & x_{12} \begin{pmatrix} y_{11} & y_{12} \\ y_{21} & y_{22} \end{pmatrix} \\ x_{21} \begin{pmatrix} y_{11} & y_{12} \\ y_{21} & y_{22} \end{pmatrix} & x_{22} \begin{pmatrix} y_{11} & y_{12} \\ y_{21} & y_{22} \end{pmatrix} \end{pmatrix} \quad (1.2.19)$$

superoperators Наряду с операцией перемножения немало важную роль в квантовой механике играет операция сложения. При этом, в современной квантовой теории эта операция понимается в широком смысле слова как алгебраическая операция отображающей пару полей, алгебр, пространств и т.д. в сумму этих пар. Прямая сумма двух или нескольких матриц определяется как блочно-диагональная матрица

$$\hat{A}_1 \oplus \hat{A}_2 \oplus \dots \oplus \hat{A}_s = \text{Diag}(\hat{A}_1, \hat{A}_2, \dots, \hat{A}_s) = \begin{pmatrix} \hat{A}_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \hat{A}_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \hat{A}_s \end{pmatrix} \quad (1.2.20)$$

Квантовые состояния сложной системы из нескольких (или бесконечного числа) частиц (подсистем) принадлежат новому Гильбертовому пространству образованную из Гильбертовых пространств отдельных частей системы путем тензорного произведения и составления

прямых сумм. Операция конструирования многочастичных Гильбертовых пространств была формализована *Фоком* (1898–1974).

$$H = \bigoplus_{\nu=0}^{\infty} \hat{S} \left(H_i \bigotimes_{i,j}^{\infty} H_j \right) \quad (1.2.21)$$

Стоящий здесь оператор $\hat{S}$ симметризует или антисимметризует суммы произведений в зависимости от статистики составляющих систему частиц.

Точечное или скалярное произведение кет-бра векторов-состояний определяется таким образом

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \begin{pmatrix} \varphi_1^* & \varphi_2^* & \dots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} = \sum_i^n \varphi_i^* \psi_i \quad (1.2.22)$$

чтобы квадрат модуля кет и бра (т.е. норма) были вещественными

$$||\psi||^2 = \begin{pmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* & \dots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} = \sum_i^n |\psi_i|^2 \quad (1.2.23)$$

Точечное или скалярное произведение есть частный случай более общего *внутреннего произведения* (по английский inner product) векторов. Внутреннее произведение можно распространить над операторами определив скалярное произведение между двумя операторами формулой

$$\langle \hat{A} | \hat{B} \rangle = Tr[\hat{A}^\dagger \hat{B}] \quad (1.2.24)$$

Определение (1.2.7) позволяет установить взаимно однозначное отображение между квадратными матрицами порядка n и векторами порядка n^2 . В самом деле, произвольную $n \times n$ матрицу

$$\hat{M}(\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & \dots & m_{1n} \\ m_{21} & m_{22} & \dots & m_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ m_{n1} & m_{n2} & \dots & m_{nn} \end{pmatrix} \quad (1.2.25)$$

можно представить в виде вектора-столбца

$$\vec{M}(\mathbf{n}) = \left\| \begin{pmatrix} \vec{m}_1 \\ \vec{m}_2 \\ \vdots \\ \vec{m}_n \end{pmatrix} \right\| \quad (1.2.26)$$

состоящей из n транспонированных векторов-строк вида

$$\vec{m}_1 = (m_{11}, m_{12}, \dots, m_{1n}), \vec{m}_2 = (m_{21}, m_{22}, \dots, m_{2n}), \dots, \vec{m}_n = (m_{n1}, m_{n2}, \dots, m_{nn}) \quad (1.2.27)$$

причем, так, чтобы скалярное произведение составленных таким образом двух вектор-столбцов

$$\vec{M}^{(1)}(\mathbf{n}) \cdot \vec{M}^{(2)}(\mathbf{n}) = \sum_k (\vec{m}_k^{(1)} \cdot \vec{m}_k^{(2)}) = \sum_{i,k} m_{ik}^{(1)} m_{ik}^{(2)} = \text{Tr}[\hat{M}^{(1)} \hat{M}^{T(2)}] \quad (1.2.28)$$

совпадал со следом изначальных матриц, одну из которых необходимо транспортировать т.е. с скалярным произведением (1.2.7). Более того, соответствие между матрицами и векторами можно сделать еще полнее, определив внешнее или тензорное произведение векторов формулой

$$\vec{x} \otimes \vec{y} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 y_1 \\ x_1 y_2 \\ x_2 y_1 \\ x_2 y_2 \end{pmatrix} \quad (1.2.29)$$

Но, в силу представления (1.2.8) получившейся вектор-столбец можно представить матрицей, отсюда получаем соотношение

$$\vec{x} \otimes \vec{y} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} \doteq \begin{pmatrix} x_1 y_1 & x_1 y_2 \\ x_2 y_1 & x_2 y_2 \end{pmatrix} \quad (1.2.30)$$

Тензорное произведение матриц 2×2 в (1.2.6) тогда представится тензорным произведением двух столбцов 4×4 , если записать каждую блочную матрицу в (1.2.6) в виде столбца-вектора. Действительно, полученное таким образом вектор-столбец совпадет с внешним произведением

$$\vec{x} \otimes \vec{y} = \begin{pmatrix} x_{11} \\ x_{12} \\ x_{21} \\ x_{22} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} y_{11} \\ y_{12} \\ y_{21} \\ y_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{11} y_{11} \\ x_{11} y_{12} \\ x_{11} y_{21} \\ x_{11} y_{22} \\ x_{12} y_{11} \\ x_{12} y_{12} \\ x_{12} y_{21} \\ x_{12} y_{22} \\ x_{21} y_{11} \\ x_{21} y_{12} \\ x_{21} y_{21} \\ x_{21} y_{22} \\ x_{22} y_{11} \\ x_{22} y_{12} \\ x_{22} y_{21} \\ x_{22} y_{22} \end{pmatrix} \quad (1.2.31)$$

иными словами, если

$$\hat{X} \doteq \vec{x} \quad (1.2.32)$$

и

$$\hat{Y} \doteq \vec{y} \quad (1.2.33)$$

то тогда,

$$\hat{X} \otimes \hat{Y} \doteq \vec{x} \otimes \vec{y} \quad (1.2.34)$$

В квантовой механике, абстрактный вектор кэт $|\alpha\rangle$ представляющий некоторое физическое состояние, благодаря постулату о *полноте набора* собственных векторов $|\mathbf{x}\rangle$ конфигурационного оператора $\hat{\mathbf{x}}$ эквивалентно заданию внутреннего произведения $\langle \mathbf{x} | \alpha \rangle$ которая

есть уже некоторая функция от координат. Эту комплексную функцию называют *волновой функцией* системы в состоянии $|\alpha\rangle$. Другими словами, состояние кэт $|\alpha\rangle$ стоит в однозначном соответствии с волновой функцией $\psi_\alpha(\mathbf{x})$ посредством операции внутреннего произведения:

$$|\alpha\rangle \Longleftrightarrow \psi_\alpha(\mathbf{x}) \equiv \langle \mathbf{x} | \alpha \rangle \quad (1.2.35)$$

Любое физическое измерение над системой выявляет спектр собственных значений наблюдаемых величин. Следуя Дираку, мы принимаем, что процесс измерения на математическом языке означает переход системы из данного состояния в одно из ее собственных состояний. Таким образом, роль опыта в квантовой механике в раскрытии набора всевозможных состояний $|a\rangle$ в которых у наблюдаемые системы принимают вполне определенные значения a . Пусть например мы мереем координату x системы. Тогда, в результате полного комплекса испытаний мы обнаружим систему в разные точки пространства т.е. раскроем бесконечный спектр собственных состояний $|x\rangle$ в каждом из которых у системы разные значения координаты x заполняющий непрерывный континуум.

Условие полноты выражается так называемой *выпуклой суммой*

$$\sum_a |a\rangle \langle a| = \hat{1} \quad (1.2.36)$$

В справедливости последнего равенства можно убедиться подействовав оператором $\hat{I} = \sum_a |a\rangle \langle a|$ на произвольное состояние $|\alpha\rangle$

$$\hat{I}|\alpha\rangle = \sum_a |a\rangle \langle a|\alpha\rangle = |\alpha\rangle \quad (1.2.37)$$

В силу произвольности $|\alpha\rangle$ и справедливости разложения (1.2.8) отсюда вытекает результат $\hat{I} = \hat{1}$

Если нам удалось каким нибудь измерением выделить полный набор состояний-векторов в гильбертовом пространстве ассоциированной с данной системой, то тем самым для любого из ее состояний $|\alpha\rangle$ справедливо разложение

$$|\alpha\rangle \equiv \sum_a |a\rangle \langle a| \cdot |\alpha\rangle = \sum_a \langle a|\alpha\rangle \cdot |a\rangle \quad (1.2.38)$$

из которого, умножением справа на вектор состояния $\langle \alpha|$ легко вывести условие

$$\sum_a |\langle \alpha|a\rangle|^2 = 1 \quad (1.2.39)$$

Пусть наблюдаемая величина a представляется оператором $\hat{A}$ со собственными векторами $|a_1\rangle, |a_2\rangle, \dots$. Поскольку собственные вектора составляют полный базис, можно написать

$$\langle \mathbf{x} | \alpha \rangle = \sum_a \langle \mathbf{x} | a \rangle \langle a | \alpha \rangle \quad (1.2.40)$$

или

$$\psi_\alpha(\mathbf{x}) = \sum_a c_a u_a(\mathbf{x}) \quad (1.2.41)$$

где коэффициенты $c_a \equiv \langle a | \alpha \rangle$ могут быть интерпретированы как кэт-состояние $|\alpha\rangle$ в a -представлении.

Оператор $\hat{A}$ может быть разложен в произвольном базисе кет векторов $|\alpha\rangle$

$$\hat{A} = \sum_{\alpha_1} \sum_{\alpha_2} A(\alpha_1, \alpha_2) |\alpha_1\rangle \langle \alpha_2| \quad (1.2.42)$$

В частности, любой оператор $\hat{A}$ в координатном базисе векторов $|x\rangle$ можно представить в виде

$$\hat{A} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 dx_2 \langle x_1 | \hat{A} | x_2 \rangle |x_1\rangle \langle x_2| \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 dx_2 A(x_1, x_2) |x_1\rangle \langle x_2| \quad (1.2.43)$$

Зная разложение оператора $\hat{A}$ в каком нибудь представлении a можно составить инвариантную относительно изменения базиса величину

$$Tr[\hat{A}] = \sum_a \langle a | \hat{A} | a \rangle \quad (1.2.44)$$

которая называется *следом оператора*.

Действие оператора $\hat{A}$ на кет-вектор $|\psi\rangle$ в произвольном f -представлении выражается равенством

$$\begin{aligned} \hat{A}|\psi\rangle &= \sum_{f_1, f_2, f_3} A(f_1, f_2) |f_1\rangle \langle f_2| \cdot \langle f_3 | \psi \rangle \cdot |f_3\rangle = \sum_{f_1, f_2, f_3} A(f_1, f_2) \psi(f_3) \cdot \langle f_2 | f_3 \rangle \cdot |f_1\rangle = \\ &= \sum_{f_1, f_2} A(f_1, f_2) \psi(f_2) |f_1\rangle \end{aligned} \quad (1.2.45)$$

Отсюда, для волновой функции $\psi'(f)$ получим выражение

$$\psi'(f) = \sum_{f'} A_{ff'} \psi(f') \quad (1.2.46)$$

Иными словами, волновые функции $\psi(f)$ преобразовываются по матрице оператора $\hat{A}$ в представлении f . Более формально, этот факт можно записать уравнением

$$(\hat{A}|\psi\rangle)_{f_1} = \sum_{f_2} A_{f_1 f_2} \psi(f_2) \quad (1.2.47)$$

Мы видим, что действие операторов на состояния в квантовой механике можно представить как умножение матрицы $A_{ff'}$ на вектор-столбец $\psi(f)$.

В координатном (x -представление)

$$\langle x | \psi \rangle \equiv \psi(x) = |\psi| e^{i\phi(x)} \quad (1.2.48)$$

или в импульсном представлении (p -представление)

$$\langle p | \psi \rangle \equiv \psi(p) = |\psi| e^{i\phi(p)} \quad (1.2.49)$$

Особо наглядно выглядит соотношение (1.0.20) в координатном представлении:

$$\psi'(x) = \int A(x, y) \psi(y) dy = \hat{A}_x \psi(x) \quad (1.2.50)$$

где символом $\hat{A}_x$ мы обозначили оператор $\hat{A}$ в координатном представлении. Представим результат (1.2.46) в несколько другом виде, более наглядно показывающим как оперирует оператор $\hat{A}$ на волновые функции системы в координатном представлении.

$$\langle \mathbf{x} | \hat{A} | \psi \rangle = \int \langle \mathbf{x} | \hat{A} | \mathbf{y} \rangle \cdot \langle \mathbf{y} | \psi \rangle \cdot d\mathbf{y} \quad (1.2.51)$$

но с учетом матричного представления операторов и состояний правую часть этого равенства можно представить как действие матрицы $\hat{A}_{\mathbf{x}}$ с матричными элементами $\langle \mathbf{x} | \hat{A} | \mathbf{y} \rangle$ на вектор-столбец с элементами $\langle \mathbf{y} | \psi \rangle$ т.е. можно писать

$$\hat{A}_{\mathbf{x}} \cdot \vec{\psi}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \hat{A} | \psi \rangle \quad (1.2.52)$$

Равенство (1.2.49) позволяет представить действие оператора $\hat{A}$ в произвольном представлении векторов $|\psi\rangle$ в виде вполне определенного действия оператора $\hat{A}_{\mathbf{x}}$ в координатном представлении. Оно имеет большую роль при переходе от общих квантомеханических соотношений к конкретным вычислениям.

Матрица одномерного оператора координаты $\hat{x}$ в собственном координатном представлении легко определяется из определения собственных векторов

$$\hat{x}|y\rangle = y|y\rangle \quad (1.2.53)$$

умножив обе стороны (1.2.28) на бра-вектор $\langle x |$ получаем

$$\langle x | \hat{x} | y \rangle \equiv (\hat{x})_{xy} = x\delta(x - y) \quad (1.2.54)$$

Оператор одномерного импульса в координатном представлении

$$\langle x | \hat{p}_x | y \rangle \equiv (\hat{p})_{xy} = i \frac{\partial}{\partial x} \delta(x - y) \quad (1.2.55)$$

Оператор трансляций в трехмерном пространстве

$$\hat{T}(\mathbf{a}) = e^{-i\mathbf{a}\hat{\mathbf{p}}} \quad (1.2.56)$$

$$\langle p | \hat{x} | \alpha \rangle = i \frac{\partial}{\partial p} \langle p | \alpha \rangle \quad (1.2.57)$$

в частности,

Общая унитарная матрица из $SU(2)$ имеет вид

$$\hat{U}_s(a, b) = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \quad (1.2.58)$$

где a и b комплексные числа удовлетворяющие условию унитарности

$$|a|^2 + |b|^2 = 1 \quad (1.2.59)$$

Общую унитарную матрицу из $U(2)$ можно тогда параметризовать задав одну фазу δ

$$\hat{U}(a, b) = e^{i\delta} \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \quad (1.2.60)$$

A good basis for such an approach are special class of matrices $\hat{S}$ in the space of $n \times n$ matrices with the property that all column (row) sums are +1 because we can immediately interpret the columns (rows) of such matrices as discrete probability distributions over n -dimensional spaces. Indeed, in this context the further study corresponds well to *Markov chains* and *stochastic process theories* in general probability theory. In the latter theory if one considers states $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |n\rangle$ as possible states of a quantum system then полная картина вероятностей переходов задается матрицей перехода $\hat{S}$:

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & \dots & s_{1n} \\ s_{21} & s_{22} & \dots & s_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ s_{n1} & s_{n2} & \dots & s_{nn} \end{pmatrix} \quad (1.2.61)$$

где s_{ij} вероятность перехода из начального состояния $|i\rangle$ к конечному $|j\rangle$. В силу этого, для любых i, j должно быть

$$0 \leq s_{ij} \leq 1 \quad (1.2.62)$$

Кроме того, поскольку при каждом однократном переходе, система переходит из начального состояния $|i\rangle$ в произвольные конечные состояния $|k\rangle$ ($k = 1, 2, \dots, n$) вытекает свойство

$$\sum_{k=1}^n s_{ik} = 1, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (1.2.63)$$

таким образом матрица переходов стохастична.

Теорема 1 Для того, чтобы неотрицательная квадратная $n \times n$ матрица $\hat{S}$ была стохастической необходимо и достаточно, чтобы

$$\hat{S}\mathbf{e} = \mathbf{e} \quad (1.2.64)$$

где собственный вектор имеет вид

$$\mathbf{e} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1_{n-1} \\ 1_n \end{pmatrix} \quad (1.2.65)$$

Если не только $\hat{S}$ но и одновременно $\hat{S}^T$ стохастичны (т.е. сумма всех строк и столбцов равны +1) $\hat{S}$ называется *бистохастической* матрицей. Очевидно, этому случаю соответствуют системы со свойством симметрии по отношению к переходам между различными состояниями. Таким образом, свойство бистохастичности можно выражать равенствами

$$\hat{B}\mathbf{e} = \mathbf{e}, \quad \mathbf{e}^T \hat{B} = \mathbf{e}^T \quad (1.2.66)$$

Столбцы или строки стохастических матриц, имеющих смысл распределения вероятностей в n -мерном вероятностном пространстве событий или исходов комплекса испытаний $\mathfrak{S}$ также называют *стохастическими или вероятностными векторами*

$$\vec{S} = \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \\ \vdots \\ s_n \end{pmatrix}, \quad \vec{S}^T = (s_1 \quad s_2 \quad \dots \quad s_n) \quad (1.2.67)$$

Важным подклассом бистохастических матриц являются *ортостохастические* и *унистохастические матрицы*. Ортостохастическая матрица это бистохастическая матрица $\hat{B}(\hat{O}(n))$ элементы которой квадраты элементов некоторой ортогональной матрицы $\hat{O}(n)$

$$b_{ij} = o_{ij}^2, \quad i, j = 1, 2, \dots, n \quad (1.2.68)$$

Унистохастические матрицы являются обобщениями ортостохастических использующие унитарные матрицы для построения бистохастических матриц. По определению, бистохастическая матрица $\hat{B}(\hat{U}(n))$ называется унистохастической если найдется унитарная $n \times n$ матрица $\hat{U}(n)$ такая, что

$$b_{ij} = |u_{ij}|^2, \quad i, j = 1, 2, \dots, n \quad (1.2.69)$$

Все 2×2 бистохастические матрицы являются одновременно и унистохастическими и ортостохастическими и образуют группу. Действительно, для произвольной бистохастической матрицы второго ранга

$$\hat{B}_{2 \times 2}(p, p) = \begin{vmatrix} p & 1-p \\ 1-p & p \end{vmatrix} \quad (1.2.70)$$

можно указать соответствующую ортогональную матрицу

$$\hat{O}(2) = \begin{vmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{vmatrix} \quad (1.2.71)$$

Для более высоких измерений, ситуация существенно иная. Рассмотрим стохастическую матрицу второго порядка

$$\hat{S}(p, q) = \begin{vmatrix} p & q \\ 1-p & 1-q \end{vmatrix} \quad (1.2.72)$$

Собственные значения этой матрицы легко определяются

$$\lambda(q, p) = \frac{1}{2} \text{Tr} \hat{S}(p, q) \pm |1 - \frac{1}{2} \text{Tr} \hat{S}(p, q)| \quad (1.2.73)$$

отсюда находим

$$\lambda_1(q, p) = \text{Tr} \hat{S}(p, q) - 1 = \det \hat{S}(p, q) = p - q, \quad \lambda_2 = 1 \quad (1.2.74)$$

Собственный вектор соответствующий собственному значению 1 есть

$$\mathbf{e} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.2.75)$$

в силу

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{vmatrix} p & q \\ 1-p & 1-q \end{vmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.2.76)$$

в полном соответствии с теоремой о собственных значениях и векторах стохастических матриц. Легко проверить, что произведение двух стохастических матриц снова является стохастической. Однако стохастические матрицы не составляют группу в общем случае. В самом деле, обратная к (1.2.68) матрица

$$\hat{S}^{-1}(p, q) = \frac{1}{p-q} \begin{vmatrix} 1-q & p-1 \\ -q & p \end{vmatrix} \quad (1.2.77)$$

существует лишь при условии $\det \hat{S}(p, q) = p - q \neq 0$ и является сама стохастической только в случае $q = 0, p = 1$. Таким образом, множество стохастических матриц $\{\hat{S}_{2 \times 2}\}$ на плоскости образует лишь полигруппу.

Теорема 2 (Биркгоффа) Матрица $\hat{B}$ является бистохастической тогда и только тогда если она может быть представлена в виде линейного разложения в конечном базисе матриц постановок $n \times n$ т.е.

$$\hat{B} = a^1 \hat{P}_1 + a^2 \hat{P}_2 + \dots + a^k \hat{P}_k, \quad (1.2.78)$$

где коэффициенты $a^1, a^2, \dots, a^k$ неотрицательные числа и $k < \infty$

Например, для двумерной бистохастической матрицы (2.2.69) справедливо представление

$$\hat{B}_{2 \otimes 2} = p \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + (1-p) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.2.79)$$

Простейшее гильбертово пространство состоит из только одного вектора-состояния $|\alpha\rangle$ которое можно представить в $U(1)$ инвариантом виде

$$|\alpha\rangle = e^{i\theta} |\tilde{\alpha}\rangle \quad (1.2.80)$$

Физически такое пространство соответствует системам описываемым одним только состоянием-вектором. Один из таких состояний, квантовый Бозе конденсат. Это состояние также максимально когерентное состояние. Следующим в теории идут двухуровневые квантомеханические системы для которых гильбертово пространство натянуто на всего двух состояний. Физически наиболее яркие ситуации здесь спиновые состояния частиц со спином $1/2$, состояния света с правыми и левыми поляризациями, термические модели.

Для систем со спином $1/2$ прямое разложение операторов спина $\hat{S}_\mu$ в базисах собственных состояний приводит к выражениям

$$\hat{S}_z = \frac{1}{2}(|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|) = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_z \quad (1.2.81)$$

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2}(|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|) = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_x \quad (1.2.82)$$

$$\hat{S}_y = \frac{i}{2}(|-\rangle\langle+| - |+\rangle\langle-|) = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_y \quad (1.2.83)$$

здесь введены *матрицы Паули*

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.2.84)$$

Из свойств операторов проекции спина вытекают следующие свойства матриц Паули

$$\hat{\sigma}_k^\dagger = \hat{\sigma}_k, \quad Tr \hat{\sigma}_k = 0, \quad [\hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_j] = 2i\epsilon_{kjl}\hat{\sigma}_l, \quad \{\hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_j\} = 2\delta_{kj}, \quad \det \hat{\sigma}_k = -1 \quad (1.2.85)$$

Скалярное произведение матриц Паули

$$\langle \hat{\sigma}_k | \hat{\sigma}_j \rangle = \frac{1}{2} Tr \{ \hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_j \} = 2\delta_{kj} \quad (1.2.86)$$

Из установленного нами взаимнооднозначного соответствия между $n \times n$ матрицами и n^2 -мерными комплексными векторами, вытекает, что любую двумерную матрицу $\hat{\rho}$ можно разложить по нормированному базису четырех матриц $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z, \hat{1} = \frac{1}{3}\hat{\sigma}^2$ т.е. можно написать

$$\hat{\rho} = \alpha_1 \hat{\sigma}_x + \alpha_2 \hat{\sigma}_y + \alpha_3 \hat{\sigma}_z + \alpha_4 \hat{1} = \begin{pmatrix} \alpha_3 + \alpha_4 & \alpha_1 - i\alpha_2 \\ \alpha_1 + i\alpha_2 & -\alpha_3 + \alpha_4 \end{pmatrix} \quad (1.2.87)$$

где комплексные коэффициенты $\vec{\alpha}, \alpha_4$ определяются скалярными произведениями

$$\vec{\alpha} = \frac{1}{2} \langle \hat{\vec{\sigma}} | \hat{\rho} \rangle = \frac{1}{2} Tr \hat{\vec{\sigma}} \hat{\rho}, \quad \alpha_4 = \frac{1}{2} Tr \hat{\rho} \quad (1.2.88)$$

Представление (1.2.76) было известно еще Стоксу (1819–1903) задолго до рождения квантовой оптики. В частности, если мы имеем дело со светом коэффициенты α_k называются *параметрами Стокса* а матрица плотности фотона¹³ в параметризации Стокса имеет вид

$$\hat{\rho} = \frac{I}{2} \begin{pmatrix} 1 + \eta_3 & \eta_1 - i\eta_2 \\ \eta_1 + i\eta_2 & 1 - \eta_3 \end{pmatrix} = \frac{I}{2} (\hat{1} + \hat{\sigma} \cdot \vec{\eta}) \quad (1.2.89)$$

где $I = \text{Tr} \hat{\rho} = \rho_{11} + \rho_{22}$ интенсивность источника света. Бистохастическая матрица (1.2.78) на языке матриц Паули может быть представлена в виде

$$\hat{B}_{2 \otimes 2} = p \cdot \hat{1} + (1 - p) \cdot \hat{\sigma}_x \quad (1.2.90)$$

Группой называется множество с определенным над ним бинарной операцией $SU(2)$, группа вращений генераторы, представления, унитарная матрица,

$$\hat{U}(\phi, \mathbf{n}) = e^{i\frac{\phi}{2}(\hat{\sigma} \cdot \vec{n})} \quad (1.2.91)$$

Эрмитова матрица или самосопряженная матрица

$$\hat{H}^\dagger = \hat{H} \quad (1.2.92)$$

симплектическая матрица, приведение к диагональному виду, инвариантное подпространство

Повороты в трехмерном пространстве представляются действительными, ортогональными матрицами $\hat{R}$ оставляющих длину векторов неизменной. Отсюда вытекает, что должно быть

$$\hat{R}^T \hat{R} = \hat{R} \hat{R}^T = \hat{1} \quad (1.2.93)$$

При этом, что при поворотах оси x, y, z координатной системе не меняются, а компоненты вектора $\vec{V}(V_x, V_y, V_z)$ преобразовываются по закону

$$\begin{pmatrix} V'_x \\ V'_y \\ V'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{xx} & R_{xy} & R_{xz} \\ R_{yx} & R_{yy} & R_{yz} \\ R_{zx} & R_{zy} & R_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix} \quad (1.2.94)$$

Оператор поворота вектора $\vec{V}(V_x, V_y, V_z)$ на угол ϕ вокруг оси z в трехмерном евклидовом пространстве R_3 представляется матрицей

$$\hat{R}_z(\phi_z) = \begin{pmatrix} \cos \phi_z & -\sin \phi_z & 0 \\ \sin \phi_z & \cos \phi_z & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.2.95)$$

Вращения удобно представить диаграммой

$$R_{x'y'z'}^{xyz} = \begin{pmatrix} xx' & xy' & xz' \\ yx' & yy' & yz' \\ zx' & zy' & zz' \end{pmatrix} \quad (1.2.96)$$

Аналогично, из диаграммы (1.2.43) матрицы поворота вокруг осей x и y представятся матрицами $\hat{R}_x(\phi_x)$ и $\hat{R}_y(\phi_y)$ соответственно

$$\hat{R}_x(\phi_x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi_x & -\sin \phi_x \\ 0 & \sin \phi_x & \cos \phi_x \end{pmatrix}, \quad \hat{R}_y(\phi_y) = \begin{pmatrix} \cos \phi_y & 0 & \sin \phi_y \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \phi_y & 0 & \cos \phi_y \end{pmatrix} \quad (1.2.97)$$

¹³Иначе, матрица поляризации света

Угол поворота в матрице $\hat{R}_y(\phi_y)$ необходимо считать отрицательным поскольку координатная система

$$\sigma \begin{pmatrix} y & \\ x & z \end{pmatrix} \quad (1.2.98)$$

является левовинтовой.

Совокупность операций вращения в трехмерном пространстве составляет *специальную группу ортогональных матриц*. Эту группу обозначают символом $SO(3)$. Группа $O(3)$ содержит также операции инверсии.

Таким образом, операторам поворота $\hat{R}$ в трехмерном пространстве необходимо сопоставить неким операторам $\hat{D}$ которые бы преобразовывали состояние системы при поворотах

$$\hat{R} \longmapsto \hat{D} \quad (1.2.99)$$

Соответственно при вращениях спиновые состояния преобразовываются по закону

$$\hat{D}(\hat{R})|\psi\rangle = |\psi\rangle_R \quad (1.2.100)$$

$$\hat{D}(\hat{R}_z(\phi)) = e^{-i\hat{J}_z\phi} \quad (1.2.101)$$

Матричное представление операторов $\hat{J}_\mu$, $\mu = 1, 2, \dots$ зависит от размерности гильбертова пространства состояний рассматриваемой квантовой системы, в то время как операторы $\hat{R}_\mu(\phi_\mu)$, $\mu = x, y, z$ действуют на обычные трехмерные вектора $\vec{V}(V_x, V_y, V_z)$. Например, для $n = 2$ *Фундаментальное коммутационное соотношение для углового момента в квантовой механике*

$$[\hat{J}_\mu \hat{J}_\nu] = i\epsilon_{\mu\nu\lambda} \hat{J}_\lambda \quad (1.2.102)$$

$$\hat{D}^{(1/2)}(\theta, \varphi, \psi) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi+\psi}{2}} & \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi-\psi}{2}} \\ -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi-\psi}{2}} & \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi+\psi}{2}} \end{pmatrix} \quad (1.2.103)$$

Полученное матричное представление оператора поворотов спинора $j = \frac{1}{2}$ представляет собой с другой стороны наиболее общий вид унитарной матрицы введенной ранее нами для построения бистохастической матрицы перехода $\hat{B}(\hat{U}(n))$. Отсюда можно утверждать, что произвольную специально-унитарную матрицу можно параметризовать углами Эйлера т.е. представить в виде матрицы оператора 3-х мерных вращений спиновых состояний $\hat{D}^{(1/2)}(\theta, \varphi, \psi)$ с элементами

$$D_{mm'}^{(1/2)}(\alpha, \beta, \gamma) = \langle \frac{1}{2}, m | e^{-i\hat{J}_z\alpha} e^{-i\hat{J}_y\beta} e^{-i\hat{J}_z\gamma} | \frac{1}{2}, m' \rangle = e^{im\gamma} d_{mm'}^{(1/2)}(\beta) e^{im\alpha} \quad (1.2.104)$$

$$\theta = \beta, \varphi = \gamma, \psi = \alpha$$

Иными словами, любую специально-унитарную матрицу $\hat{U}$ из $SU(2)$

$$\hat{U}(\vec{n}) = e^{\frac{i\phi}{2}(\vec{n}\hat{\sigma})} = \begin{vmatrix} \langle \frac{1}{2} | \hat{D}^{(1/2)}(\vec{n}) | \frac{1}{2} \rangle & \langle \frac{1}{2} | \hat{D}^{(1/2)}(\vec{n}) | -\frac{1}{2} \rangle \\ \langle -\frac{1}{2} | \hat{D}^{(1/2)}(\vec{n}) | \frac{1}{2} \rangle & \langle -\frac{1}{2} | \hat{D}^{(1/2)}(\vec{n}) | -\frac{1}{2} \rangle \end{vmatrix} \quad (1.2.105)$$

можно интерпретировать как матрицу преобразования спиновых состояний соответствующей трехмерным вращениями, и наоборот вращения спиновых состояний (или на языке спиноров Паули, повороты спинора) представляются специально-унитарными матрицами.

Выражение (1.2.61) сводится линейному по матрицам Паули выражению

$$\hat{U}(\phi, \mathbf{n}) = \cos \frac{\phi}{2} + i \mathbf{n} \hat{\sigma} \sin \frac{\phi}{2} \quad (1.2.106)$$

Для осей x, y, z из (1.2.65) легко находим

$$\hat{U}(n_x, \phi) = \left\| \begin{array}{cc} \cos \frac{\phi}{2} & i \sin \frac{\phi}{2} \\ i \sin \frac{\phi}{2} & \cos \frac{\phi}{2} \end{array} \right\|, \quad \hat{U}(n_y, \phi) = \left\| \begin{array}{cc} \cos \frac{\phi}{2} & \sin \frac{\phi}{2} \\ -\sin \frac{\phi}{2} & \cos \frac{\phi}{2} \end{array} \right\|, \quad \hat{U}(n_z, \phi) = \left\| \begin{array}{cc} e^{\frac{i\phi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i\phi}{2}} \end{array} \right\| \quad (1.2.107)$$

Из представления (1.2.76) с учетом свойств матриц Паули, вытекает свойство

$$\det \hat{U}(\phi, \mathbf{n}) = e^{\frac{i\phi}{2} (n_k \text{Tr} \hat{\sigma}_k)} = +1 \quad (1.2.108)$$

1.3 Функция Вигнера

В 1932 году Евгений Вигнер (1902–1995), в попытке заменить описания квантовых состояний комплексными волновыми функциями, *квази-вероятностными распределениями* на фазовой плоскости, ввел функцию

$$W(p, q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(q + \frac{u}{2}) \psi^\dagger(q - \frac{u}{2}) e^{-iup} du \quad (1.3.1)$$

где q, p обозначают набор обобщенных координат и импульсов квантовой системы, $\psi(q)$ - волновая функция в координатном представлении. Из определения функции Вигнера следуют следующие ее свойства:

1. Функция Вигнера системы действительна всюду на фазовой плоскости

$$W(p, q) = W^*(p, q) \quad (1.3.2)$$

2. Функция Вигнера нормирована

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} W(p, q) \frac{dq dp}{2\pi} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(u) \psi(q + \frac{u}{2}) \psi^*(q - \frac{u}{2}) = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dq = 1 \quad (1.3.3)$$

Функции Вигнера квантовой системы содержит исчерпывающую информацию о ней. Действительно, заданием функции Вигнера, волновая функция системы однозначно определяется и соотношения

$$\psi(x) \psi(x') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} W\left(\frac{(x+x')}{2}, p\right) e^{ip(x-x')} dp \quad (1.3.4)$$

т.е. волновые функции системы получаются из соотношения $x' = 0$.

В квантовой механике из-за соотношений неопределенности $\Delta p \Delta q \geq \frac{\hbar}{2}$ нельзя ввести понятие функцию распределения $\varrho(p, q)$. К сожалению функция Вигнера не знакопостоянная на всей фазовой плоскости.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} W(p, q) dp = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{-ipx}{2}} \psi(x) dx \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{ipx'}{2}} \psi^*(x') dx' = 2\pi \left| \psi\left(\frac{p}{2}\right) \right|^2 \quad (1.3.5)$$

что, конечно и следовало ожидать по самому смыслу волновой функции $\psi(q)$
Аналогично, можно получить плотность вероятности распределения координаты

$$\int_{-\infty}^{+\infty} W(p, q) dp = 2\pi |\psi(q)|^2 \quad (1.3.6)$$

1.4 Оператор плотности

По определению, *оператором плотности*¹⁴ состояния описываемым вектором $|\psi\rangle$ называется проекционный оператор

$$\hat{\rho}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (1.4.1)$$

Из определения оператора плотности в форме (1.4.1) следуют следующие ее свойства:

1. Оператор плотности Эрмитов

$$\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho} \quad (1.4.2)$$

2. Оператор плотности положительно определен

$$\rho_{nn} \geq 0 \quad (1.4.3)$$

т.е. собственные значения оператора плотности должны быть положительными.

3. След оператора плотности не зависит от выбора базиса в гильбертовом пространстве и равен единице

$$Tr(\hat{\rho}) = \sum_i^n |\psi_i|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(q, q) dq = 1 \quad (1.4.4)$$

Иными словами, матрица плотности *положительно определена*, и ее диагональные элементы имеют смысл вероятностей нахождения системы в одном из базисных состояний.

Операторы обладающие свойством (2.0.44) называются *trace class operators*¹⁵. Вообще, trace class операторы определяются как операторы с конечным следом который не зависит от выбора базиса в гильбертовом пространстве¹⁶.

Такие состояния получили названия *чистых состояний*. Не всякое квантовое состояние можно описать одним вектором состояния. Состояния которые невозможно описать одним вектором состояния получили названия *нечистых или смешанных состояний*.

Из определения (1.6.1) следует, что

$$\hat{\rho}_\psi^2 = |\psi\rangle\langle\psi| \cdot |\psi\rangle\langle\psi| = \hat{\rho}_\psi \quad (1.4.5)$$

Величина

$$\mu_\rho = Tr \hat{\rho}_\psi^2 \quad (1.4.6)$$

называется *параметром чистоты состояния*. Мы видим, что параметр чистоты равен единице для чистых состояний.

Для смешанных состояний необходимо дополнительно усреднить операторы плотности с различными вероятностными весами p_i

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \quad (1.4.7)$$

¹⁴Оператор плотности известен в физике также как статистический оператор. Многочисленные применения оператора плотности связаны с тождественностью той теоретико-физической модели которая ею описывается. Так, *матрица поляризации* или *матрица когерентности* представляет собой другое проявление модели оператора плотности. Эта ситуация аналогично эквивалентности волновой и корпускулярной природой света. Также относятся к друг другу такие важные понятия как корреляция, чистота, смешанные, сепарабельность и когерентность между квантовыми или классическими состояниями.

¹⁵В литературе часто такие операторы называют также *ядерными операторами (nuclear operators)*

¹⁶Некоторые авторы отличают ядерные и trace class операторы определяя ядерные операторы в более широком *пространстве Банаха*.

где $|\psi_i\rangle$ совокупность чистых состояний которые вовсе не составляют полный базис ортонормированных состояний. По самому смыслу коэффициентов p_i они должны удовлетворять неравенствам :

$$0 \leq p_i \leq 1 \quad (1.4.8)$$

Тогда параметр чистоты для смешанных состояний

$$\mu_\rho = \text{Tr} \hat{\rho}^2 = \sum_{ij} p_i p_j |s_{ij}|^2 < 1 \quad (1.4.9)$$

где коэффициенты s_{ij} имеют вид

$$s_{ij} = \text{Tr} |\psi_j\rangle \langle \psi_i| = \langle \psi_i | \psi_j \rangle \quad (1.4.10)$$

Таким образом смешанные состояния представляю собой статистический ансамбль чистых состояний. Мы видим, что параметр чистоты может быть использован для определения с чистым или смешанным состоянием мы имеем дело. Если он равен единицы состояние чистое и может быть описано одним кет вектором. Если же он меньше единицы, мы имеем дело со смешанным состоянием которое может быть описана оператором плотности. Другой, эквивалентный данной критерий основанной на понятии энтропии квантовых состояний будет дано в главе.

Квантовый аналог функции распределения в квантовой области представляется оператором плотности $\hat{\rho}$ действующим на вектор-состояния $|\psi\rangle$ которую можно записать в виде обычной функции

$$\hat{\rho}(x, x') \equiv \langle x | \hat{\rho} | x' \rangle \quad (1.4.11)$$

в x -представлении,

или, например, функцией

$$\hat{\rho}(p, p') \equiv \langle p | \hat{\rho} | p' \rangle \quad (1.4.12)$$

в p -представление.

Для чистых состояний, можно написать

$$\rho(x, x') = \langle x | \hat{\rho} | x' \rangle = \langle x | \psi \rangle \cdot \langle \psi | x' \rangle = \psi(x) \psi^*(x') \quad (1.4.13)$$

Введение оператора плотности позволяет обобщить функцию Вигнера на смешанные состояния следующим образом

$$W(p, q) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle q + \frac{u}{2} | \hat{\rho} | q - \frac{u}{2} \rangle e^{-iup} du \quad (1.4.14)$$

При этом условие нормировки функции Вигнера для чистых состояний сохраняется

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} W(p, q) \frac{dq dp}{2\pi} = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(q, q) dq = \text{Tr}(\hat{\rho}) = 1 \quad (1.4.15)$$

Для маргинальных распределений получаем

$$\int_{-\infty}^{+\infty} W(p, q) dp = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle q + \frac{u}{2} | \hat{\rho} | q - \frac{u}{2} \rangle e^{-iup} du dp = \langle q | \hat{\rho} | q \rangle \quad (1.4.16)$$

и

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} W(p, q) dq &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle q + \frac{u}{2} | \hat{\rho} | q - \frac{u}{2} \rangle e^{-iup} du dq = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ipx_1} \langle x_1 | \hat{\rho} | x_2 \rangle \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipx_2} = \\
&= \rho(p, p)^* = \rho(p, p) = \langle p | \hat{\rho} | p \rangle
\end{aligned} \tag{1.4.17}$$

в силу эрмитовости оператора плотности. При вычислении интеграла была совершена замена переменных

$$\begin{cases} q + \frac{u}{2} = x_1 \\ q - \frac{u}{2} = x_2 \end{cases} \tag{1.4.18}$$

$$\sqrt{2\pi} W(k, p) = \rho(p - \frac{k}{2}, p + \frac{k}{2}) \tag{1.4.19}$$

Сделаем теперь поворот в импульсном пространстве аналогичное

$$\begin{cases} p_1 = p - \frac{k}{2} \\ p_2 = p + \frac{k}{2} \end{cases} \tag{1.4.20}$$

$$\rho(p_1, p_2) = \sqrt{2\pi} W(p_2 - p_1, \frac{p_1 + p_2}{2}) \tag{1.4.21}$$

На самом деле, функция Вигнера в координатном представлении есть не что иное как матрица плотности в системе инерции классической системы из двух частиц.

$$W(x_1, x_2) = \rho\left(\frac{x_1 + x_2}{2}, x_1 - x_2\right) \tag{1.4.22}$$

Соотношения решает обратную задачу: найти оператор плотности при заданной функции Вигнера. Переходя в координатное пространство посредством Фурье преобразования относительно разности импульсов, получим соотношение в координатном представлении

$$\rho(x_1, x_2) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} W\left(\frac{x_1 + x_2}{2}, p\right) e^{-ipu} e^{ip(x_1 - x_2)} du \tag{1.4.23}$$

Положив наконец в последней формуле $x_2 = 0$ получим волновую функцию системы через функцию Вигнера

$$\psi(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} W\left(\frac{x}{2}, p\right) e^{-ipu} e^{ipx} du \tag{1.4.24}$$

Квантовые состояния представляются абстрактными векторами в гильбертовом пространстве H .

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad \langle\psi| = (\psi_1^* \quad \psi_2^*) \tag{1.4.25}$$

Даже для чистых состояний в общем случае матрица плотности не диагональна.

$$\hat{\rho} = \lambda_1 |+\frac{1}{2}\rangle \langle +\frac{1}{2}| + \lambda_2 |-\frac{1}{2}\rangle \langle -\frac{1}{2}| = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \tag{1.4.26}$$

В общем случае для двухуровневой системы матрицу плотности в состоянии $|\psi\rangle$ можно записать в виде

$$\hat{\rho}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} |\psi_1|^2 & \psi_1\psi_2^* \\ \psi_2\psi_1^* & |\psi_2|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} \quad (1.4.27)$$

Как и всякая двухрядная комплексная матрица матрица плотности спинора $j = \frac{1}{2}$ раскладывается по нормированному базису операторов проекций и величины спина. Из общих свойств матрицы плотности, находим такое представление в виде

$$\hat{\rho}_{j=\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + \alpha_3 & \alpha_1 - i\alpha_2 \\ \alpha_1 + i\alpha_2 & \frac{1}{2} - \alpha_3 \end{pmatrix} \quad (1.4.28)$$

Задача об отыскании собственных значений и векторов оператора плотности решается системой:

$$\begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}_\lambda = w \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}_\lambda, \quad \lambda = 1, 2 \quad (1.4.29)$$

из которой находим

$$w_{1,2} = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{1 - 4 \det \hat{\rho}} = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{2} - \vec{\alpha}^2} \quad (1.4.30)$$

Мы видим, что собственные значения матрицы плотности являются элементами следующего стохастического вектора

$$\vec{w}_{\hat{\rho}} = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix} \quad (1.4.31)$$

Собственные состояния матрицы плотности двухуровневой системы можно, таким образом представить унитарной матрицей

$$\hat{U}_{\hat{\rho}} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \end{pmatrix} \quad (1.4.32)$$

Формулировка квантовой механики посредством матрицы плотности является одной из известных на сегодняшний день девяти возможных способов.¹⁷ Вероятность перехода из состояния $|\psi\rangle$ в состояние $|\phi\rangle$ также легко выразить посредством оператора плотности этих состояний

$$w_{\psi \rightarrow \phi} = |\langle\psi|\phi\rangle|^2 = \langle\hat{\rho}_\psi|\hat{\rho}_\phi\rangle = Tr[\hat{\rho}_\psi\hat{\rho}_\phi] \quad (1.4.33)$$

Выражение (1.4.30) было получено, вообще говоря только для чистых состояний. Однако, как мы увидим в дальнейшем след в (1.4.30) играет важную роль в квантовой теории информации. Эту величину теперь принято называть фиделити от английского слова *fidelity*. Более точно, если заданы две системы с матрицами плотности $\hat{\rho}_1$ и $\hat{\rho}_2$ соответственно, фиделити определяется как степень "близости" состояний $\hat{\rho}_1$ и $\hat{\rho}_2$

$$f_{12} = \langle\hat{\rho}_1|\hat{\rho}_2\rangle = Tr[\hat{\rho}_1\hat{\rho}_2] \quad (1.4.34)$$

¹⁷Упомянутые девять различные формулировки квантовой механики приведены в приложении II

В предельном случае $\hat{\rho}_1 = \hat{\rho}_2$ понятия фиделити совпадает с ранее введенным параметром чистоты состояния. Легко выразить фиделити через функции Вигнера. Подставим для этого в формулу (1.4.23) выражение для оператора плотности через функцию

$$f_{12} = \int dq_1 dp_1 dq_2 dp_2 W_1(q_1, p_1) W_1(q_2, p_2) \text{Tr}[\hat{\mathfrak{D}}(2\alpha_1) \hat{I} \hat{\mathfrak{D}}(2\alpha_1) \hat{I}] = \frac{1}{2\pi} \int dq dp W_1(q, p) W_2(q, p) \quad (1.4.35)$$

Уравнение Шредингера заменяется операторным уравнением на матрицу плотности

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H} \hat{\rho}] \quad (1.4.36)$$

Это уравнение совместно с определением полной производной от оператора в квантовой механике приводит к закону сохранения полной вероятности квантомеханической системы

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = 0 \quad (1.4.37)$$

означающий, что плотность вероятности является интегралом движения в квантовой механике. Уравнение на собственные значения Гамильтониана т.е. уравнение на энергетический спектр системы

$$\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle \quad (1.4.38)$$

заменится на уравнение

$$\hat{H}\hat{\rho}_E = E\hat{\rho}_E \quad (1.4.39)$$

Уравнения (1.4.33) и (1.4.36) содержат всю информацию о системе S . Они являются основными уравнениями квантовой механики сформулированной на языке оператора плотности. Пользуясь эрмитовостью Гамильтониана и оператора плотности представим их в виде системы

$$\begin{cases} i\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} - [\hat{H}\hat{\rho}] = 0 \\ \frac{1}{2}\{\hat{H}\hat{\rho}_E\} - E\hat{\rho}_E = 0 \end{cases} \quad (1.4.40)$$

Легко написать эту систему в координатном представлении. Представив Гамильтониан в виде суммы оператора кинетической и потенциальных энергий $U(x)$,

$$\langle x|\hat{H}|x'\rangle = \delta(x - x')(-\frac{1}{2}\Delta + U(x)) \quad (1.4.41)$$

перепишем в систему в виде

$$\begin{cases} i\frac{\partial \rho(x, x', t)}{\partial t} = (\hat{H}_x \rho(x, x', t) - \hat{H}_{x'}^* \rho(x, x', t)) \\ \frac{1}{2}(\hat{H}_x \rho(x, x', E) + \hat{H}_{x'} \rho(x, x', E)) - E\rho(x, x', E) = 0 \end{cases} \quad (1.4.42)$$

Мы видим, что в квантовой механике динамика системы определяется мнимой, тогда как спектр вещественной частью Гамильтониана.

1.5 Сепарабельные и запутанные состояния

Если нам каким нибудь образом удалось найти оператор плотности сложной системы состоящей из двух подсистем 1 и 2,

Если мы обнаружили, что оператор плотности всей системы можно представить в виде простого произведения операторов плотностей ее составных подсистем

$$\hat{\rho}(1, 2) = \hat{\rho}(1) \otimes \hat{\rho}(2) \quad (1.5.1)$$

будем называть такие состояния *просто сепарабельными*. Если же оказалось, что $\hat{\rho}(1, 2)$ можно представить в виде линейной суперпозиции произведений полного набора состояний составных подсистем т.е. в виде

$$\hat{\rho}(1, 2) = \sum_k p_k \hat{\rho}(1)_k \otimes \hat{\rho}(2)_k \quad (1.5.2)$$

с неотрицательными весами p_k удовлетворяющими условию полноты

$$\sum_k p_k = 1 \quad (1.5.3)$$

то, такие состояния будем называть сепарабельным. Суммы вида (1.6.2) принято называть *выпуклой суммой* (по английский *convex sum*). Если же оператор плотности суммарной системы никаким образом нельзя представить в виде (1.6.1) или (1.6.2), говорят о *запутанных* или *сцепленных* по английский *entangled states*) состояниях $\hat{\rho}(1, 2)$. Проблему классификации сепарабельных и запутанных состояний можно сформулировать следующим образом. Задано состояние $\hat{\rho}(1, 2)$

Решение этой задачи в общем случае до сих пор не существует. В отдельных случаях двухуровневых систем или систем близких им сепарабельные и запутанные состояния хорошо известны.

Рассмотрим в качестве примера систему из двух электронов и возьмем смесь состояний с суммарным спином $+1$ и -1

$$|ee\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|-\rangle_1 \otimes |-\rangle_2 + |+\rangle_1 \otimes |+\rangle_2) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1.5.4)$$

Оператор плотности этого состояния

$$\hat{\rho}_{ee} = |ee\rangle\langle ee| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.5.5)$$

Легко проверить, что эта матрица удовлетворяет всем условиям (1.5.2) определения матрицы плотности. Остается лишь проверить положительность собственных значений матрицы (1.6.4) имеющих, как мы уже знаем, смысл вероятностей нахождения системы в одной из четырех состояний описываемых $\hat{\rho}_{ee}$.

Из представления клетки в виде суперпозиций генераторов группы $SU(2)$

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \hat{1} + \frac{1}{2} \hat{\sigma}_x \quad (1.5.6)$$

следует, что два собственных значений $\hat{\rho}_{ee}$ есть

$$p_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1, \quad p_2 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0 \quad (1.5.7)$$

остальные два собственных совпадают со собственными значениями нулевой клетки и равны нулю.

Пусть задано некоторое состояние $\hat{\rho}$ двухуровневой квантовой системы. Тогда это состояние сепарабельно в том и только в том случае если состояние $\hat{\rho}^{PPT}$ полученное от исходного преобразованием PPT положительно определено, т.е.

$$\langle m | \hat{\rho}^{PPT} | m \rangle \geq 0$$

для произвольного базиса $|m\rangle$. Если же, хоть одно собственное значение матрицы $\hat{\rho}^{PPT}$ окажется отрицательными, то состояние запутанное.

Это утверждение составляет содержание так называемой *критерий сепарабельности Переса-Городницкого*¹⁸ (1934 - 2005).

В квантовой механике замене времени t на $-t$ соответствует преобразованию волновой функции на комплексное сопряжение.

$$\psi(-t) \longrightarrow \psi^*(t) \quad (1.5.8)$$

Преобразование PPT (на английском *positive partial transpose*)
Состояние Вернера

$$\hat{\rho}^W(1,2) = \begin{pmatrix} \frac{1+p}{4} & 0 & 0 & \frac{p}{2} \\ 0 & \frac{1-p}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-p}{4} & 0 \\ \frac{p}{2} & 0 & 0 & \frac{1+p}{4} \end{pmatrix} \quad (1.5.9)$$

При $p = 1$ состояние Вернера переходит в изученное нами ранее запутанное состояние (1.7.4).

Сначала убедимся, в том, что матрица (1.5.8) действительно является матрицей плотности некоторого квантового состояния. Для этого достаточно вычислить собственные значения этой матрицы. Из вида (1.5.8) видно, что она принадлежит пространству которое распадается на прямую сумму двух инвариантных подпространств представляемых матрицами

$$\hat{\rho}_1 = \begin{pmatrix} \frac{1-p}{4} & 0 \\ 0 & \frac{1-p}{4} \end{pmatrix} \quad (1.5.10)$$

и

$$\hat{\rho}_2 = \begin{pmatrix} \frac{1+p}{4} & \frac{p}{2} \\ \frac{p}{2} & \frac{1+p}{4} \end{pmatrix} \quad (1.5.11)$$

Следовательно, собственные значения матрицы Вернера совпадают со собственными значениями этих двух матриц. Из второй матрицы мы заключаем тогда, что

¹⁸В англоязычной литературе этот критерий известен под названием *Peres-Horodecki criterion*

$$\lambda_{1,2} = \frac{1-p}{4} \quad (1.5.12)$$

Значит требование положительности матрицы плотности накладывает ограничение на возможные значения p

$$\lambda_i \geq 0, i = 1, 2, 3, 4 \quad (1.5.13)$$

отсюда сразу вытекает первое условие на p

$$p \leq 1 \quad (1.5.14)$$

Далее, легко заметить, что матрицу $\hat{\rho}_2$ можно представить в виде

$$\hat{\rho}_2 = \begin{pmatrix} \frac{1+p}{4} & \frac{p}{2} \\ \frac{p}{2} & \frac{1+p}{4} \end{pmatrix} = \frac{p}{2} \hat{\sigma}_x + \frac{1+p}{4} \cdot \hat{1} \quad (1.5.15)$$

отсюда мы сразу получаем остальные два собственных значения

$$\lambda_{3,4} = \pm \frac{p}{2} + \frac{1+p}{4} \quad (1.5.16)$$

и условие положительности собственных значений приводит окончательно к следующей области определения параметра p .

$$-\frac{1}{3} \leq p \leq 1 \quad (1.5.17)$$

Аналогично находятся собственные значения матрицы $\hat{\rho}_W^{PPT}(1, 2)$

$$\hat{\rho}_W^{PPT}(1, 2) = \begin{pmatrix} \frac{1+p}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1-p}{4} & \frac{p}{2} & 0 \\ 0 & \frac{p}{2} & \frac{1-p}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1+p}{4} \end{pmatrix} \quad (1.5.18)$$

как собственные значения соответствующих элементов инвариантных подпространств

$$\hat{\rho}_1 = \begin{pmatrix} \frac{1+p}{4} & 0 \\ 0 & \frac{1+p}{4} \end{pmatrix}, \quad \lambda_{1,2} = \frac{1+p}{4} \geq 0 \quad (1.5.19)$$

и

$$\hat{\rho}_2 = \begin{pmatrix} \frac{1-p}{4} & \frac{p}{2} \\ \frac{p}{2} & \frac{1-p}{4} \end{pmatrix} = \frac{1-p}{4} \hat{\sigma}_x + \frac{p}{2} \cdot \hat{1}, \quad \lambda_{3,4} = \pm \frac{p}{2} + \frac{1-p}{4} \quad (1.5.20)$$

Отсюда вытекает, что состояние Вернера сепарабельно на интервале

$$-\frac{1}{3} \leq p \leq \frac{1}{3} \tag{1.5.21}$$

и запутанно на интервале

$$\frac{1}{3} \leq p \leq 1 \tag{1.5.22}$$

1.6 Энтропия и Информация

Квантовая механика является больше, чем просто физической теорией описывающей законы микромира. Квантовая механика говорит нам, о том какие физические теории в принципе возможны. В этом нас убеждает форма построения квантовой теории как последовательная схема квантования классической теории. Сам способ квантования при этом может быть произвольным. Таким образом, все фундаментальные физические теории должны быть квантовыми теориями.

$$0 \leq w(\pm) \leq 1, \quad w(+) + w(-) = 1 \quad (1.6.1)$$

Таким образом, различные значения вероятностей системы лежат на отрезке показанной на рисунке 5. Многообразие на котором задано некоторое поле вероятностей, в данном случае отрезок UD , называется *симплексом*. Таким образом, распределение вероятностей классической двухуровневой системы отображаются вектором

$$\vec{w} = \begin{pmatrix} w(+) \\ w(-) \end{pmatrix} \quad (1.6.2)$$

лежащем на одномерном симплексе.

Определим на этом симплексе энтропию H как функцию от *вероятностного (стохастического) вектора* $\vec{w}$

$$H = -\vec{w} \ln \vec{w} = -w(+) \ln w(+) - w(-) \ln w(-) \quad (1.6.3)$$

Определение (1.8.3) энтропии было использовано еще *Больцманом* (1844 – 1906), но применительно к *теории информации* она была впервые введена *Шенноном* (1844–1906) и носит его имя. Чем больше мы стремимся выравнивать вероятности различных событий некоторой средней вероятности, тем больше растет неопределенность исхода события т.е. тем больше энтропия системы. Таким образом, введенная нами функция является количественной мерой неопределенности исхода события получающаяся в результате того или иного выбора из пространства событий $w_1, w_2, \dots, w_n$.

В случае энтропии определенной над пространством событий индуцированным двухуровневой системой, энтропия в равновероятной точке $E \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right)$ равна

$$H(E) = \ln 2 \quad (1.6.4)$$

Определение (1.8.3) легко обобщить на случай систем с n различными возможными исходами при осуществлении комплекса испытаний или измерений над системой. В этом случае можно говорить об n -мерном вероятностном пространстве стохастических векторов

$$\vec{w}(n) = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{pmatrix} \quad (1.6.5)$$

Энтропию Шеннона тогда нужно определять на $n - 1$ -мерном симплексе состоящей из точек w_i удовлетворяющем условию

$$\sum_{i=1}^n w_i = 1 \quad (1.6.6)$$

т.е. симплекс будет состоять из точек совпадающих с концами стохастических векторов (1.8.5).

Обобщение двумерного результата (1.8.4) на n -мерный случай будет гласить

$$H\left(E\left(\frac{1}{n}, \frac{1}{n}, \dots, \frac{1}{n}\right)\right) = \ln n \quad (1.6.7)$$

Энтропия Шеннона является положительно определенной функцией над симплексом.

$$H(\vec{w}(n)) \geq 0 \quad (1.6.8)$$

Допустим, нам известны два распределения вероятностей величины $\mathbf{x}$ и $\mathbf{y}$ в виде стохастических векторов

$$\vec{P}(x) = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, \quad \vec{P}(y) = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} \quad (1.6.9)$$

Для количественного измерения "расстояния" одного распределения вероятностей от другого введем функцию

$$H(\vec{y}|\vec{x}) = y_1 \ln \frac{y_1}{x_1} + y_2 \ln \frac{y_2}{x_2} \quad (1.6.10)$$

Видно, что она обладает свойствами

$$H(\vec{y}|\vec{x}) \geq 0 \quad (1.6.11)$$

причем, равенства нулю достигается в точке $\vec{x} = \vec{y}$

Функцию $H(\vec{y}|\vec{x})$ называют *относительной энтропией*.

Обобщение относительной энтропии на многомерный случай не представляет труда. Соответствующий функционал имеет вид

$$H(\vec{y}|\vec{x}) = \sum_{i=1}^n y_i \ln \frac{y_i}{x_i} \quad (1.6.12)$$

Рассмотрим систему S состоящую из двух двухуровневых подсистем S_1 и S_2 . Распределение вероятностей результирующей четырехуровневой системы можно представить в виде стохастического вектора

$$\vec{w}(4) = \begin{pmatrix} w(++) \\ w(+-) \\ w(-+) \\ w(--) \end{pmatrix} \quad (1.6.13)$$

Иными словами, вектор распределения вероятностей результирующей системы имеет элементы $w(n, m)$, где n, m принимают значения $+$ и $-$ соответственно. Маргинальные распределения первой или второй подсистем т.е. вероятности нахождения первой или второй подсистемы в каком-либо состоянии при совершенно произвольном поведении второй (первой) подсистемы, представляются двумерными стохастическими векторами с элементами $w_n(2)$ и $w_m(2)$ соответственно

$$w_n^{(1)}(2) = \sum_m w_{nm}(4), \quad w_m^{(2)}(2) = \sum_n w_{nm}(4) \quad (1.6.14)$$

т.е. двумерными векторами $\vec{w}^{(1)}(S_1)$ и $\vec{w}^{(2)}(S_2)$

$$\vec{w}^{(1)}(S_1) = \begin{pmatrix} w(++) + w(+-) \\ w(-+) + w(--) \end{pmatrix}, \quad \vec{w}^{(2)}(S_2) = \begin{pmatrix} w(++) + w(-+) \\ w(+-) + w(--) \end{pmatrix} \quad (1.6.15)$$

Тогда у нас имеется возможность определять три разных энтропии для системы S

$$H(1, 2) = - \sum_{m,n} w(1, 2)_{m,n} \cdot \ln w(1, 2)_{m,n} \quad (1.6.16)$$

и для каждой из подсистем в отдельности

$$H(1) = - \sum_m w_m^{(1)} \ln w_m^{(1)}, \quad H(2) = - \sum_n w_n^{(2)} \ln w_n^{(2)} \quad (1.6.17)$$

В каждой из этих подсистем мы можем вычислить теперь соответствующие дисперсии величин m и n

$$\langle m^2 \rangle = \sum_m m^2 w_m^{(1)} = \sum_{n,m} m^2 w_{nm}, \quad \langle n^2 \rangle = \sum_n n^2 w_n^{(2)} = \sum_{n,m} n^2 w_{nm} \quad (1.6.18)$$

и корреляцию между ними

$$\sigma_{mn} = \langle m \cdot n \rangle = \sum_{n,m} nm \cdot w_{nm} \quad (1.6.19)$$

Интуитивно, ясно, что большие корреляции между подсистемами должны привести к большему порядку в системе т.е. к уменьшению энтропии $H(12)$. Поэтому, очевидно суммарная энтропия системы с учетом корреляций между ее подсистемами должна быть всегда меньше, чем сумма энтропий соответствующих подсистем.

$$H(12) \leq H(1) + H(2) \quad (1.6.20)$$

Мы можем мыслить себе идеализированную ситуацию когда сложная система S образуется в результате "слияния" подсистем S_1 и S_2 путем сближения их в пространстве вероятностей. По мере сближения подсистем, вероятность их перекрытия т.е. образования системы S растет. Индикатором появления результирующей системы является возникновения корреляций между величинами описывающими в отдельности подсистемы. Неравенство (1.8.20) говорит нам о том, что неопределенность предсказания вероятностей наблюдаемых величин при таком слиянии уменьшается т.е. происходит необратимый переход из более неопределенного сценария развития систем S_1 и S_2 к более предсказуемому сценарию развития системы S . Шеннон дал количественное определение этой "утерянной энтропии" назвав ее количеством информации, трансформируемой в корреляции сложной системы. Процесс образования более сложной системы из более простых можно таким образом интерпретировать кодирование памяти исходных составляющих системы в ее корреляции. Итак, формула Шеннона для закодированной в системе S информации I гласит

$$I(S) = H(1) + H(2) - H(12) \quad (1.6.21)$$

Фон Нейман (1903–1957) обобщил информационную энтропию введенную Шенноном для классических систем на случай квантового описания

Определенная фон Нейманом квантовая энтропия имеет вид

$$F = -Tr[\hat{\rho} \ln \hat{\rho}] \quad (1.6.22)$$

которая по форме совпадает с энтропией Шаннона при диагональной матрице плотности. Обобщения

$$\hat{\rho}^{(1)} = Tr[\hat{\rho}^{(12)}]_2, \quad \hat{\rho}^{(2)} = Tr[\hat{\rho}^{(12)}]_1 \quad (1.6.23)$$

Относительную энтропию естественно определять в квантовом случае функционалом

$$S(\hat{\rho}|\hat{\sigma}) = Tr[\hat{\rho} \ln \hat{\rho} - \hat{\rho} \ln \hat{\sigma}] \quad (1.6.24)$$

Энтропия состояния Вернера равна

$$S(\hat{\rho}_W(1, 2)) = - \sum_{k=1}^4 \lambda_{\hat{\rho}_W}^k \ln \lambda_{\hat{\rho}_W}^k = 2 \ln 2 - \frac{1}{4} (3(1-p) \ln(1-p) + (1+3p) \ln(1+3p)) \quad (1.6.25)$$

Поскольку по своему физическому смыслу томограмма данного состояния представляет собой вероятность нахождения системы в ней, можно определить новую энтропию как функционал

$$T\{w(x, \mu, \nu)\} = T(\mu, \nu) = - \int_{-\infty}^{+\infty} w(x, \mu, \nu) \ln w(x, \mu, \nu) dx \quad (1.6.26)$$

Естественно так определяемую энтропию называть *томмографической энтропией*¹⁹. С другой стороны, как мы знаем, в силу однородности томограммы, представляется возможным пользоваться несколькими определениями самой томограммы для одного и того же физического состояния. Так, пользуясь определением оптической томограммы, получим *оптическую энтропию* в форме

$$T\{w_{opt}(x, \theta)\} = T_{opt}(\theta) = - \int_{-\infty}^{+\infty} w(x, \theta) \ln w(x, \theta) dx \quad (1.6.27)$$

Ясно, что между энтропией фон Ноймана и томмографической энтропией должна быть связь хотя она и не совсем очевидна. В самом деле, вставляя в определение энтропии фон Ноймана

$$F\{\hat{\rho}\} = -Tr \hat{\rho} \ln \hat{\rho} \quad (1.6.28)$$

выражение для оператора плотности через томограмму $w(x, \mu, \nu)$ т.е.

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} w(x, \mu, \nu) e^{i(x\hat{1} - \mu\hat{q} - \nu\hat{p})} dx d\mu d\nu \quad (1.6.29)$$

мы должны получить искомую связь. Мы остановимся здесь, однако на вывод так называемых *энтропийных соотношений неопределенностей*. Общая математическая теория корреляций между комплексной функцией и ее образом Фурье разработана Соболевым (Сергей Львович Соболев, 1908-1989)

Суть задачи следующая. Пусть у нас имеется состояние $\psi(x)$ в координатном представлении по которому, как мы знаем можно построить волновую функцию в импульсном представлении $\tilde{\psi}(p)$. Далее, по этим волновым функциям мы можем построить плотности распределения вероятностей координаты и импульса системы $|\psi(x)|^2$ и $|\tilde{\psi}(p)|^2$ соответственно и вычислить по ним энтропию Шаннона по формуле

$$S = - \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 \ln |\psi(x)|^2 dx - \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}(p)|^2 \ln |\tilde{\psi}(p)|^2 dp \quad (1.6.30)$$

Посмотрим чему равна энтропия (1.6.30) для основного состояния гармонического осциллятора

¹⁹Иногда томмографическую энтропию называют также симплектической имея в виду явный вид симплектического преобразования входящего в определение томограммы

$$\psi_0(x) = \frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{\sqrt[4]{\pi}}, \quad \tilde{\psi}_0(p) = \frac{e^{-\frac{p^2}{2}}}{\sqrt[4]{\pi}} \quad (1.6.31)$$

Вычисление приводит к результату

$$S_0 = \ln \pi e \quad (1.6.32)$$

Если у нас N осцилляторов, тогда волновая функция основного состояния всей системы факторизуется и место (1.6.32) мы получим

$$S_0 = \sum_{i=1}^N S_0^i = N \ln \pi e \quad (1.6.33)$$

Поскольку в основном состоянии неопределенность вероятности того или иного исхода эксперимента минимальна, ясно, что для всех остальных (возбужденных) состояний системы из N осцилляторов должно выполняться неравенство

$$S = - \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\mathbf{x})|^2 \ln |\psi(\mathbf{x})|^2 d^n \mathbf{x} - \int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}(\mathbf{p})|^2 \ln |\tilde{\psi}(\mathbf{p})|^2 d^n \mathbf{p} \geq N \ln \pi e \quad (1.6.34)$$

На языке томмографической энтропии это означает, что для функции $T_{opt}(\theta)$ выполнено неравенство

$$T_{opt}(\theta = 0) + T_{opt}(\theta = \frac{\pi}{2}) \geq \ln \pi e \quad (1.6.35)$$

в силу физической интерпретации результата (2.4.6) т.к. функции $T_{opt}(\theta = 0)$ и $T_{opt}(\theta = \frac{\pi}{2})$ являются как раз маргинальными распределениями по координате и импульсу системы.

1.7 Вопросы и задачи

1. В чем физический смысл функции $w(p, q, s)$ и масштабной переменной s ?
2. почему мы не рассматриваем явную зависимость функции распределения от времени т.е. не стационарные задачи?
3. Можно ли так сказать? В классической механике есть три способа описания: через уравнения Ньютона, через функцию распределения и через лагранжиан и действие?

2 Глава II. Сжатые состояния

В этой главе мы рассмотрим ряд примеров и задач. Начнем с некоторых свойств томограммы введенной нами в предыдущей главе.

$$w(x, \mu, \nu) = \frac{1}{|\nu|} w\left(\frac{x}{\mu}, \frac{\mu}{\nu}, 1\right), \quad \nu \leftrightarrow \mu \quad (2.0.1)$$

$$w(x, \mu, \nu) = \frac{1}{|x|} w\left(1, \frac{\mu}{x}, \frac{\nu}{x}\right) \quad (2.0.2)$$

осциллятор

$$\psi(y) = \frac{e^{-\frac{y^2}{2}}}{\sqrt[4]{\pi}}$$

$$\sigma^2 = \frac{\mu^2 + \nu^2}{2}$$

$$w(q, p) = \dots = 2e^{-(q^2+p^2)}$$

$$\rho_\psi(x, x') =$$

$$\psi(x) = \frac{\int w(y, \mu, x) e^{i(y - \frac{\mu}{2}x)} dy d\mu}{\sqrt{2\pi} \int w(y, \mu, 0) e^{iy} dy d\mu} \cdot e^{i\varphi}$$

2.1 Звездочное произведение

Еще с ранних дней квантовой механики, многие физики размышляли над построением более универсального аппарата для описания перехода от классического описания к квантовому. Действительно, в классической механике для описания физических систем и явлений мы используем функции (в общем случае комплексные), тогда как в квантовой механике физически наблюдаемые величины представляются в виде операторов действующих над некоторым гильбертовым пространством ассоциированным с системой. Как именно происходит переход от классического способа описания к квантовому? Иными словами, как именно система чувствует, что ей необходимо пристроиться к принципиально новому типу движения? Рассмотрим например систему состоящую всего из одного электрона. Если бы система допускала классического описания, наши опыты обнаружили бы наблюдаемую функцию $A(x)$ зависящую, скажем от конфигурации x или других параметров системы. При переходе же к квантовому описанию мы должны каким то образом заменить функцию $A(x)$ оператором $\hat{A}$ который теперь может действовать, например над конфигурационным пространством из векторов $|x\rangle$. Для того, чтобы оба описания имели некую связь необходимо ввести гипотезу о гомеоморфном соответствии между классическим и квантовыми способами описания т.е. если между классическими функциями $A_1(x), A_2(x), \dots, A_s(x)$ и квантовыми операторами $\hat{A}_1, \hat{A}_2, \dots, \hat{A}_s$ установлено некоторое соответствие²⁰, то и любой паре произведения $A_1(x) \star A_2(x)$ должна соответствовать пара операторных произведений $\hat{A}_1 \hat{A}_2$. Ясно, что понятие произведения между функциями вероятно нужно будет несколько переопределить, из-за некоммутативности операторов $\hat{A}_i$ в квантовой механике. Такое предопределенное произведение, а именно *звездочное произведение функций* и мы будем рассматривать в этой главе.

Пусть задан оператор $\hat{A}$ действующий над гильбертовым пространством H . Обозначим набор квантовых чисел системы $x_1, x_2, \dots, x_n$ комплексным вектором $\mathbf{x}$ т.е. пространство H состоит из векторов $|\mathbf{x}\rangle$. Если нам удалось найти пару операторов $\hat{U}$ и $\hat{D}$ позволяющих установить взаимно однозначное соответствие между оператором $\hat{A}$ и некоторой классической функцией $f_{\hat{A}}(\mathbf{x})$ т.е.

$$\begin{cases} \hat{U} : \hat{A} \rightarrow f_{\hat{A}}(\mathbf{x}) \\ \hat{D} : f_{\hat{A}}(\mathbf{x}) \rightarrow \hat{A} \end{cases} \quad (2.1.1)$$

можем говорить о задании соответствия между классическим и квантовыми описаниями системы. При этом, очевидно необходимо, чтобы система (4.0.47) была самосогласована. Такая самосогласованная схема была предложена Вейлом (1885 – 1955) для физической интерпретации соответствия между функцией Вигнера и оператором плотности и носит названия *схемы Вигнера-Вейля*. В этой схеме система (4.0.47) имеет конкретную форму:

$$\begin{cases} f_{\hat{A}}(\mathbf{x}) = Tr[\hat{A}\hat{U}(\hat{\mathbf{x}})] \\ \hat{A} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{x} f_{\hat{A}}(\mathbf{x}) \hat{D}(\hat{\mathbf{x}}) \end{cases} \quad (2.1.2)$$

Для самосогласованности системы

$$f_{\hat{A}}(\mathbf{x}) = Tr[\hat{U}(\hat{\mathbf{x}}) \int d\mathbf{y} f_{\hat{A}}(\mathbf{y}) \hat{D}(\hat{\mathbf{y}})] = \int d\mathbf{y} f_{\hat{A}}(\mathbf{y}) Tr[\hat{U}(\hat{\mathbf{x}}) \hat{D}(\hat{\mathbf{y}})] \quad (2.1.3)$$

необходимо выполнение соотношения

$$Tr[\hat{U}(\hat{\mathbf{x}}) \hat{D}(\hat{\mathbf{y}})] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (2.1.4)$$

²⁰В общем случае, согласно основным постулатам квантовой механики такого соответствия нет

Функция $f_{\hat{A}}(\mathbf{x})$ называется символом оператора $\hat{A}$. Естественно при этом называть операторы $\hat{U}(\hat{\mathbf{x}})$ и $\hat{D}(\hat{\mathbf{x}})$ осуществляющие переход из квантовой механики к классической и обратно, *деквантайзером* и *квантайзером*.

Из определения квантайзера и деквантайзера видно, что если производить замену $\hat{U}(\hat{\mathbf{x}}) \longleftrightarrow \hat{D}(\hat{\mathbf{x}})$ соотношение самосогласованности не нарушается. Следовательно, наряду с ними можно ввести также пару операторов $\hat{U}^d(\hat{\mathbf{x}})$ и $\hat{D}^d(\hat{\mathbf{x}})$ дуальных им т.е. определить новые квантайзеры и деквантайзеры по формулам

$$\hat{U}(\hat{\mathbf{x}}) \longrightarrow \hat{D}(\hat{\mathbf{x}}) \equiv \hat{U}^d(\hat{\mathbf{x}}) \quad (2.1.5)$$

$$\hat{D}(\hat{\mathbf{x}}) \longrightarrow \hat{U}(\hat{\mathbf{x}}) \equiv \hat{D}^d(\hat{\mathbf{x}}) \quad (2.1.6)$$

Если возможно подобрать такое число λ , что

$$\hat{U}(\hat{\mathbf{x}}) = \lambda \hat{D}^d(\hat{\mathbf{x}}) \quad (2.1.7)$$

то говорят, что задана *самодуальная схема*.

В квантовой механике умножение операторов обладает свойством ассоциативности, но нарушает коммутативность. Поэтому для задания гомеоморфного соответствия между операторами и функциями необходимо ввести другой вид умножения между символами операторов. Именно, если $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$ некие операторы данной системы а $f_{\hat{A}}(\mathbf{x}), f_{\hat{B}}(\mathbf{x}), f_{\hat{C}}(\mathbf{x})$ соответствующие им символы, соотношение

$$\hat{A}(\hat{B}\hat{C}) = (\hat{A}\hat{B})\hat{C} = \hat{A}\hat{B}\hat{C} \quad (2.1.8)$$

должен влечь за собой аналогично соотношение для перемножения символов операторов

$$f_{\hat{A}}(\mathbf{x}) \star (f_{\hat{B}}(\mathbf{x}) \star f_{\hat{C}}(\mathbf{x})) = (f_{\hat{A}}(\mathbf{x}) \star f_{\hat{B}}(\mathbf{x})) \star f_{\hat{C}}(\mathbf{x}) = f_{\hat{A}}(\mathbf{x}) \star f_{\hat{B}}(\mathbf{x}) \star f_{\hat{C}}(\mathbf{x}) \quad (2.1.9)$$

Рассмотрим сначала поясняющий пример. Возьмем две вещественные функции $f_1(x) = \sin x$ и $f_2(x) = \ln x$ и представим их произведение в виде:

$$f_1(x)f_2(x) = \int \int \sin y (\delta(x-y)\delta(x-z)) \ln z \quad (2.1.10)$$

Представим себе, теперь, что место дельта-функций мы могли в принципе брать и другую более сложную функцию, и тогда место обычного умножения двух числовых функций мы имели бы дело с неким новым способом определения произведения между двумя функциями вида

$$f_1(x) \star f_2(x) = \int \int f_1(y) K(x, y, z) f_2(z) dy dz \quad (2.1.11)$$

Определенное таким образом произведение называется *звездочным произведением*. где функция $K(x, y, z)$ — *ядро звездочного произведения* $K(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$

$$f_1(\mathbf{x}) \star f_2(\mathbf{x}) = \int dy dz f_1(\mathbf{y}) K(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) f_2(\mathbf{z}) \quad (2.1.12)$$

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = Tr[\hat{D}(\hat{\mathbf{y}})\hat{D}(\hat{\mathbf{z}})\hat{U}(\hat{\mathbf{x}})]$$

Дуальное $\star$ -произведение задается ядром дуальным к $K(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$:

$$K^d(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = Tr[\hat{D}^d(\hat{\mathbf{y}})\hat{D}^d(\hat{\mathbf{z}})\hat{U}^d(\hat{\mathbf{x}})] = Tr[\hat{U}(\hat{\mathbf{y}})\hat{U}(\hat{\mathbf{z}})\hat{D}(\hat{\mathbf{x}})] \quad (2.1.13)$$

Покажем, что функция Вигнера $W(q, p)$ есть символ оператора плотности $\hat{\rho}(q, q')$. Рассмотрим для этого гильбертово пространство квантовых чисел $\mathbf{x} = (q, p)$, где q, p координата и импульс системы.

Введем одномодные операторы рождения и уничтожения²¹

$$\hat{a} = \frac{\hat{q} + i\hat{p}}{\sqrt{2}}, \quad \hat{a}^\dagger = \frac{\hat{q} - i\hat{p}}{\sqrt{2}} \quad (2.1.14)$$

которые, в силу соотношения $[\hat{q}, \hat{p}] = i$ удовлетворяют коммутационному соотношению $[\hat{a}\hat{a}^\dagger] = 1$

Определим далее комплексные числа α и α^*

$$\begin{cases} \alpha = \frac{q + ip}{\sqrt{2}} \\ \alpha^* = \frac{q - ip}{\sqrt{2}} \end{cases} \quad (2.1.15)$$

которые мы сможем в дальнейшем интерпретировать как "количество" сдвига в фазовом пространстве. При этом следует помнить, что наблюдаемые q и p введенные нами, а также другие канонические сопряженные величины используемые нами здесь и в дальнейшем необязательно имеют смысл координаты и импульса системы. Ими могут быть, например напряжение электрического и магнитного полей и т.д.. О таких величинах, имеющих *структурно-модельный характер* говорят часто как о *квадратурах* или о первой и второй компонентах. Мы будем использовать обоими названиями уточнив, как правило, в каждом случае происхождение каждого из используемых терминов.

Напомним, что *когерентное состояние* определяется как собственное состояние оператора уничтожения

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \quad (2.1.16)$$

Разложив когерентное состояние в базисе чисел заполнения $|n\rangle$, $n = 0, 1, 2, \dots$, и воспользовавшись определением оператора уничтожения получают представление

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{n=\infty} \langle n|\alpha\rangle \cdot |n\rangle = \sum_{n=0}^{n=\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \cdot |n\rangle \quad (2.1.17)$$

Ортнормировав когерентные состояния на единицу, далее пишут

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \cdot \sum_{n=0}^{n=\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \cdot |n\rangle \quad (2.1.18)(2.1.19)$$

Но поскольку в разложении (3.0.55) каждое состояние $|n\rangle$ может быть представлено через вакуумное $|0\rangle$ оператором рождения $\hat{a}^\dagger$

$$|n\rangle = (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \quad (2.1.20)(2.1.21)$$

выражение для когерентного состояния можно переписать в следующем компактном виде

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{\alpha\hat{a}^\dagger} |0\rangle \quad (2.1.22)(2.1.23)$$

²¹В разных разделах Физики операторы уничтожения и рождения называют также понижающим и повышающими операторами

Распределение вероятностей числа фотонов в когерентном состоянии $|\alpha\rangle$ т.е. вероятность излучения n фотонов из состояния $|\alpha\rangle$ согласно квантовой механике дается квадратом модуля коэффициента разложение когерентного состояние по состояниям чисел заполнения $|n\rangle$

$$P_n = |\varphi_n|^2 = |\langle n|\alpha\rangle|^2 = e^{-|\alpha|^2} \frac{(|\alpha|^2)^n}{n!}$$

Смысл собственных значений α оператора уничтожения раскрывается вычислением среднего количества числа бозонов в когерентном состоянии

$$\langle n \rangle_\alpha = \langle \alpha | \hat{n} | \alpha \rangle = \alpha \cdot \alpha^* \langle \alpha | \alpha \rangle = |\alpha|^2 \quad (2.1.24)$$

Тот же результат можно получить вычислив след с оператором плотности $\hat{\rho}_\alpha = |\alpha\rangle\langle\alpha|$ когерентных состояний

$$\langle n \rangle_\alpha = Tr[\hat{n}\hat{\rho}_\alpha] = \sum_{m_1=0}^{\infty} \sum_{m_2=0}^{\infty} m_1 \varphi_{m_1} \varphi_{m_2}^* Tr[|m_1\rangle\langle m_2|] \quad (2.1.25)$$

Для вычисления следа фигурирующая в сумме, определим матричные элементы оператора $\hat{A}_{m_1 m_2} = |m_1\rangle\langle m_2|$ по формуле (1.0.17)

Имеем,

$$\hat{A}_{m_1 m_2}^{n_1 n_2} = \langle n_1 | m_1 \rangle \cdot \langle m_2 | n_2 \rangle = \delta_{n_1 m_1} \delta_{n_2 m_2} \quad (2.1.26)$$

Вычислив далее нужный нам след,

$$Tr[|m_1\rangle\langle m_2|] = \sum_{n_1=0}^{\infty} \delta_{n_1 m_1} \delta_{n_1 m_2} = \delta_{m_1 m_2} \sum_{n_1=0}^{\infty} \delta_{n_1 m_1} = \delta_{m_1 m_2} \quad (2.1.27)$$

Окончательно получим,

$$\langle n \rangle_\alpha = \sum_{m=0}^{\infty} m |\varphi_m|^2 = |\alpha|^2 \cdot e^{-|\alpha|^2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(|\alpha|^2)^m}{m!} = |\alpha|^2 \quad (2.1.28)$$

Распределение вероятностей для числа бозонов можно теперь написать в виде:

$$P_n(\alpha) = e^{-\langle n \rangle_\alpha} \frac{(\langle n \rangle_\alpha)^n}{n!} \quad (2.1.29)$$

Распределение вероятностей для числа бозонов в различных когерентных состояниях, таким образом, описывается *функцией распределения Пуассона* (1781–1840). Про результат (2.1.29) говорят, что в когерентном состоянии статистика фотонов пуассоновская.

Из выражения (3.0.56) видно, что основное состояние может быть интерпретировано как когерентное состояние с $\alpha = 0$.

Когерентные состояние как и основное или вакуумное состояние минимизируют волновой пакет т.е. соотношение неопределенностей для координаты и импульса квантовой системы одной степени свободы. Эти состояния получили широкое применение в квантовых исследованиях благодаря своей особой роли: в случае квантового гармонического осциллятора это самые близкие из квантовых состояний осциллятора близких по способу описания к классическим состояниям классического осциллятора. Термин "когерентное состояние" был введён в работе *Глаубера* (р. 1925г.) который обобщил найденную Шредингером когерентное состояние минимизирующего соотношение неопределенностей Гейзенберга на случай электромагнитного поля как суперпозицию *гармонически осциллирующих полей*.

Когерентные состояния составляют полный базис. В самом деле,

$$\int d^2\alpha \frac{|\alpha\rangle\langle\alpha|}{\pi} = \sum_{n=0}^{n=\infty} |n\rangle\langle n| = 1 \quad (2.1.30)$$

Вычисляя дисперсию

$$\sigma_{nn} = \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 \quad (2.1.31)$$

Получаем,

$$\mathfrak{m}_n = \frac{\sigma_{nn}}{\langle n \rangle} = 1 \quad (2.1.32)$$

Параметр $\mathfrak{m}_n$ называется *параметром Манделя* (1927 – 2001) [1]. Параметр Манделя позволяет классифицировать когерентные состояния по величине его отклонения от единицы. Так, состояния для которых

$$\mathfrak{m}_n = \frac{\sigma_{nn}}{\langle n \rangle} > 1 \quad (2.1.33)$$

принято называть *суперпуассоновскими*, а состояния в которых

$$\mathfrak{m}_n = \frac{\sigma_{nn}}{\langle n \rangle} < 1 \quad (2.1.34)$$

называют *субпуассоновскими*.

$$\langle x^2 \rangle_n - \langle x \rangle_n^2 = \frac{1}{2} \langle n | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 | n \rangle = \frac{1}{2} \langle n | 2\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1 | n \rangle = \frac{1}{2} + n \quad (2.1.35)$$

Во многих разделах квантовой физики и в частности в квантовой оптике очень важную роль играет так называемый *оператор сдвига* $\hat{\mathfrak{D}}(\hat{a}, \hat{a}^\dagger, \alpha, \alpha^*)$

$$\hat{\mathfrak{D}}(\hat{a}, \hat{a}^\dagger, \alpha, \alpha^*) = e^{(\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a})} = e^{i(p\hat{q} - q\hat{p})} \quad (2.1.36)$$

Это название обусловлено с тем, что действие оператора сдвига сводится к сдвигу на величину α в фазовом пространстве. В частности, действие оператора сдвига на вакуумное состояние переводит его в когерентное состояние. Действительно, подействуем оператором сдвига на вакуумное состояние. Имеем,

$$\hat{\mathfrak{D}}(\alpha) | 0 \rangle = e^{\frac{1}{2}[\alpha \hat{a}^\dagger, -\alpha^* \hat{a}]} \cdot e^{\alpha \hat{a}^\dagger} \cdot \hat{1} | 0 \rangle = |\alpha \rangle \quad (2.1.37)$$

Теперь смысл оператора сдвига становится понятным. В дальнейшем, ради краткости оператор сдвига будем обозначать просто $\hat{\mathfrak{D}}(\alpha)$.

Легко получить также волновую функцию $\psi_\alpha(x) = \langle x | \alpha \rangle$ когерентного состояния в координатном представлении. Для этого необходимо в уравнении (2.1.16) перейти к координатному представлению умножив обе части (2.1.16) слева на произвольное состояние $|x\rangle$ и воспользоваться формулой 1.1.12 для представления операторов в координатном базисе. Тогда получим,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 dx_2 \langle x_1 | \hat{a} | x_2 \rangle \cdot \langle x | x_1 \rangle \cdot \langle x_2 | \alpha \rangle = \alpha \langle x | \alpha \rangle \quad (2.1.38)$$

Пользуясь выражением для матричного элемента оператора уничтожения в координатном базисе, получаем дифференциальное уравнение первого порядка

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(x + \nabla_x) \psi_\alpha(x) = \alpha \psi_\alpha(x) \quad (2.1.39)$$

Общее решение уравнения (2.1.37) хорошо известный нам гауссиан

$$\psi_\alpha(x) = \frac{e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}}{\sqrt[4]{\pi}} \cdot e^{\sqrt{2}\alpha x - \frac{x^2}{2}} \quad (2.1.40)$$

Аналогично можно найти собственные состояния оператора числа частиц в координатном представлении т.е. волновые функции

$$\psi_n(x) = \langle x|n\rangle$$

. Для этого напишем уравнение на собственные значения

$$\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle \quad (2.1.41)$$

умножив эри уравнение слева на $|x\rangle$ и перейдя в операторе $\hat{n}$ к ее матрице в координатном представлении,

$$\langle x|\hat{n}|y\rangle = \frac{1}{2}(-\nabla_x^2 + x^2 - 1)\delta(x - y) \quad (2.1.42)$$

Уравнение полученное нами совпадает с уравнением Шредингера в координатном представлении

$$\hat{H}_x\psi_n(x) = \varepsilon_n\psi_n(x) \quad (2.1.43)$$

со собственными энергетическими уровнями

$$\varepsilon_n = \frac{1}{2} + n \quad (2.1.44)$$

Решение уравнения (2.1.41) имеет вид

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \pi^{1/4} e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x) \quad (2.1.45)$$

где $H_n(x)$ так называемые *полиномы Эрмита*

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

Мы видим, что при $n = 0$ когерентное состояние переходит в основное состояние осциллятора.

Напомним, что практическое вычисление действия операторов $\hat{A}$ на состояния ψ в квантовой механике осуществляется по формуле ²²

$$\hat{A}\psi = \sum_{\nu} A_{\mu\nu}\psi_{\nu} \quad (2.1.46)$$

где индексы μ, ν показывают дискретный или непрерывный спектр состояний по которым ведется суммирование. При вычислении же следов операторов важно помнить инвариантность следа от выбора базиса в котором он берется.

Введем теперь *оператор инверсии (оператора четности)* $\hat{I}$. Действие оператора инверсии на волновую функцию в координатном представлении определяется как

$$\hat{I}_x\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} I_{xy}\psi(y)dy = \psi(-x) \quad (2.1.47)$$

²²В заданном представлении операторов и состоянии

т.е. ядро оператора инверсии дельта функция $I_{xy} = \delta(x + y)$.

Легко определить также действие оператора четности на квантовые состояния системы в произвольном представлении. Для этого достаточно учесть очевидные равенства

$$\hat{I}|q\rangle = |-q\rangle, \quad \hat{I}|p\rangle = |-p\rangle \quad (2.1.48)$$

Тогда можно написать,

$$\hat{I}|\psi\rangle = \hat{I} \sum_{q'} \psi(q')|q'\rangle = \sum_{q'} \psi(q')|-q'\rangle = \sum_{q'} \psi(-q')|q'\rangle \quad (2.1.49)$$

Покажем, что оператор четности антикоммутирует с операторами координаты и импульса. Для этого подсчитаем отдельно действие операторов $\hat{I}\hat{q}$ и $\hat{q}\hat{I}$ на произвольное состояние $|\psi\rangle$ в некотором пространстве H .

Имеем,

$$\hat{I}\hat{q}|\psi\rangle = \sum_{q'} q' \psi(q')|-q'\rangle = - \sum_{q'} q' \psi(-q')|q'\rangle \quad (2.1.50)$$

и

$$\hat{q}\hat{I}|\psi\rangle = \sum_{q'} \psi(q')(-q')|-q'\rangle = + \sum_{q'} q' \psi(-q')|q'\rangle \quad (2.1.51)$$

Сложив полученные результаты, получаем

$$\hat{I}\hat{q} + \hat{q}\hat{I} = \{\hat{I}\hat{q}\} = 0 \quad (2.1.52)$$

Аналогично для оператора импульса, на основании определения (4.0.66), получим

$$\hat{I}\hat{p} + \hat{p}\hat{I} = \{\hat{I}\hat{p}\} = 0 \quad (2.1.53)$$

В силу определения операторов рождения и уничтожения, можно переписать эти свойства в виде

$$\{\hat{I}\hat{a}\} = \{\hat{I}\hat{a}^\dagger\} = 0 \quad (2.1.54)$$

Из определения оператора четности следуют также свойства

$$\hat{I}^\dagger = \hat{I}, \quad \hat{I}^{-1} = \hat{I}, \quad \hat{I}^2 = \hat{I} \quad (2.1.55)$$

След оператора инверсии также берется элементарно в координатном представлении

$$Tr \hat{I} = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(2x) dx = \frac{1}{2} \quad (2.1.56)$$

Оператор инверсии в представлении когерентных состояний естественно определять как

$$\hat{I}(\hat{a}, \hat{a}^\dagger) = (-1)^{\hat{a}^\dagger \hat{a}} \equiv (-1)^{\hat{n}} \quad (2.1.57)$$

Действительно действие такого оператора на когерентные состояния $|n\rangle$, $n = 0, 1, 2, \dots$ даст

$$\hat{I}|n\rangle = (-1)^n |n\rangle \quad (2.1.58)$$

т.е. определяет четность состояния в зависимости от четного или нечетного числа частиц в нем.

Для вычисления следа оператора четности в этом представлении находим явный вид его матричных элементов

$$I_{nm} = \langle n | \hat{I} | m \rangle = \delta_{nm} e^{i\pi n} \quad (2.1.59)$$

$$Tr \hat{I} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{i\pi n} = \frac{1}{1 - e^{i\pi}} = \frac{1}{2} \quad (2.1.60)$$

В квантовой механике из-за некоммутативности операторов, при работе со сложными функциями от операторов необходимо проявить осторожность.

$$e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}\hat{B}] + \frac{1}{2}[\hat{A}[\hat{A}\hat{B}]] + \frac{1}{3!}[\hat{A}[\hat{A}[\hat{A}\hat{B}]]] + \dots + \quad (2.1.61)$$

Эта - так называемая *формула Бейкера-Кэмбелла-Хаусдорфа* (Baker-Campbell-Hausdorff formula).

из этой формулы видно, что если операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ дополнительно удовлетворяют условию

$$[[\hat{A}\hat{B}]\hat{A}] = [[\hat{A}\hat{B}]\hat{B}] = 0 \quad (2.1.62)$$

то выражение (2.1.18) упрощается,

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{(\hat{A}+\hat{B})} \cdot e^{\frac{1}{2}[\hat{A}\hat{B}]} \quad (2.1.63)(2.1.64)$$

Теперь, мы достаточно подготовлены, чтобы изучать некоторые свойства оператора сдвига. Сначала, заметим, что из перечисленных свойств оператора инверсии, для введенной нами оператора сдвига (4.0.63) можно написать

$$\hat{I} \hat{\mathfrak{D}}(\alpha) = e^{(-\alpha \hat{a}^\dagger + \alpha^* \hat{a})} \hat{I} = \hat{\mathfrak{D}}(-\alpha) \hat{I} \quad (2.1.65)$$

Далее из коммутационных соотношений оператора рождения и уничтожения, легко установить

$$\hat{\mathfrak{D}}(\alpha) \hat{\mathfrak{D}}(\beta) = \hat{\mathfrak{D}}(\alpha + \beta) \cdot e^{\frac{1}{2}(\alpha \beta^* - \beta \alpha^*)} \quad (2.1.66)$$

В частном случае $\alpha = \beta$, имеем

$$\hat{\mathfrak{D}}(\alpha) \hat{\mathfrak{D}}(\alpha) = \hat{\mathfrak{D}}(2\alpha) \quad (2.1.67)$$

При $\alpha = -\beta$, получаем свойство

$$\hat{\mathfrak{D}}(\alpha) \hat{\mathfrak{D}}(-\alpha) = \hat{\mathfrak{D}}(0) = \hat{1} \quad (2.1.68)$$

т.е. оператор $\hat{\mathfrak{D}}^{-1}(\alpha)$ обратный к оператору сдвига существует при любом значении параметра α .

$$\hat{\mathfrak{D}}^{-1}(\alpha) = \hat{\mathfrak{D}}(-\alpha) \quad (2.1.69)$$

Из равенства (3.0.75) и свойства оператора сдвига $\hat{\mathfrak{D}}^\dagger(\alpha) = \hat{\mathfrak{D}}(-\alpha)$ следует унитарность оператора сдвига

$$\hat{\mathfrak{D}}^\dagger(\alpha) \hat{\mathfrak{D}}(\alpha) = \hat{\mathfrak{D}}(\alpha) \hat{\mathfrak{D}}^\dagger(\alpha) = \hat{1}$$

$$g \longrightarrow T_g, \quad g_1 g_2 \longrightarrow T_{g_1} T_{g_2}$$

Из формулы (3.0.79) следует, что луч комплексных чисел с одинаковыми фазами гомеоморфно отображается в группу операторов $\hat{\mathfrak{D}}(\alpha)$:

$$\alpha \longrightarrow \hat{\mathfrak{D}}(\alpha), \quad \hat{\mathfrak{D}}(\alpha)\hat{\mathfrak{D}}(\beta) = \hat{\mathfrak{D}}(\alpha + \beta)$$

Это означает, что мы построили *лучевое представление группы комплексных чисел*. Подсчитаем теперь след оператора $\hat{\mathfrak{D}}(\alpha)$. Имеем,

$$\begin{aligned} Tr[\hat{\mathfrak{D}}(\alpha)] &= Tr[e^{i(p\hat{q}-q\hat{p})}] = e^{\frac{iqp}{2}} Tr[e^{ip\hat{q}} \cdot e^{-iq\hat{p}}] = e^{\frac{iqp}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp' \langle p' | e^{ip\hat{q}} \cdot e^{-iq\hat{p}} | p' \rangle = \\ &= e^{\frac{iqp}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp' e^{-iqp'} \cdot \langle p' | e^{ip\hat{q}} | p' \rangle \end{aligned} \quad (2.1.70)$$

Для вычисления подынтегрального матричного элемента, воспользуемся тождеством

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dq' |q'\rangle \langle q'| &= \hat{1} \\ \langle p' | e^{ip\hat{q}} | p' \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dq' \langle p' | e^{ip\hat{q}} | q' \rangle \cdot \langle q' | p' \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dq' e^{ipq'} |\langle p' | q' \rangle|^2 = \delta(p) \end{aligned} \quad (2.1.71)$$

поскольку волновая функция свободной волны

$$\langle q | p \rangle = \frac{e^{iqp}}{\sqrt{2\pi}}, \quad \langle p | q \rangle = \frac{e^{-ipq}}{\sqrt{2\pi}} \quad (2.1.72)$$

Окончательно,

$$Tr[\hat{\mathfrak{D}}(q, p)] = \pi \delta(p) \delta(q)$$

Введем теперь другой оператор согласно формуле

$$\hat{U}(\hat{\mathbf{x}}) = \hat{U}(\hat{q}, \hat{p}) = k \hat{\mathfrak{D}}(\alpha) \hat{I} \hat{\mathfrak{D}}(-\alpha) \quad (2.1.73)$$

Здесь для удобства обозначений введен символ $\hat{\mathbf{x}}$ обозначающий пару операторов $(\hat{q}, \hat{p})$. Подсчитаем сначала след оператора $\hat{U}(\hat{\mathbf{x}})$. Имеем,

$$Tr[\hat{U}(\hat{\mathbf{x}})] = k Tr[\hat{\mathfrak{D}}(\alpha) \hat{I} \hat{\mathfrak{D}}(-\alpha)] = k Tr[\hat{I} \hat{\mathfrak{D}}(-\alpha) \hat{\mathfrak{D}}(\alpha)] = \frac{1}{2} k \quad (2.1.74)$$

При вычислении следа мы учли, что операторы можно переставлять под знаком следа, и свойство (4.0.82).

Рассмотрим теперь след

$$Tr[\hat{\rho} \hat{U}(q, p, \hat{q}, \hat{p})] = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx dy \rho_{xy} U_{yx}(q, p) \quad (2.1.75)$$

и покажем, что про определении квантайзера по (2.1.50), он приводит нас к функции Вигнера с точностью до константы k . Имеем,

$$U_{yx}(q, p) = \langle y | \hat{U}(\alpha, \alpha^*) | x \rangle = k \langle y | \hat{\mathfrak{D}}(2\alpha, 2\alpha^*) | -x \rangle \quad (2.1.76)$$

Вычисляем нужный нам матричный элемент

$$\langle y | \hat{\mathfrak{D}}(q, p, \hat{q}, \hat{p}) | x \rangle = \langle y | e^{i(p\hat{q}-q\hat{p})} | x \rangle = e^{-\frac{i}{2}pq} \langle y | e^{ip\hat{q}} \cdot e^{-iq\hat{p}} | x \rangle = e^{-\frac{i}{2}pq} e^{ipy} \langle y | e^{-iq\hat{p}} | x \rangle \quad (2.1.77)$$

В силу определения оператора импульса как генератора оператора трансляции

$$e^{-iq\hat{p}} | x \rangle = | x + q \rangle \quad (2.1.78)$$

окончательно имеем,

$$U_{yx}(q, p) = ke^{-i2pq}e^{i2py}\delta(x + y - 2q) \quad (2.1.79)$$

Подставив этот матричный элемент в формулу (2.1.52) и проинтегрировав по x получаем функцию

$$W(q, p) = ke^{-i2pq} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \langle 2q - y | \hat{\rho} | y \rangle e^{i2py} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle q + \frac{u}{2} | \hat{\rho} | q - \frac{u}{2} \rangle e^{-iup} du \quad (2.1.80)$$

где мы совершили замену переменных согласно

$$y = q - \frac{u}{2}$$

и положили свободный параметр k равный $\frac{1}{2\pi}$. Таким образом мы показали, что символ Вейля оператора плотности при подходящем выборе квантайзера и деквантайзера совпадает с функцией Вигнера введенной нами ранее для определения квазивероятностной функции распределения к квантовой механике. Именно такой результат и следовало бы нам ожидать, поскольку операция "квантование" должна была позволить нам описать квантомеханическую систему оператором плотности, а операция "деквантование" — обеспечить нас функцией Вигнера пригодной для классификации "почти классических" так и "ультра квантовых" состояний.

Если бы мы вычисляли след в когерентном представлении

$$Tr[\hat{\rho}\hat{U}(\alpha, \alpha^*, \hat{a}, \hat{a}^\dagger)] \quad (2.1.81)$$

то мы получили бы так называемую *функцию Глаубера* (p.1925)-*Сударшана* (p. 1931)

$$\mathcal{P}_{G-S}(\alpha, \alpha^*) = Tr[\hat{\rho}\hat{U}(\alpha, \alpha^*, \hat{a}, \hat{a}^\dagger)] \quad (2.1.82)$$

Определим теперь деквантайзер $\hat{D}(\hat{\mathbf{x}})$ положив

$$\hat{D}(\hat{\mathbf{x}}) = \frac{1}{2\pi} \hat{U}(\hat{\mathbf{x}}) \quad (2.1.83)$$

Проверим нормировку (2.1.4)

$$Tr[\hat{U}(\hat{\mathbf{x}})\hat{D}(\hat{\mathbf{y}})] = \frac{1}{2\pi} Tr[\hat{\mathfrak{D}}(2\alpha_{\mathbf{x}})\hat{\mathfrak{D}}(-2\alpha_{\mathbf{y}})] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (2.1.84)$$

Рассмотрим далее следующие следы

$$Tr[\hat{D}(q_1, p_1)\hat{D}(q_2, p_2)\hat{U}(q, p)] = \frac{2}{\pi^2} Tr[\hat{\mathfrak{D}}(2\alpha_1)\hat{\mathfrak{D}}(-2\alpha_2)\hat{\mathfrak{D}}(2\alpha)\hat{I}] \quad (2.1.85)$$

Последовательным применением формулы (2.1.64) получим,

$$Tr[\hat{D}(\hat{\mathbf{x}}_1)\hat{D}(\hat{\mathbf{x}}_2)\hat{U}(\hat{\mathbf{x}})] = \frac{2}{\pi^2} e^{4iIm(\alpha_1\alpha_2^* - \alpha^*(\alpha_1 - \alpha_2))} Tr[\hat{\mathfrak{D}}(2\alpha + 2\alpha_1 - 2\alpha_2)\hat{I}] = \frac{2}{\pi^2} e^{4iIm(\alpha_1\alpha_2^* + \alpha^*(\alpha_1 - \alpha_2))} \quad (2.1.86)$$

Выясним смысл выражения стоящего в экспоненте. Для этого вычислим площадь на рисунке 2.

$$\mathfrak{S} = \left\| \begin{array}{ccc} \mathbf{e}_x & \mathbf{e}_y & \mathbf{e}_z \\ q_1 - q_2 & p_1 - p_2 & 0 \\ q - q_2 & p - p_2 & 0 \end{array} \right\| = \frac{1}{2} ((q_1 - q_2)(p - p_2) - (p_1 - p_2)(q - q_2)) \quad (2.1.87)$$

Сравнив последнее выражение с выражением стоящим в экспоненте следа, приходим к равенству:

$$Tr[\hat{D}(q', p')\hat{D}(q'', p'')\hat{U}(q, p)] = \frac{2}{\pi^2}e^{4i\mathfrak{S}} \quad (2.1.88)$$

Легко подсчитать в общем случае

$$Tr[\hat{D}(x_1)\hat{D}(x_2)\dots\hat{D}(x_n)\hat{U}] = \begin{cases} \delta(x_1 + x_2 + \dots + x_n), & \text{если } n \text{ нечетно} \\ \frac{1}{2}, & \text{если } n \text{ четно} \end{cases} \quad (2.1.89)$$

2.2 Интегралы движения и функции Грина

Простейшим примером кинетического уравнения является *уравнение Лиувилля*

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \dot{p} \frac{\partial f}{\partial p} + \dot{q} \frac{\partial f}{\partial q} = 0 \quad (2.2.1)$$

Интегралами движения называются величины $I(q_1, q_2, \dots, q_s, p_1, p_2, \dots, p_s, t)$ динамические функции от $2s+1$ обобщенных координат и импульсов и зависящих явно от времени которые остаются постоянными вдоль истинных траекторий системы

$$I(q, p, t) = I(q_0, p_0, t) \quad (2.2.2)$$

Простейшими интегралами движения являются значения координаты и импульса системы в начальный момент движения системы

$$\begin{cases} q_0 = q_0(q, p, t) \\ p_0 = p_0(q, p, t) \end{cases} \quad (2.2.3)$$

например в случае свободного движения $H = \frac{p^2}{2}$ таковыми являются функции

$$\begin{cases} q_0(q, p, t) = q - pt \\ p_0(q, p, t) = p \end{cases} \quad (2.2.4)$$

а в случае движения в гравитационном (или электрическом поле) с напряженностью $\vec{g}$ интегралы движения имеют несколько более сложный вид

$$\begin{cases} q_0(q, p, t) = q - pt + \frac{gt^2}{2} \\ p_0(q, p, t) = p - gt \end{cases} \quad (2.2.5)$$

С помощью функции Грина решение уравнения Лиувилля можно представить в виде

$$f(q, p, t) = \int f(q', p') G(q, p, q', p', t) dq' dp' \quad (2.2.6)$$

где функция Грина имеет вид

$$G(q, p, q', p', t) = \delta(q' - q_0(q, p, t)) \delta(p' - p_0(q, p, t)) \quad (2.2.7)$$

В случае свободного движения функция Грина

$$G_{free}(q, p, q', p', t) = \delta(q' - q + pt) \delta(p' - p) \quad (2.2.8)$$

и функция распределение (т.е. решение уравнения Лиувилля)

$$f_{free}(q, p, t) = e^{-\frac{(q-pt)^2}{2}} e^{-\frac{p^2}{2}} \quad (2.2.9)$$

В случае же движения в поле с постоянным напряжением функция Грина

$$G_g(q, p, q', p', t) = \delta(q' - q + pt - \frac{gt^2}{2}) \delta(p' - p + gt) \quad (2.2.10)$$

и решение уравнение Лиувилля

$$f_g(q, p, t) = e^{-\frac{(q - pt + \frac{gt^2}{2})^2}{2}} e^{-\frac{(p - gt)^2}{2}} \quad (2.2.11)$$

Обобщение рассмотренных простых задач приводит нас к исследованию интегралов движения в квантомеханических системах с Гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \hat{\vec{Q}} \hat{B}(t) \hat{\vec{Q}} + \vec{C}(t) \hat{\vec{Q}} = \sum_{\alpha, \beta=1}^{2N} B(t)_{\alpha, \beta} \hat{Q}_\alpha \hat{Q}_\beta + \sum_{\alpha, \beta=1}^{2N} C_\alpha(t) \hat{Q}_\alpha \quad (2.2.12)$$

с векторным оператором

$$\hat{\vec{Q}} = (\hat{p}_1, \hat{p}_2, \dots, \hat{p}_N, \hat{q}_1, \hat{q}_2, \dots, \hat{q}_N) \quad (2.2.13)$$

из $2N$ обобщенных координат и импульсов. Матрица $\hat{B}(t)$ и вектор $\vec{C}(t)$ считаются заданными. Для дальнейших выкладок нам понадобятся коммутационные свойства введенной нами векторного оператора $\hat{\vec{Q}}$. Для этого вычислим сначала коммутатор

$$[\hat{Q}_\alpha \hat{Q}_\beta] = \hat{\Sigma}_{\alpha, \beta} \quad (2.2.14)$$

рассмотрев только две моды осциллятора т.е. для $N = 2$. Перебирая тогда операторы $\hat{Q}_\alpha = \hat{q}_1, \hat{q}_2, \hat{p}_1, \hat{p}_2$, и пользуясь одномодовыми коммутационными соотношениями Гейзенберга, получаем

$$\hat{\Sigma}_{\alpha, \beta} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.2.15)$$

Непосредственно обобщив этот результат на случай N мод, напомним

$$\hat{\Sigma}_{\alpha, \beta} = i \begin{pmatrix} 0 & (-\hat{1})_N \\ (\hat{1})_N & 0 \end{pmatrix} \quad (2.2.16)$$

Следующий коммутатор который нам понадобится

$$[\hat{Q}_\gamma, \hat{Q}_\alpha \hat{Q}_\beta] = \hat{\Sigma}_{\gamma, \alpha} \hat{Q}_\beta + \hat{Q}_\alpha \hat{\Sigma}_{\gamma, \beta} \quad (2.2.17)$$

Эта задача замечательна тем, что позволяет точное решение многих многомерных задач. Задача о многоатомных молекулах в приближении оптический волновод, уравнение Максвелла

Задача о прохождении классического света (без учета поляризации) через волновод сводится к уравнению Шредингера, в котором роль времени играет z -координата, показатель преломления $n(\mathbf{r})$ играет роль потенциала.

$$(\Delta + k^2) A_\mu = 0 \quad (2.2.18)$$

уравнение Гельмгольца

Фок и Леонтович заметили, что $A_z \gg A_{zz}$

уравнение похоже на уравнение Шредингера

$$A_\mu = (\mathbf{E}, \mathbf{H}) \quad (2.2.19)$$

Ищем в виде

$$E(\mathbf{r}) = A(x, y, z)e^{ikz} \quad (2.2.20)$$

$$(ik\frac{\partial}{\partial z} + \Delta_2 + k^2(x, y, z))A(x, y, z) = 0 \quad (2.2.21)$$

Гамильтониан представим в виде

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(\hat{p}, \hat{q}) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \omega^2(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{p} \\ \hat{q} \end{pmatrix} \quad (2.2.22)$$

другая задача сводящегося к такому Гамильтониану есть задача о движении электрона в магнитном поле с включением электрического поля.

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\vec{p}} - e\vec{A})^2}{2m} - e\mathbf{E}(\mathbf{r}) \quad (2.2.23)$$

Непосредственно обобщив вид ранее полученных интегралов движения для одномодового квантового осциллятора, ищем интегралы движения в виде

$$\hat{\vec{I}}(t) = \hat{\Lambda}(t)\hat{\vec{Q}} + \hat{\vec{\Delta}}(t) \quad (2.2.24)$$

где матрица $\hat{\Lambda}(t)$ и оператор-вектор $\hat{\vec{\Delta}}(t)$ неизвестные пока нам величины предстоящие определению.

Определим далее начальные условия задачи таким образом, чтобы выполнялось условие

$$\hat{\vec{I}}(t=0) = \hat{\vec{Q}} \quad (2.2.25)$$

иначе,

$$\hat{\Lambda}(t=0) = \hat{1}_{2N \otimes 2N}, \quad \hat{\vec{\Delta}}(t=0) = \vec{0} \quad (2.2.26)$$

Если $\hat{\vec{I}}(t)$ действительно интеграл движения, нам удастся из условия

$$\frac{\partial \hat{I}_\alpha(t)}{\partial t} + i[\hat{H}\hat{I}_\alpha(t)] = 0 \quad (2.2.27)$$

определить неизвестные $\hat{\Lambda}(t)$ и $\hat{\vec{\Delta}}(t)$. Иными словами, мы попытаемся выбрать эти величины таким образом, $\hat{\vec{I}}(t)$ удовлетворял уравнению (2.2.23).

Вычислим для этого сначала коммутатор $[\hat{I}_\alpha(t)\hat{H}]$. Имеем,

В этой главе мы выведем ряд новых и интересных результатов которые позволят нам по новому смотреть на интегралы движения. Текущее состояние квантовой системы т.е. временные решения нестационарного уравнения Шредингера будем записывать в виде $|\psi, t\rangle$. Введем *оператор эволюции* $\hat{U}(t)$ переводящим начальное состояние $|\psi\rangle$ системы в текущую $|\psi, t\rangle$ преобразованием

$$|\psi, t\rangle = \hat{U}(t)|\psi\rangle \quad (2.2.28)$$

В пределе $t \rightarrow 0$ должно быть

$$\lim_{t \rightarrow 0} \hat{U}(t) = \hat{1} \quad (2.2.29)$$

Фундаментальным свойством оператора эволюции является его унитарность вытекающим из сохранения полной вероятности:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi, t | \psi, t \rangle = \langle \psi | \hat{U}^\dagger(t) \hat{U}(t) | \psi \rangle = 1 \quad (2.2.30)$$

отсюда,

$$\hat{U}^\dagger(t) \hat{U}(t) = \hat{U}(t) \hat{U}^\dagger(t) = \hat{1} \quad (2.2.31)$$

В координатном представлении определение (4.1.1) перепишется в виде:

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} U(t, x, y) \psi(y) dy \quad (2.2.32)$$

В наиболее общем виде уравнение Шредингера для состояния системы в произвольном представлении ψ имеет вид:

$$i \frac{\partial |\psi, t\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\psi, t\rangle \quad (2.2.33)$$

В отличие от процесса измерения, который носит сугубо стохастический (случайный) характер, уравнение Шредингера описывает вполне детерминистический процесс временной эволюции квантовой системы. В этом смысле оно аналогично уравнениям движения классической механике в форме Ньютона или Гамильтона. Из этой формы легко перейти к x -представлению разложив состояние $|\psi\rangle$ и гамильтониан $\hat{H}$ в пространственном базисе $|x\rangle$ т.е. перейдя у уравнении к матричным представлениям состояний-векторов и операторов по формулам:

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \cdot \langle x | \psi \rangle, \quad \hat{H} = \int \int H(x, x') |x\rangle \langle x'| \quad (2.2.34)$$

Тогда получим,

$$i \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle x | \psi \rangle \right) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx dx' |x\rangle \cdot H(x, x') \langle x' | \psi \rangle \quad (2.2.35)$$

Поменяв местами переменные интегрирования в силу произвольности базисного состояния $|x\rangle$ будем иметь

$$i \frac{\partial \psi(x)}{\partial t} = \int_{-\infty}^{+\infty} H(x, x') \psi(x') dx' \quad (2.2.36)$$

Уравнение для оператора эволюции получится в виде системы:

$$\begin{cases} i \frac{\partial \hat{U}(t)}{\partial t} = \hat{H} \hat{U}(t) \\ \hat{U}(0) = \hat{1} \end{cases} \quad (2.2.37)$$

Если Гамильтониан системы не зависит явно от времени, уравнение (3.1.10) точно решается и для оператора эволюции мы получаем

$$\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t} \quad (2.2.38)$$

Функция Грина в квантовой механике определяется как:

$$G(x, x', t) = \langle x | \hat{U}(t) | x' \rangle = U(t, x, x') \quad (2.2.39)$$

Ясно, что функция Грина, в силу свойства (4.1.2), должна подчиняться начальному условию

$$G(x, x', 0) = \delta(x - x') \quad (2.2.40)$$

С физической точки зрения, функция Грина интерпретируется как амплитуда перехода системы из точки x в точку y по какому либо "пути причем таких амплитуд в квантовой механике бесконечное множество в отличие от классической механики в которой истинными траекториями могут быть лишь те которые удовлетворяют принципу наименьшего действия. В этом аспекте функцию Грина называют также *пропагатором*.

С введением функции Грина уравнение (4.1.2) запишется в более естественной интегральной форме:

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dy G(x, y, t) \psi(y) \quad (2.2.41)$$

Можем говорить про функцию Грина как об *интегрального ядре оператора эволюции*. Уравнение на функцию Грина легко получить подставив ее интегральное определение (4.1.10) в уравнение Шредингера для волновой функции (4.1.7):

$$i \frac{\partial G(x, y, t)}{\partial t} = \int_{-\infty}^{+\infty} dz H(x, z) G(z, y, t) \quad (2.2.42)$$

или

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz \left(H(x, z) - i \delta(x - z) \frac{\partial}{\partial t} \right) G(z, y, t) = 0 \quad (2.2.43)$$

Если известен гамильтониан системы, то решив интегральное уравнение (4.1.14) находят функцию Грина. По формуле (4.1.12) можно затем определять волновую функцию системы в любой момент времени.

В квантовой механике *интегралом движения* называют среднее значение некоторой наблюдаемой величины J неизменное со временем:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \psi, t | \hat{J} | \psi, t \rangle = 0 \quad (2.2.44)$$

иначе,

$$\langle \psi, t | \hat{J}(t) | \psi, t \rangle = \langle \psi, t = 0 | \hat{J}(0) | \psi, t = 0 \rangle \quad (2.2.45)$$

Пользуясь определением дифференцирования операторов в квантовой механике, это условие можно также выразить операторным уравнением

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{J}(t) + i [\hat{H}(t) \hat{J}(t)] = 0 \quad (2.2.46)$$

Сохранение среднего значения оператора $\hat{J}(t)$ с помощью оператора плотности системы можно также выразить условием

$$Tr \hat{\rho}(t) \hat{J}(t) = Tr \hat{\rho}(t = 0) \hat{J}(t = 0) \quad (2.2.47)$$

Пользуясь оператором эволюции можно записать

$$J(t) = \langle \psi, t | \hat{J} | \psi, t \rangle = \langle \psi | \hat{U}^\dagger(t) \hat{J}(t) \hat{U}(t) | \psi \rangle \quad (2.2.48)$$

Из этого выражения видно, что условие сохранения среднего значения можно также выразить операторным уравнением

$$\frac{\partial}{\partial t}(\hat{U}^\dagger(t)\hat{J}(t)\hat{U}(t)) = 0 \quad (2.2.49)$$

Например, интегралом движения будут являться все наблюдаемые величины которые представляются операторами коммутирующим с оператором эволюции и не зависящем явно от времени.

Мы укажем здесь на ряд свойств интегралов движения в квантовой механике которые играют существенную роль при их нахождении. Прежде всего заметим, что любая *непрерывная* функция $\hat{F}$ от оператора $\hat{J}(t)$ будем сам интегралом движения. Действительно,

$$Tr\hat{\rho}(t)\hat{F}(\hat{J}(t)) = Tr\hat{\rho}(t=0)\hat{F}(\hat{J}(t=0)) = Tr\hat{\rho}(t=0)\hat{F}(t=0) \quad (2.2.50)$$

Из (4.1.17) легко составим теперь следующий интеграл движения

$$\hat{J}(t) = \hat{U}(t)\hat{J}(0)\hat{U}^\dagger(t) \quad (2.2.51)$$

где оператор $\hat{J}(0)$ некоторый постоянный во времени оператор.

Простейшими интегралами движения являются квантомеханические аналоги интегралов движения (2.2.3), которые в силу (2.2.44) напомним в виде

$$\hat{q}_0(t) = \hat{U}(t)\hat{q}\hat{U}^\dagger(t), \quad \hat{p}_0(t) = \hat{U}(t)\hat{p}\hat{U}^\dagger(t) \quad (2.2.52)$$

Из свойства (2.2.43) тогда вытекает, что если некоторая наблюдаемая представляется оператором вида $\hat{F}(\hat{q}_0(t), \hat{p}_0(t))$ ее среднее значение будет оставаться постоянной в течении всех эволюции системы т.е. F интеграл движения.

Второе важно свойство интегралов движения заключается в том, что их собственные значения не зависят от времени. Это свойство вытекает из определения собственных значений операторов

$$\hat{J}(t)|\psi, J\rangle = J|\psi, J\rangle \quad (2.2.53)$$

о поскольку, согласно (2.2.44) оператор $\hat{J}(t)$ унитарно-эквивалентен не зависящем от времени оператору $\hat{J}(0)$, его собственные значения не могут зависеть от времени поскольку они равны собственным значениям оператора $\hat{J}(0)$.

Допустим мы смогли найти одно решение уравнение Шредингера в виде волновой функции $\psi(q, t)$ и пусть $\hat{J}(\hat{q}, \hat{p}, t)$ один из интегралов движения данной системы. Тогда, функция

$$|\phi, t\rangle = \hat{J}(\hat{q}, \hat{p}, t)|\psi, t\rangle \quad (2.2.54)$$

будет также решением уравнения Шредингера. В самом деле, с помощью определений (2.2.11) и (2.2.42) состояние $|\phi\rangle$ представимо в виде

$$|\phi, t\rangle = \hat{J}(\hat{q}, \hat{p}, t)|\psi, t\rangle = \hat{U}(t)\hat{J}(0)|\psi\rangle \quad (2.2.55)$$

тогда применив к этому состоянию левую часть уравнения Шредингера,

$$i\frac{\partial|\phi, t\rangle}{\partial t} \quad (2.2.56)$$

получим, в силу (2.2.30)

$$i\frac{\partial|\phi, t\rangle}{\partial t} = \hat{H}\hat{U}(t)\hat{J}(0)|\psi\rangle = \hat{H}|\phi, t\rangle \quad (2.2.57)$$

Таким образом, последнее свойство интегралов движения дает нам рецепт нахождения всех решений уравнения Шредингера (т.е. нахождения всех состояний квантомеханической системы) если нам известны все ее интегралы движения.

Выражение (4.1.18) перепишем в виде уравнения

$$\hat{J}(t)\hat{U}(t) = \hat{U}(t)\hat{J}(0) \quad (2.2.58)$$

Перейдя в (4.1.19) в x -представление, пользуясь определением функции (4.1.11) перепишем это равенство в виде интегрального уравнения на функцию Грина:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} U(t, x, x') J(0, x', y) dx' = \int_{-\infty}^{+\infty} J(t, x, x') U(t, x', y) dx' \quad (2.2.59)$$

в операторном виде

$$\hat{J}(t, x) \vec{G}(x, y, t) = \lambda(x, y) \vec{G}(x, y, t) \quad (2.2.60)$$

где $\lambda(x, y) = \hat{J}^{tr}(0)_{x,y}$, выражение (4.1.21) необходимо понимать в смысле (4.0.19)–(4.0.20).

Уравнение (4.1.21) сводит задачу о нахождении функции Грина уравнения Шредингера к отысканию интегралов движения заданной физической системы. Если удалось каким нибудь образом выделить инварианты $\hat{J}(t)$, то функция Грина находится как собственные вектора интегралов движения в координатном представлении.

Продемонстрируем полученную схему на примере свободного движения с Гамильтонианом $\hat{H}_0$:

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2}$$

В этом случае у нас, очевидно имеются два независимых инварианта:

$$\hat{J}_{\hat{p}}(t) \equiv \hat{p}_0(t) = \hat{p}, \quad \hat{J}_{\hat{q}}(t) \equiv \hat{q}_0(t) = \hat{q} - \hat{p}t \quad (2.2.61)$$

Первый интеграл движения даст уравнение:

$$\hat{p}_x G(x, y, t) = p_y^{tr}(0) G(x, y, t) \quad (2.2.62)$$

отсюда,

$$i \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \right) G(x, y, t) = 0 \quad (2.2.63)$$

Решение уравнение тривиально:

$$G(x, y, t) = g(x - y, t) \quad (2.2.64)$$

где $g(x, y, t)$ произвольная гладкая функция.

Использование второго интеграла движение, дает другое дифференциальное уравнение

$$\left(x - it(-i) \frac{\partial}{\partial x} \right) G(x, y, t) = y G(x, y, t) \quad (2.2.65)$$

Обозначив $z = x - y$, перепишем уравнение в виде

$$z g(z, t) = -it \frac{\partial g}{\partial z} \quad (2.2.66)$$

Решение уравнение получается в виде

$$g(z, t) = c(t) e^{\frac{iz^2}{2t^2}} \quad (2.2.67)$$

Начальная функция Грина нормирована на единицу,

$$\lim_{t \rightarrow 0} g(z, t) = \delta(z), \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{e^{-\frac{x^2}{\varepsilon}}}{\sqrt{\pi\varepsilon}} = 1 \quad (2.2.68)$$

отсюда,

$$c(t) = \frac{1}{\sqrt{2i\pi t}}$$

и функция Грина свободной волны

$$G_{free}(x, y, t) = \frac{e^{-\frac{(x-y)^2}{2t}}}{\sqrt{2i\pi t}} \quad (2.2.69)$$

Легко проверить полученный результат решив уравнение непосредственно на функцию Грина. В случае свободной волны, Гамильтониан в координатном представлении имеет вид

$$H(x, x') = \delta(x - x') \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \quad (2.2.70)$$

и интегральное уравнение (4.1.14) принимает дифференциальный вид

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - i \frac{\partial}{\partial t} \right) G(x, y, t) = 0 \quad (2.2.71)$$

с начальным условием (3.1.12).

В случае свободного движения классическое действие S_c для траектории между событиями $t = 0, x = 0$ и $t, y = x$ имеет вид

$$S_c = \frac{x^2}{2t} \quad (2.2.72)$$

Восстановив постоянную Планка в формуле (4.1.17) из соображений размерности, функцию Грина можно представить тогда в виде,

$$G_q(x, y, t) = \frac{e^{-\frac{S_c}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi i \hbar t}} \quad (2.2.73)$$

Мы видим, что амплитуда квантового перехода задается классическим действием которое само по себе задается тем "путем" "сценарий" или траекторией по которому этот переход осуществляется. Единственное отличие от классической механики лишь в том, что теперь таких траекторий несколько, причем не все из них физически мыслимы.

Гармонический осциллятор пример простой и одновременно фундаментально важной физической модели решаемой точно. Он имеет важные применения от теории конденсированных сред до теории струн[ук. лит.]

2.3 Интегралы по траекториям

В этой главе будут даны определения концептуально важных понятий современной квантовой теории нашедших великолепное применение не только в рамках квантовой механики, но и в квантовой теории поля, важнейшей ветви квантовой физики. Сначала, продолжим развитое в предыдущей главе теорию интегралов движения которая привела к появлению в выражении для функции Грина в квантовой механике классического действия. Напомним, что в квантовой механике возможно представление в котором вся зависимость в уравнениях переносится на операторы, а состояние и волновые функции при этом можно рассмотреть стационарными. Такое представление было предложено и развито впервые *Гейзенбергом* (1901-1976). Запишем место обычных операторов координаты и импульса системы новые

$$\hat{q}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{q} \hat{U}(t), \quad \hat{p}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{p} \hat{U}(t) \quad (2.3.1)$$

Введенный таким образом оператор координаты удовлетворяет уравнению

$$i \frac{\partial \hat{q}_H(t)}{\partial t} - i[\hat{H} \hat{q}_H(t)] = 0$$

$$\begin{cases} \hat{q}_0(t) = \hat{U}(t) \hat{q} \hat{U}^\dagger(t) \\ \hat{p}_0(t) = \hat{U}(t) \hat{p} \hat{U}^\dagger(t) \end{cases} \quad (2.3.2)$$

В случае Гамильтониана не зависящего от времени явно, $\hat{U}(t) = e^{it\hat{H}}$ поэтому сравнивая системы, заключаем, что

$$\hat{q}_0(t) = \hat{q}_H(-t), \quad \hat{p}_0(t) = \hat{p}_H(-t)$$

В общем же случае, произвольного Гамильтониана, можно выводить соотношение

$$\begin{cases} \hat{q}_0(t) = \hat{U}^2(t) \hat{q}_H(t) (\hat{U}^\dagger)^2(t) \\ \hat{p}_0(t) = \hat{U}^2(t) \hat{p}_H(t) (\hat{U}^\dagger)^2(t) \end{cases} \quad (2.3.3)$$

У нас появилась способ определения функции Грина для квантовых систем. Для этого, оказывается нам достаточно определить сначала классические траектории системы

$$\begin{pmatrix} p(t) \\ q(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_{11}(t) & \lambda_{12}(t) \\ \lambda_{21}(t) & \lambda_{22}(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_0 \\ q_0 \end{pmatrix} \quad (2.3.4)$$

и далее проквантовать их, таким образом, чтобы можно было выделить соответствующие интегралы движения. Рассмотрим гармонический осциллятор с Гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{\hat{q}^2}{2}$$

Введем следующие операторы

$$\begin{cases} \hat{p}_0(t) = \hat{p} \cos t + \hat{q} \sin t \\ \hat{q}_0(t) = -\hat{p} \sin t + \hat{q} \cos t \end{cases} \quad (2.3.5)$$

В классической механике место операторов мы писали бы

$$\begin{pmatrix} p_0(t) \\ q_0(t) \end{pmatrix} = \hat{\Lambda}_{osc}(t) \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} \quad (2.3.6)$$

где матрица

$$\hat{\Lambda}_{osc}(t) = \begin{pmatrix} \cos t & \sin t \\ -\sin t & \cos t \end{pmatrix} \quad (2.3.7)$$

описывает эволюцию гармонического осциллятора.

Система уравнений на функцию Грина квантового гармонического осциллятора имеет вид

$$\begin{cases} \hat{p}_0(t)_x G_{osc}(x, y, t) = p_0^{tr}(t=0)_y G_{osc}(x, y, t) \\ \hat{q}_0(t)_x G_{osc}(x, y, t) = q_0^{tr}(t=0)_y G_{osc}(x, y, t) \end{cases} \quad (2.3.8)$$

или,

$$\begin{cases} -i \cos t \frac{\partial}{\partial x} G(x, y, t) + x \sin t G(x, y, t) = i \frac{\partial}{\partial y} G(x, y, t) \\ i \sin t \frac{\partial}{\partial x} G(x, y, t) + x \cos t G(x, y, t) = y G(x, y, t) \end{cases} \quad (2.3.9)$$

Решение системы (3.2.9) ищем в виде

$$G(x, y, t) = N(t) e^{a(t)x^2 + b(t)y^2 + c(t)xy} \quad (2.3.10)$$

Подставив функцию (2.3.10) в систему (2.3.9) получаем,

$$N(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \sin t}} e^{\xi(t)}, \quad a(t) = b(t) = \frac{i}{2} \cot t, \quad c(t) = -\frac{i}{\sin t}$$

где $\xi(t)$ не имеющая физический смысл фаза, которая не определяется системой (3.2.9). Для выяснения фазы которая остается все еще неопределенной, необходимо вставить полученное решение в уравнение Шредингера

$$i \frac{\partial}{\partial t} G(x, y, t) = \hat{H}_x G(x, y, t) \quad (2.3.11)$$

т.е. решить уравнение

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - i \frac{\partial}{\partial t} \right) G(x, y, t) = 0$$

Функция Грина гармонического осциллятора получается в виде

$$G_{osc}(x, y, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \sin t}} e^{\frac{i \operatorname{ctg} t}{2} \left(x^2 + y^2 - \frac{2xy}{\cos t} \right)} \quad (2.3.12)$$

Фейнман (1918–1988) предложил способ построения функции Грина как хронологическое умножение функций Грина описывающие свободное движение на достаточно малых участках "фазовых траекторий".

$$G(x, y, t_2, t_1) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{j=1}^N \int_{X_j} G(x_j, x_{j-1}, t_j, t_{j-1}) D X_j = \int_P D(y, t) e^{\frac{i S_c}{\hbar}} \quad (2.3.13)$$

$$x_N = x, \quad x_1 = y, \quad t_n = t_{fin}, \quad t_1 = t_{in} \quad (2.3.14)$$

Применим полученные результаты к задаче о нахождении энергии и других наблюдаемых в системе в термостате. Введем температуру T . Если совершить формальную замену

$$t \longrightarrow -\frac{i}{T} \equiv -i\beta$$

где мы ввели новый параметр β .

то можно сразу написать выражение для статистического оператора

$$\hat{\rho}_{st} = \frac{e^{-\beta\hat{H}}}{Z} \quad (2.3.15)$$

Условие нормировки оператора плотности определяет *статистический вес*

$$Z = Tr[e^{-\beta\hat{H}}] = \int_{-\infty}^{+\infty} G(x, x, \beta) dx \quad (2.3.16)$$

$$Z = Tr[e^{-\beta(\frac{1}{2} + \hat{n})}] = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(\frac{1}{2} + n)} = \frac{1}{2} \frac{1}{\sinh \frac{\beta}{2}} \quad (2.3.17)$$

Вычисления быстрее производятся если ввести новую переменную γ связанной с β формулами

$$\gamma = e^{\frac{\beta}{2}}, \quad e^{-\frac{\beta}{2}} \frac{\partial}{\partial \beta} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \gamma}$$

Статистический вес во всех трех переменных имеет вид

$$Z = \frac{1}{\gamma - 1} = \frac{1}{e^{\frac{\beta}{2}} - 1} = \frac{1}{e^{\frac{1}{2T}} - 1}$$

Энергия системы в n -ом энергетическом уровне дается выражением

$$E_n = Tr[e^{-\beta\hat{H}} \hat{H}] = -\frac{\partial}{\partial \beta} Tr[e^{-\beta\hat{H}}] = -\frac{\partial Z}{\partial \beta} = \gamma \cdot \frac{1}{2} \frac{1}{(\gamma - 1)^2} = T^2 \frac{\partial Z}{\partial T} \quad (2.3.18)$$

Среднее число частиц на n -ом энергетическом уровне т.е. имеющих энергию E_n

$$N_n = e^{-\frac{\beta}{2}} Tr[\hat{n} e^{-\beta\hat{n}}] = -e^{-\frac{\beta}{2}} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{1}{2} \frac{\partial Z}{\partial \gamma} = \frac{1}{2} \frac{1}{(\gamma - 1)^2} \quad (2.3.19)$$

$$\hat{A} = \sum_n c_n \hat{\Omega}_n \quad (2.3.20)$$

$$\langle \hat{A}^\dagger \hat{A} \rangle = Tr(\hat{A} \hat{\rho} \hat{A}^\dagger) \quad (2.3.21)$$

Среднее значение тогда представится в виде

$$\langle \hat{A}^\dagger \hat{A} \rangle = \sum_{nm} \langle \hat{\Omega}_m | \hat{\Omega}_n \rangle c_n c_m^* = \sum_{nm} \Sigma_{mn} c_n c_m^* \quad (2.3.22)$$

где средние $\langle \hat{\Omega}_m^\dagger \hat{\Omega}_n \rangle$ составляют матрицы Σ_{mn} описывающая корреляции или связи между различными квантомеханическими наблюдаемыми. Если рассматриваемая система задается набором операторов импульсов и координат частиц, роль операторов Ω_n играют операторы $\hat{q}_n$ и $\hat{p}_n$.

Для системы с одним импульсом и координат, можно ввести следующие *корреляционные величины*

$$\sigma_{qq} = \langle \hat{q}^2 \rangle - \langle \hat{q} \rangle^2, \quad \sigma_{pp} = \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2, \quad \sigma_{qp} = \langle \frac{\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q}}{2} \rangle - \langle \hat{q} \rangle \langle \hat{p} \rangle = \sigma_{pq} \quad (2.3.23)$$

Получаем матрицу $\Sigma_{p,q}$ которая должна быть положительно определена

$$\Sigma_{p,q} = \begin{pmatrix} \sigma_{qq} & \sigma_{qp} \\ \sigma_{pq} & \sigma_{pp} \end{pmatrix} + \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.3.24)$$

Применяя известные *критерий Сильвестра* для знакопостоянных матриц, получаем следующие *соотношения неопределенностей Шредингера-Робертсона*

$$\sigma_{qq} \geq 0, \quad \sigma_{pp} \geq 0, \quad \sigma_{qq}\sigma_{pp} \geq \frac{\hbar^2}{4} + \sigma_{pq}^2 \quad (2.3.25)$$

Введем величину

$$r_{pq} = \frac{\sigma_{pq}}{\sqrt{\sigma_{pp}\sigma_{qq}}} \quad (2.3.26)$$

и ассоциируем с ним *эффективную "постоянную" Планка $\hbar_{ef}$* :

$$\hbar_{ef}^2 = \frac{\hbar^2}{1 - r_{pq}^2} \quad (2.3.27)$$

Соотношение неопределенностей перепишется тогда в виде

$$\sigma_{qq}\sigma_{pp} \geq \frac{\hbar^2}{4} \cdot \frac{1}{1 - r_{pq}^2} \equiv \frac{\hbar_{ef}^2}{4} \quad (2.3.28)$$

Мы видим, что в случае больших корреляций т.е. при величине r_{pq} близкой к единице, эффективная постоянная Планка подрастает и квантовые эффекты становятся существенными в системе. Плотность распределения вероятностей для координаты и импульса системы даются Гауссианами

$$P(q) = \frac{e^{-\frac{(q - \bar{q})^2}{2\sigma_{qq}}}}{\sqrt{2\pi\sigma_{qq}}}, \quad P(p) = \frac{e^{-\frac{(p - \bar{p})^2}{2\sigma_{pp}}}}{\sqrt{2\pi\sigma_{pp}}} \quad (2.3.29)$$

Построенная нами схема легко переносится на системы из многих частиц. Возьмем, например две частицы с обобщенными координат-импульсами $\hat{q}_1, \hat{p}_1$ и $\hat{q}_2, \hat{p}_2$. Место (3.2.8) мы тогда получим уже четырехрядную матрицу корреляций в системе

$$\hat{\Sigma}_{p_1, q_1, p_2, q_2} = \begin{pmatrix} \sigma_{q_1 q_1} & \sigma_{q_1 q_2} & \sigma_{q_1 p_1} & \sigma_{q_1 p_2} \\ \sigma_{q_2 q_1} & \sigma_{q_2 q_2} & \sigma_{q_2 p_1} & \sigma_{q_2 p_2} \\ \sigma_{p_1 q_1} & \sigma_{p_1 q_2} & \sigma_{p_1 p_1} & \sigma_{p_1 p_2} \\ \sigma_{p_2 q_1} & \sigma_{p_2 q_2} & \sigma_{p_2 p_1} & \sigma_{p_2 p_2} \end{pmatrix} \quad (2.3.30)$$

Если мы теперь хотим восстановить размерность в полученных формулах, достаточно написать Гамильтониан осциллятора в виде

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{q}^2}{2} \quad (2.3.31)$$

Составляя далее единственно возможную величину размерности длины и импульса

$$l = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad p = \sqrt{\hbar m\omega} \quad (2.3.32)$$

преобразования (3.2.5) перепишутся в виде

$$\begin{cases} \hat{p}_0(t) = \hat{p} \cos \omega t + \frac{p}{l} \hat{q} \sin \omega t \\ \hat{q}_0(t) = -\frac{p}{l} \hat{p} \sin \omega t + \hat{q} \cos \omega t \end{cases} \quad (2.3.33)$$

Функции Грина для свободной волны и осциллятора будут иметь вид

$$G_{free}(x, y, t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} e^{-\frac{im(x-y)^2}{2\hbar t}}, \quad G_{osc}(x, y, t) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega t}} e^{\frac{im\omega}{2\hbar} \left(\operatorname{ctg} \omega t (x^2 + y^2) - \frac{2xy}{\sin \omega t} \right)} \quad (2.3.34)$$

2.4 Томограммы классических состояний

Положим теперь обратно $s = 1$ и рассмотрим функцию

$$w(x, \mu, \nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \varrho(q, p) \delta(x - \mu q - \nu p) dq dp \quad (2.4.1)$$

где μ, ν некоторые действительные параметры. Функция (1.1.1) называется *томограммой классического состояния* $\varrho(q, p)$ и как видно из ее определения обладает свойствами

1. Томограмма $w(x, \mu, \nu)$ классических состояний неотрицательна всюду на фазовой плоскости

$$w(x, \mu, \nu) \geq 0 \quad (2.4.2)$$

2. Томограмма $w(x, \mu, \nu)$ нормирована на единицу

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} w(x, \mu, \nu) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - \mu q - \nu p) dx \int_{-\infty}^{+\infty} \varrho(q, p) dq dp \quad (2.4.3)$$

В соответствии с определением плотности распределения вероятности классических состояний, из свойств вытекает, что функция томограмма $w(x, \mu, \nu)$ сама есть некая плотность вероятности.

Из формулы (1.3.1) видно, что отличные от нуля вклады в томограмму дают лишь те траектории для которых

$$x = q \cos \theta + p \sin \theta \quad (2.4.4)$$

Иными словами, должно быть

$$\begin{cases} q = x \cos \theta \\ p = x \sin \theta \end{cases} \quad (2.4.5)$$

Параметризация (1.3.5) позволяет нам перейти от томограммы $w(x, \mu, \nu)$ к некой новой томограмме $\pi_x(\theta)$, причем

$$w(x, 1, 0) = \pi_x(\theta = 0), \quad w(x, 0, 1) = \pi_p(\theta = \frac{\pi}{2}) \quad (2.4.6)$$

Смысл индексов x и p в формуле (2.4.6) разъясняет картина. В точке $\theta = 0$ томограмма мерит различные вероятности нахождения системы в координате x . При повороте системы на угол $\frac{\pi}{2}$ томограмма мерит вероятности распределения значения импульса системы. В общем же случае, томограмма $w(x, \theta)$ мерит распределение координаты (обобщенной) в повернутой системе координат.

Если бы мы наряду с преобразованием (2.4.4) рассмотрели бы также преобразование по импульсу системы т.е.

$$\begin{cases} x = q \cos \theta + p \sin \theta \\ p_x = -\sin \theta q + p \cos \theta \end{cases} \quad (2.4.7)$$

то оно имело бы смысл линейных канонических преобразований сохраняющих как известно, скобки Пуассона

$$\{q, p\} = \{x, p_x\} \quad (2.4.8)$$

Линейные канонические преобразования обобщенных координат и импульсов принято называть *симплектическими преобразованиями*. Поэтому томограмму (2.4.1) иногда также называют симплектической томограммой, чтобы отличить от других томограмм

Из свойств δ -функции следует, что томограмма $w(x, \mu, \nu)$ однородная функция порядка -1 .

$$w(\lambda x, \lambda \mu, \lambda \nu) = \frac{1}{|\lambda|} w(x, \mu, \nu) \quad (2.4.9)$$

Возникает важный вопрос, существует ли обратное преобразование $w(x, \mu, \nu) \rightarrow \varrho(q, p)$?

$$f(q, p) = \frac{1}{2\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} w(x, \mu, \nu) e^{i(x-\mu q-\nu p)} dx d\mu d\nu \quad (2.4.10)$$

Выведем уравнение которому удовлетворяет томограмма $w(x, \mu, \nu, t)$. Для этого необходимо в кинетическом уравнении Лиувилля перейти к переменным x, μ, ν, t .

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial q} \longrightarrow \mu \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial p} \longrightarrow \nu \frac{\partial}{\partial x} \\ q \longrightarrow -\frac{\partial}{\partial \mu} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^{-1} \\ p \longrightarrow -\frac{\partial}{\partial \nu} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^{-1} \end{array} \right. \quad (2.4.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} w(x, \mu, \nu, t) - \mu \frac{\partial}{\partial \nu} w(x, \mu, \nu, t) + \nu U' \left(-\frac{\partial}{\partial \mu} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^{-1} \right) \frac{\partial}{\partial x} w(x, \mu, \nu, t) = 0 \quad (2.4.12)$$

В случае гармонического осциллятора $U(q) = \frac{q^2}{2}$ и уравнение для томограммы гласит

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \mu \frac{\partial}{\partial \nu} + \nu \frac{\partial}{\partial \mu} \right) w_{osc}(x, \mu, \nu, t) = 0 \quad (2.4.13)$$

2.5 Томограммы квантовых состояний

Симплектическое преобразование

$$w(x, \mu, \nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} W(q, p) \delta(x - \mu q - \nu p) dq dp = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} W(q, p) e^{ik(x - \mu q - \nu p)} dk dq dp \quad (2.5.1)$$

называется *квантовой томограммой* или *компонентой Радона* (1887–1956) *функции Вигнера*. Фактически мы построили два последующих отображения, сначала волновой функции (в координатном представлении) $\psi(q)$ в функцию Вигнера $W(p, q)$ а затем функцию Вигнера $W(p, q)$ в томограмму $w(x, \mu, \nu)$.

Легко доказать, что квантовая томограмма обладает свойствами некой плотности распределения вероятностей различных состояний квантовой системы. Действительно,

1. Квантовая томограмма системы всюду положительна на фазовой плоскости, поскольку в общем случае

$$w(x, \mu, \nu) = \frac{1}{2\pi} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(y) e^{i\left(\frac{\mu y^2}{2\nu} - \frac{xy}{\nu}\right)} dy \right|^2 \geq 0 \quad (2.5.2)$$

2. Квантовая томограмма нормирована на единицу.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} W(p, q) \frac{dq dp}{2\pi} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(u) \psi(q + \frac{u}{2}) \psi^*(q - \frac{u}{2}) du dq = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dq = 1 \quad (2.5.3)(2.5.4)$$

Различные состояния системы определяются распределением вероятности значений стохастической переменной x .

$$\begin{cases} \mu = s \cos \theta \\ \nu = s^{-1} \sin \theta \end{cases} \quad (2.5.5)$$

Введенное нами функция Грина позволяет нам прогнозировать квантовые состояния системы в любой момент времени по начальному состоянию системы. В случае свободного движения и для осциллятора мы смогли даже точно определить эту функцию. Например, все состояния квантового осциллятора задаются формулой

$$\psi_{osc}(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} G_{osc}(x, y, t) \psi_{osc}(y) dy, \quad \frac{m\omega}{\hbar} = 1 \quad (2.5.6)$$

где функция Грина имеет вид

$$G_{osc}(x, y, t) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega t}} e^{i \frac{m\omega}{2\hbar} \left(\text{ctg } \omega t (x^2 + y^2) - \frac{2xy}{\sin \omega t} \right)} \quad (2.5.7)$$

Преобразования Фурье (1768–1830) определяются формулами

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi(y) e^{ixy} dy, \quad \Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(y) e^{-ixy} dy, \quad (2.5.8)$$

Преобразование известно как *дробное преобразование Фурье* ²³. Изучим по-глубже свойство унитарности оператора эволюции и перепишем соотношение для функции Грина в виде

²³ Это название связано с тем, что

$$\int_{-\infty}^{+\infty} G^*(y', x, t) G(y', y, t) dy' = \delta(x - y) \quad (2.5.9)$$

$$\Phi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\frac{(x-y)^2}{2t}}}{\sqrt{2\pi it}} dy \quad (2.5.10)$$

Интеграл Френеля (1788-1827)

$$\omega(x, \mu, \nu) = \frac{1}{|2\pi\nu|} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(y) e^{\frac{i}{2\nu}(\mu y^2 - 2xy)} dy \right|^2 \quad (2.5.11)$$

Если мы теперь совершим преобразование

$$\begin{cases} \mu = \cos t \\ \nu = \sin t \end{cases} \quad (2.5.12)$$

выражение для томограммы описывающей состояние $|\psi\rangle$ примет вид

$$\omega(x, \mu, \nu) = \frac{1}{|2\pi i \sin t|} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{ictgt(x^2 + y^2)}{2} - \frac{ixy}{\sin t}} \psi(y) dy \right|^2 \quad (2.5.13)$$

Подынтегральное выражение есть ни что иное как действие функции Грина для квантового осциллятора на начальную волновую функцию. Поэтому соотношение можно представить в виде, пригодное для физической интерпретации:

$$\omega_\psi(x, t) = |\psi(x, t)|^2 \quad (2.5.14)$$

Функция $\omega_\psi(x, t)$ называется *оптической томограммой*. Формула означает, что измеряя амплитуды волновой функции $|\psi(x, t)|^2$ во все времена²⁴ существования физической системы мы можем полностью восстановить начальную волновую функцию. Таким образом, в случае квантового осциллятора нет физической и даже математической необходимости в введении искусственного понятия волновой функции состояния, а можно описать систему и все ее возможные состояния прямо вероятностью пребывания ее в тех или иных состояний.

Можно было бы думать, что преобразование (3.3.6) не полностью переносит информацию содержащуюся в симплектической томограмме в оптическую томограмму. На самом деле никакой потери информации нет из-за общего свойства однородности томмографической функции

$$\omega(x, \lambda\mu, \lambda\nu) = \frac{1}{|\lambda|} \omega(x, \mu, \nu) \quad (2.5.15)$$

$$\omega(x, \mu, \nu) = \omega(x, \sqrt{\mu^2 + \nu^2} \cos t, \sqrt{\mu^2 + \nu^2} \sin t) = \frac{1}{\sqrt{\mu^2 + \nu^2}} \omega_{opt}(x', t), \quad x' = \frac{x}{\sqrt{\mu^2 + \nu^2}} \quad (2.5.16)$$

Следовательно,

$$\sqrt{\mu^2 + \nu^2} \omega_{sim}(x, \mu, \nu) = \omega_{opt}(x', t) \quad (2.5.17)$$

Таким образом можно из оптической томограммы получить и обычную симплектическую томограмму по формуле

²⁴На самом деле, достаточно ограничиться одним периодом колебаний осциллятора

$$\omega_{sim}(x, \mu, \nu) = \frac{1}{\sqrt{\mu^2 + \nu^2}} \omega_{opt}\left(\frac{x}{\sqrt{\mu^2 + \nu^2}}, \arctan \frac{\nu}{\mu}\right) \quad (2.5.18)$$

Можем получить еще одно представление для томограммы используемое в приложениях. Для этого перепишем симплектическую томограмму в виде

$$\omega_{sim}(x, \mu, \nu) = \omega_{sim}\left(\mu \cdot \frac{x}{\mu}, 1, \mu \cdot \frac{\nu}{\mu}\right) = \frac{1}{\mu} \omega_{sim}\left(\frac{x}{\mu}, 1, \frac{\nu}{\mu}\right) \quad (2.5.19)$$

Но подставив в выражение для томограммы $\mu = 1$ получим,

$$\omega_{sim}(x, 1, \nu) = \frac{1}{\left(\sqrt{2\pi i |\nu|}\right)^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(y) e^{\frac{i(x-y)^2}{2\nu}} dy \right|^2 \equiv |\psi(t, x)|^2 \quad (2.5.20)$$

Положив $\nu = t$ мы получаем функцию Грина и волновую функцию свободной волны. Опять, измерив концентрацию конденсата мы имеем возможность восстановить начальную функцию конденсата. Таким образом, оптическая томограмма есть результат дробного Фурье-преобразования волновой функции чистого состояния.

Соотношение Шредингера-Робертсона (1903-1961) в томографическом представлении

Паули (1900–1958), в 1927 году предложил следующую проблему известную впоследствии как *задачу Паули*. Пусть нам известно распределение вероятности какой-либо квантовой системы по координатам и импульсам.

$$\mathcal{P}(x) = |\psi(x)|^2, \quad \mathcal{P}(p) = |\psi(p)|^2 \quad (2.5.21)$$

Можно ли зная эти распределения восстановить вид волновой функции в координатном представлении т.е. явный вид функции $\psi(x)$? На языке томограмм, это означает, что нам известны две томограммы

$$\omega_{\psi}(x, 1, 0) = |\psi(x)|^2, \quad \omega_{\psi}(x, 0, 1) = |\psi(p)|^2 \quad (2.5.22)$$

Оказывается, что этого сделать в общем случае нельзя о чем свидетельствует следующий важный пример. Возьмем две волновые функции

$$\psi_1(x) = N_1 e^{ax^2+bx}, \quad \psi_2(x) = N_2 e^{cx^2+dx} \quad (2.5.23)$$

и докажем, что можно выбрать комплексные числа a, b, c, d таким образом, что распределения вероятностей этих двух состояний будут совпадать, хотя сами эти состояния принципиально разные. Более того, эти состояния могут быть реализованы экспериментально а соответствующие распределения вероятностей измерены с высокой точностью. Эти состояния теперь известны как *сжатые состояния*. В самом деле, достаточно рассмотреть волновые функции с параметрами

$$N_1 = N_2, \quad b = d = i\beta, \quad a = c^* = -\alpha, \quad \text{Re } \alpha > 0 \quad (2.5.24)$$

Легко заметить, что для выбранных волновых функций распределение координат и импульсов равны, тогда как сами функции сильно отличаются, поскольку их скалярное произведение

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1(x) \psi_2^*(x) dx \quad (2.5.25)$$

Описание квантомеханических систем вполне эквивалентно описанию через матрицу плотности. Для того, чтобы убедиться в этом до конца, выведем систему уравнений на томограмму квантового состояния.

Правила перехода есть

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x} \longrightarrow \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial q} + ip \\ \frac{\partial}{\partial x'} \longrightarrow \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial q} - ip \\ x \longrightarrow \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial p} + q \\ x' \longrightarrow -\frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial p} + q \end{array} \right. \quad (2.5.26)$$

Окончательно получим уравнение на функцию Вигнера в виде

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + p \frac{\partial}{\partial q} - \frac{1}{i} \left(U(q - \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial p}) - U(q + \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial p}) \right) \right) W(p, q, t) = 0 \quad (2.5.27)$$

Уравнение было впервые получено Мойалем (1910-1998) и носит его имя.

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{\partial}{\partial t} + p \frac{\partial}{\partial q} - \frac{1}{i} \left(U(q - \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial p}) - U(q + \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial p}) \right) \right) W(p, q, t) = 0 \\ \left(-\frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + p^2 \right) W_E(q, p) + \left(U(q + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial p}) + U(q - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial p}) \right) W_E(q, p) = 2E W_E(q, p) \end{array} \right. \quad (2.5.28)$$

Изучим теперь томограммы спиновых состояний $\hat{\rho}$ задаваемых вектором $\vec{w}_{\hat{\rho}}(\hat{U})$

$$\vec{w}_{\hat{\rho}}(\hat{U}) = \begin{pmatrix} \langle -j | \hat{U} \hat{\rho} \hat{U}^\dagger | -j \rangle \\ \langle -j+1 | \hat{U} \hat{\rho} \hat{U}^\dagger | -j+1 \rangle \\ \dots \\ \langle j | \hat{U} \hat{\rho} \hat{U}^\dagger | j \rangle \end{pmatrix}. \quad (2.5.29)$$

Тогда, для вектора томографической вероятности кубита или просто томограмма кубита в состоянии $\hat{\rho}$ запишется в виде

$$w(m, \hat{U}) = \langle m | \hat{U}^\dagger \hat{\rho} \hat{U} | m \rangle, \quad m = \pm \frac{1}{2} \quad (2.5.30)$$

где унитарный оператор $\hat{U}(\theta, \varphi, \psi)$ поворотов кубита (спинора $j = \frac{1}{2}$) имеет вид

$$\hat{U}(\theta, \varphi, \psi) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{i \frac{\varphi + \psi}{2}} & \sin \frac{\theta}{2} e^{i \frac{\varphi - \psi}{2}} \\ -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i \frac{\varphi - \psi}{2}} & \cos \frac{\theta}{2} e^{-i \frac{\varphi + \psi}{2}} \end{pmatrix} \quad (2.5.31)$$

Матрица плотности определяется заданными состоянием и в общем случае имеет вид

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} \quad (2.5.32)$$

2.6 Сжатые когерентные состояния

Очень важный класс задач относится к ситуации, когда мы имеем дело с основным состоянием какой-либо системы в котором, нам необходимо учесть квантовые флуктуации. Оказывается можно построить простой, изящный аппарат для исследования таких ситуаций и получить в ряде случаев важные результаты вне зависимости от конкретного характера изучаемой системы. Самое общее определение основного или так называемого вакуумного состояния можно сформулировать как состояние действие на которое оператором уничтожения дается уравнением

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \quad (2.6.1)$$

Хотя соотношение (3.4.1) вытекает прямо из определения оператора уничтожения и основного состояния как состояние без частиц, мы будем его рассматривать именно как уравнение на основное состояние системы. Мы уже получили, что в координатном представлении основное состояние можно описать гауссианом

$$\langle x|0\rangle = \psi_0(x) = \frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{\sqrt[4]{\pi}} \quad (2.6.2)$$

Спрашивается каковы флуктуации величины x и p в этом состоянии? Для этого, согласно общим принципам квантовой механики мы имеем два распределения Гаусса:

$$\mathfrak{P}(x) = |\langle x|0\rangle|^2 = \frac{e^{-x^2}}{\sqrt{2\pi}}, \quad \mathfrak{P}(p) = |\langle p|0\rangle|^2 = \frac{e^{-p^2}}{\sqrt{2\pi}} \quad (2.6.3)$$

С другой стороны, сравнив эти выражения с полученными в главе общим видом дисперсии (3.2.13) для координаты и импульса системы, заключаем, что

$$\sigma_{qq} = \sigma_{pp} = \frac{1}{2} \quad (2.6.4)$$

Зададимся теперь вопросом можно ли найти такое состояние, в котором можно было бы добиться уменьшения дисперсии по одной из компонент и стало быть

$$\sigma_{qq} < \frac{1}{2} \quad (2.6.5)$$

Если такое состояние оказывается возможным, его и называют *сжатым состоянием*.

В качестве примера можно рассмотреть электромагнитное поле разложенное в виде осцилляторов всевозможных частот. Если мы выделим одну моду колебаний в электромагнитном поле с электрическим вектором $\mathbf{E} \propto \cos \omega t$ и напряжением магнитного поля $\mathbf{H} \propto \sin \omega t$, то задача подавления квантовых флуктуаций *по первой компоненте* поля $\delta \mathbf{E} \sim 0$ очень актуальна в квантовой оптике. Построенная нами модель сжатых состояний позволяет в принципе свести квантовый шум электрического вектора практически до нуля за счет подрастания шума в магнитном векторе (вторая компонента).

Задача сжатия света по первой компоненте приобрела особую роль в связи с попытками детектировать гравитационные волны т.е. очень малые (порядка 10^{-21} см) возмущения гравитационного поля.

Введем оператор сжатия для одномерного гармонического квантового осциллятора ²⁵

$$\hat{S}(\lambda) = e^{\frac{i\lambda}{2}(\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q})} = e^{\frac{\lambda}{2}((\hat{a})^2 - (\hat{a}^\dagger)^2)} \quad (2.6.6)$$

и определим сжатое когерентное состояние формулой

$$|\alpha, s\rangle = \hat{S}(\lambda)|\alpha\rangle \quad (2.6.7)$$

Оператор сжатия унитарен

$$\hat{S}^\dagger(\lambda)\hat{S}(\lambda) = \hat{S}(\lambda)\hat{S}^\dagger(\lambda) = \hat{1} \quad (2.6.8)$$

Для удобства вычислений введем следующие вспомогательные обозначения

$$\hat{S}(\lambda) = e^{\hat{\Lambda}}, \quad \hat{S}^\dagger(\lambda) = \hat{S}^{-1}(\lambda) = e^{-\hat{\Lambda}}, \quad \hat{\Lambda} = \frac{i\lambda}{2}(\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q})$$

Пользуясь тождествами

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}\hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}\hat{C}], \quad [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}\hat{B}]\hat{C} + [\hat{A}\hat{C}]\hat{B}$$

получаем ряд вспомогательных соотношений

$$[\hat{\Lambda}, \hat{q}] = \lambda\hat{q}, \quad [\hat{\Lambda}, \hat{p}] = \lambda\hat{p}$$

Затем, по формуле Бейкера-Кэмбелла-Хаусдорфа получаем

$$\hat{S}(\lambda)\hat{q}\hat{S}^{-1}(\lambda) = \hat{q} + [\hat{\Lambda}, \hat{q}] + \frac{[\hat{\Lambda}, \lambda\hat{q}]}{2!} + \frac{[\hat{\Lambda}, \lambda^2\hat{q}]}{3!} + \dots = \hat{q}(1 + \lambda + \frac{\lambda^2}{2!} + \frac{\lambda^3}{3!} + \dots) = e^\lambda\hat{q} \quad (2.6.9)$$

Аналогично,

$$\hat{S}(\lambda)\hat{p}\hat{S}^\dagger(\lambda) = \hat{p}(1 + \lambda + \frac{\lambda^2}{2!} + \frac{\lambda^3}{3!} + \dots) = e^{-\lambda}\hat{p} \quad (2.6.10)$$

Заранее ясно, что действие оператора сжатия на операторов рождения и уничтожения $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ должен сводиться к переходу к некоторым новым операторам $\hat{b}, \hat{b}^\dagger$ с сохранением бозонных коммутационного соотношения.

$$\begin{cases} \hat{S}(\lambda)\hat{a}\hat{S}^\dagger(\lambda) = \hat{b} = u\hat{a} + v\hat{a}^\dagger \\ \hat{S}(\lambda)\hat{a}^\dagger\hat{S}^\dagger(\lambda) = \hat{b}^\dagger = v^*\hat{a} + u^*\hat{a}^\dagger \end{cases} \quad (2.6.11)$$

Формулы (3.4.9) – (3.4.10) подтверждают этот результат

$$\begin{cases} \hat{S}(\lambda)\hat{a}\hat{S}^\dagger(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-\lambda}\hat{q} + ie^\lambda\hat{p}) \\ \hat{S}(\lambda)\hat{a}^\dagger\hat{S}^\dagger(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-\lambda}\hat{q} - ie^\lambda\hat{p}) \end{cases} \quad (2.6.12)$$

Сравнив (3.4.11) и (3.4.12) определяем величины u, v как функции от параметра λ входящего в определение оператора сжатия

²⁵В квантовой оптике и в квантовой теории поля можно встретить более общее определение оператора сжатия в виде

$$\hat{S}(\lambda) = e^{\frac{1}{2}(\lambda^*(\hat{a})^2 - \lambda(\hat{a}^\dagger)^2)}$$

$$\begin{cases} u = \frac{e^{-\lambda} + e^{\lambda}}{2} = \cosh \lambda \\ v = \frac{e^{\lambda} - e^{-\lambda}}{2} = \sinh \lambda \end{cases} \quad (2.6.13)$$

Таким образом переход между обычными операторами рождения и уничтожения и их "сжатыми операторами" осуществляет матрица

$$\hat{B}(\lambda) = \begin{pmatrix} \cosh \lambda & \sinh \lambda \\ \sinh \lambda & \cosh \lambda \end{pmatrix} \quad (2.6.14)$$

Эта матрица была впервые изучена *Боголюбовым* (1909 – 1992) при попытках диагонализации Гамильтониана в сверхпроводящих средах и носит его имя. Она, очевидно обладает свойством

$$\det \hat{B}(\lambda) = 1 \quad (2.6.15)$$

Само же преобразование (3.4.13) является частным случаем более общего *преобразования Боголюбова*. Преобразование Боголюбова представляет собой наиболее общее каноническое преобразование операторов рождения и уничтожения из одного базиса гармонического осциллятора к другому с сохранением коммутационных соотношений.

$$[\hat{b}\hat{b}^{\dagger}] = (|u|^2 - |v|^2)[\hat{a}\hat{a}^{\dagger}] = 1 \quad (2.6.16)$$

Откуда в общем случае следует соотношение

$$|u|^2 - |v|^2 = 1 \quad (2.6.17)$$

Теперь, мы можем подсчитать среднее число фотонов в сжатом вакууме

$$\langle 0, s | \hat{n} | 0, s \rangle = \langle 0 | \hat{S}^{\dagger}(\lambda) \hat{n} \hat{S}(\lambda) | 0 \rangle = \langle 0 | \hat{S}^{\dagger}(\lambda) \hat{a}^{\dagger} \hat{S}(\lambda) \hat{S}^{\dagger}(\lambda) \hat{a} \hat{S}(\lambda) | 0 \rangle = \sinh^2 \lambda \quad (2.6.18)$$

тогда как в обычном вакууме среднее число фотонов равно нулю. Таким образом, "сжимаемая вакуум" достаточно "сильно" мы можем в принципе неограниченно увеличить количество фотонов в нем. Мерой этой силы является простой параметр λ . Можно сказать, что модель сжатого вакуума рождает нам новые частицы как, например звуковые волны из гармонии.

Физическая система в которой возможны состояния "сжатого вакуума" описываются Гамильтонианом с переменной частотой (так называемый параметрический осциллятор)

$$\hat{H}(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2(t)\hat{q}^2}{2} \quad (2.6.19)$$

Из задачи квантового осциллятора мы помним, что нам удастся найти все решения системы, функцию Грина и вообще узнать все об осцилляторе когда нам удастся отгадать интегралы движения системы. Попробуем сконструировать интеграл движения для Гамильтониана с переменной частотой из следующих интуитивных соображений.

Если бы частота была постоянной, то как мы знаем из (3.2.15) у нас имелось бы два интеграла движения

$$\begin{cases} \hat{A}_0(t) = \frac{\hat{q}_0(t) + i\hat{p}_0(t)}{\sqrt{2}} = \hat{a}e^{it} \\ \hat{A}_0^{\dagger}(t) = \frac{\hat{q}_0(t) - i\hat{p}_0(t)}{\sqrt{2}} = \hat{a}^{\dagger}e^{-it} \end{cases} \quad (2.6.20)$$

Классическое уравнение осциллятора (например уравнение описывающее движение маятника или натянутой пружины)

$$\ddot{z}(t) + \omega^2 z(t) = 0 \quad (2.6.21)$$

имеет специфичный для него интеграл движения совпадающего с Вронскианом (1778–1853) уравнения (3.4.8)

$$J_0(t) = z_1(t)z_2^*(t) - \dot{z}_1^*(t)z_2(t) \quad (2.6.22)$$

где $z_1(t), z_2(t)$ два независимых решения уравнения (3.4.8)

Выбрав в качестве решений $\varepsilon_1^{(0)}(t) = e^{it}, \varepsilon_2^{(0)}(t) = e^{-it}$ для осциллятора с постоянной единичной частотой, видим, что операторы

$$\hat{A}(t) = \frac{i}{\sqrt{2}}(\varepsilon(t)\hat{p} - \dot{\varepsilon}(t)\hat{q}) \quad (2.6.23)$$

и

$$\hat{A}^\dagger(t) = -\frac{i}{\sqrt{2}}(\varepsilon^*(t)\hat{p} - \dot{\varepsilon}^*(t)\hat{q}) \quad (2.6.24)$$

как раз переходив в оператор $\hat{A}_0(t)$ в пределе $\omega(t) \rightarrow 1$. Подставив оператор $\hat{A}(t)$ в определение интеграла движения (3.1.18) видим, что оно действительно является интегралом движения для системы с зависящей от времени частотой. Из определения (3.4.10) вытекают также следующие его свойства

$$[\hat{A}^\dagger(t)\hat{A}(t)] = \hat{1}, \quad \hat{A}(t)|_{t=0} = \hat{a}, \quad \hat{A}^\dagger(t)|_{t=0} = \hat{a}^\dagger \quad (2.6.25)$$

Естественно изучать состояние $|0, \omega(t)\rangle$ в которое переходит основное состояние $|0\rangle$ осциллятора в результате подключения меняющегося со временем частоты $\omega(t)$. Мы определяем его согласно уравнению

$$\hat{A}(t)|0, \omega(t)\rangle = 0 \quad (2.6.26)$$

или в координатном представлении

$$\frac{i}{\sqrt{2}} \left(\varepsilon(t) \left(-i \frac{\partial}{\partial x} \right) - \dot{\varepsilon}(t)x \right) \psi_0(x, t) = 0 \quad (2.6.27)$$

По аналогии со случаем постоянной частоты, попробуем искать решение в виде

$$\psi_0(x, t) = N(t)e^{-c(t)x^2} \quad (2.6.28)$$

Подставив это выражение в уравнение на $\psi_0(x, t)$ находим

$$c(t) = \frac{i\dot{\varepsilon}(t)}{2\varepsilon(t)} \quad (2.6.29)$$

Для нахождения же виде $N(t)$ достаточно заметить, что при $\omega(t) \rightarrow 1$ она должна перейти в функцию $\frac{e^{-\frac{it}{\sqrt{4\pi}}}}{\sqrt{4\pi}}$, тогда как сама функция $\varepsilon(t)$ переходит в e^{it} . Таковой будет являться например функция

$$N(t) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt[2]{\varepsilon(t)}}, \quad \lim_{\omega(t) \rightarrow 1} N(t) = \frac{e^{-\frac{it}{2}}}{\sqrt[4]{\pi}} \quad (2.6.30)$$

Поэтому ищем решение уравнения Шредингера для системы (3.4.6) в виде

$$\psi_0(x, t) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt[2]{\varepsilon(t)}} e^{-\frac{i\dot{\varepsilon}(t)}{2\varepsilon(t)} x^2} \quad (2.6.31)$$

Подставляя его в уравнение Шредингера,

Распределение вероятности для координаты в состоянии $|0, \omega(t)\rangle$ дается выражением

$$P(x, t) = |\psi_0(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt[2]{|\varepsilon(t)|^2}} e^{-\frac{i}{2} \left(\frac{\dot{\varepsilon}(t)}{\varepsilon(t)} - \frac{\dot{\varepsilon}^*(t)}{\varepsilon^*(t)} \right) x^2} \quad (2.6.32)$$

Сравнивая полученный результат с общим видом Гауссовского распределения вероятностей (3.2.13), приходим к равенству

$$\frac{\dot{\varepsilon}(t)}{\varepsilon(t)} - \frac{\dot{\varepsilon}^*(t)}{\varepsilon^*(t)} = \frac{1}{|\varepsilon(t)|} \quad (2.6.33)$$

Упростив это выражение, получаем условие инвариантности Вронскиана:

$$W(t) = \varepsilon(t)\dot{\varepsilon}^*(t) - \varepsilon^*(t)\dot{\varepsilon}(t) \equiv inv = -2i \quad (2.6.34)$$

что и следовало ожидать.

Из выражения для распределения вероятности координаты в состоянии $|0, \omega(t)\rangle$ мы можем интерпретировать величину $\frac{1}{2}|\varepsilon(t)|^2$ как дисперсию $\sigma_{xx}(t)$ или ширину волнового пакета которая теперь оказывается функцией от времени.

Поскольку величина $\varepsilon(t)$ является решением уравнения для классического осциллятора

$$\ddot{\varepsilon}(t) + \omega^2(t)\varepsilon(t) = 0 \quad (2.6.35)$$

у нас появляется возможность создания сжатого вакуума путем подбора такой частотной характеристики $\omega(t)$ при котором существуют решения уравнения (3.4.30) для которых

$$\sigma_{xx}(t) = \frac{1}{2}|\varepsilon(t)|^2 < \frac{1}{2} \quad (2.6.36)$$

Как известно, такие решения классического осциллятора действительно существуют, например при линейно растущей частоте, так называемые функции Эри $\varepsilon(t) = Ei(t)$ имеют целые области в которых $|Ei(t)| < 1$.

Поскольку оператор $\hat{A}^\dagger(t)$ — интеграл движения, в силу теоремы о построении решений уравнения Шредингера, мы можем сконструировать различные квантовые состояния из найденного нами состояния $|\psi_0\rangle$. Построим сначала так называемые возбужденные состояния.

Состояние (2.6.30) играет роль "основного состояния" для параметрического осциллятора. Аналогами возбужденных состояний играют состояния

$$|n, t\rangle = \frac{(\hat{A}^\dagger(t))^n}{\sqrt{n!}} |\psi_0\rangle \quad (2.6.37)$$

Следующие состояния мы получим пользуясь другим интегралом движения, а именно оператором $\hat{\mathfrak{D}}(\alpha)$ сдвигающим квантовые состояния на величину α . Тот факт, что этот оператор действительно описывает интеграл движения вытекает из доказанной нами теоремы о функциях от интегралов движения и справедливости представления

$$\hat{\mathfrak{D}}(\alpha, t) = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{\alpha \hat{A}^\dagger(t)} e^{-\alpha^* \hat{A}(t)} \quad (2.6.38)$$

Таким образом в квантовом параметрическом осцилляторе должны существовать также состояния

$$|\alpha, t\rangle = \hat{\mathfrak{D}}(\alpha, t)|\psi_0\rangle \quad (2.6.39)$$

Эти состояния являются аналогами когерентных состояний в гармоническом осцилляторе с постоянной частотой. Легко найти общее выражение для этих состояний в координатном представлении

$$\psi_\alpha(q, t) = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{-\frac{i\alpha}{\sqrt{2}}(\epsilon^*(t)\hat{p} - \epsilon^*(t)\hat{q})} \psi_0(q, t) \quad (2.6.40)$$

Наконец, можно построить сжатые состояния пользуясь опять таки интегралом движения

$$\hat{S}_\lambda = e^{\frac{\lambda}{2}(\hat{A}^2(t) - (\hat{A}^\dagger(t))^2)} \quad (2.6.41)$$

Таким образом можно на опыте наблюдать состояния с одним, двумя или несколькими добавленными фотонами $|\psi_1\rangle = \hat{a}^\dagger|\psi_0\rangle$ либо когерентные состояния с добавленными фотонами²⁶ $|\psi_{\alpha,1}\rangle = \hat{a}^\dagger|\psi_{\alpha,t}\rangle$

²⁶В литературе эти состояния известны как photon added coherent states

2.7 Вопросы и задачи

3 Глава IV. Квантовая Теория Информации

Под физической информацией будем подразумевать информацию содержащуюся в определенной физической системе. Сама информация при этом имеет смысл некоторого внутреннего свойства или набора свойств системы по которым ее можно физически отличить от других систем. Поскольку набор квантовых чисел полностью определяет данное состояние системы, то можно по этой причине вообще отождествлять информацию с тем состоянием которое ее содержит. *Сфера Блоха*, qubits (quantum binary digits), квантовая логика (quantum logic),

Измерение в квантовой механике представляет собой неунитарный, нелокальный, стохастический (вероятностный) процесс вызванный измерением или наблюдениями над квантовыми системами. Неунитарность измерительного процесса в квантовой механике означает, что его нельзя представить в виде унитарного оператора из-за не сохранения вероятности системы при таком процессе.

3.1 Кубит

Грубо говоря, кубитом называется квантовая система с двумя степенями свободы или иными словами двух-уровневая квантовая система. Матрицу плотности кубита представим в виде

$$\hat{\rho} = \hat{U}_0 \hat{\rho}_d \hat{U}_0^\dagger \quad (3.1.1)$$

где $\hat{\rho}_d$ матрица плотности диагонализированная в базисе собственных векторов $\vec{u}_1^0$ и $\vec{u}_2^0$, а матрица $\hat{U}_0$ имеет вид

$$\hat{U}_0 = \begin{pmatrix} u_{11}^0 & u_{21}^0 \\ u_{21}^0 & u_{22}^0 \end{pmatrix} = || \vec{u}_1^0 \quad \vec{u}_2^0 || \quad (3.1.2)$$

Напомним, что диагональные элементы матрицы $\hat{\rho}_d$ представляют собой вероятности нахождения системы в состояниях с проекциями спина вдоль оси z равными $+\frac{1}{2}$ и $-\frac{1}{2}$ соответственно.

$$\hat{\rho}_d = \begin{pmatrix} \rho_1 & 0 \\ 0 & \rho_2 \end{pmatrix} \quad (3.1.3)$$

Собственные значения оператора плотности определяются уравнениями

$$\hat{\rho} \vec{u}_1^0 = \rho_1 \vec{u}_1^0, \quad \hat{\rho} \vec{u}_2^0 = \rho_2 \vec{u}_2^0 \quad (3.1.4)$$

Как мы выяснили в главе, томограмма квантового состояния определяет распределение вероятностей системы в повернутой системе координат. Поворотам системы координат вдоль главных осей системы на углы θ, φ, ψ соответствует унитарная матрица $\hat{U}(\mathbf{n})$. Тогда, томограмма кубита в повернутой системе имеет вид

$$w(m, \hat{U}) = \langle m | \hat{U}^\dagger \hat{\rho} \hat{U} | m \rangle = \langle m | (\hat{U} \hat{U}_0)^\dagger \hat{\rho}_d (\hat{U} \hat{U}_0) | m \rangle, \quad m = \pm \frac{1}{2} \quad (3.1.5)$$

Подставив сюда выражения для $\hat{\rho}_d$ и $\hat{U}_0$ выше, для распределение вероятностей в повернутой системе получаем

$$\begin{cases} w(\frac{1}{2}, \hat{U}) = |(\hat{U} \hat{U}_0)_{11}|^2 \rho_1 + |(\hat{U} \hat{U}_0)_{12}|^2 \rho_2 \\ w(-\frac{1}{2}, \hat{U}) = |(\hat{U} \hat{U}_0)_{21}|^2 \rho_1 + |(\hat{U} \hat{U}_0)_{22}|^2 \rho_2 \end{cases} \quad (3.1.6)$$

Обозначим $\hat{V} = \hat{U} \hat{U}_0$ и введем бистохастическую матрицу

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} |v_{11}|^2 & |v_{12}|^2 \\ |v_{21}|^2 & |v_{22}|^2 \end{pmatrix} \quad (3.1.7)$$

и стохастический вектор

$$\vec{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \end{pmatrix} \quad (3.1.8)$$

С помощью этих обозначений выражение для распределения вероятности в повернутой системе координат примет простую форму

$$\vec{w}(\hat{U}) = \hat{M}(\hat{U} \hat{U}_0) \vec{\rho} \quad (3.1.9)$$

Оператор $\hat{M}$ выполняет функцию "сглаживания" исходного "острого" распределения $\vec{\rho}$. Отсюда немедленно следует, что движение точки на симплексе снизу и вверх всегда происходит в сторону ее середины, что соответствует увеличению энтропии. В этом можно убедиться и непосредственно, написав для какого-нибудь произвольного распределения $\vec{p}$

$$\begin{cases} p_1 = m_{11}\rho_1 + m_{12}\rho_2 \\ p_1 = m_{21}\rho_1 + m_{22}\rho_2 \end{cases} \quad (3.1.10)$$

Пользуясь определениями матрицы $\hat{M}$ и вектора $\vec{\rho}$, имеем

$$p_1 - \rho_1 = 2(1 - m_{11})\left(\frac{1}{2} - \rho_1\right) > 0 \quad (3.1.11)$$

отсюда, на основании свойств (3.1.) получаем ожидаемый результат

$$p_1 > \rho_1 \quad (3.1.12)$$

Аналогично, получаем также

$$p_2 < \rho_2 \quad (3.1.13)$$

Введем так называемую томмографическую энтропию для кубита

$$H(\hat{U}) = w\left(\frac{1}{2}, \hat{U}\right) \ln w\left(\frac{1}{2}, \hat{U}\right) + w\left(-\frac{1}{2}, \hat{U}\right) \ln w\left(-\frac{1}{2}, \hat{U}\right) \quad (3.1.14)$$

Из физических соображений ясно, что томмографическая энтропия может достичь минимума только на отображении $\hat{U} = \hat{U}_0^{-1}$, поскольку оно соответствует самому острому распределению вероятности $\vec{w}(\hat{U}_0^{-1}) = \vec{\rho}$. Таким образом, должно быть

$$H(\hat{U}) = w\left(\frac{1}{2}, \hat{U}\right) \ln w\left(\frac{1}{2}, \hat{U}\right) + w\left(-\frac{1}{2}, \hat{U}\right) \ln w\left(-\frac{1}{2}, \hat{U}\right) \leq F \quad (3.1.15)$$

где

$$F = -Tr \hat{\rho} \ln \hat{\rho} = -\rho_1 \ln \rho_1 - \rho_2 \ln \rho_2 \quad (3.1.16)$$

энтропия фон Неймана.

Это утверждение формулируют в виде следующей теоремы: *Энтропия квантового состояния кубита (Энтропия фон Неймана) является минимумом томмографической энтропии.* Ясно, что эту теорему можно непосредственно распространить и на произвольные кудиты. Для этого достаточно записать оператор плотности кудита в виде

$$\hat{\rho}_{2j+1, 2j+1} = \hat{U}_0 \hat{\rho}_d \hat{U}_0^\dagger \quad (3.1.17)$$

Стохастический вектор $\vec{\rho}$ минимизирующей томмографическую энтропию представится в виде d -мерного столбца

$$\vec{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \dots \\ \rho_d \end{pmatrix} \quad (3.1.18)$$

и минимум томмографической энтропии будет равен

$$\min H = S = - \sum_{k=1}^d \rho_k \ln \rho_k \quad (3.1.19)$$

Рассмотрим функцию

$$C_{mn} = m \cdot n \quad (3.1.20)$$

$$w(\frac{1}{2}, \hat{U}) = \rho_{11} \cos^2 \frac{\beta}{2} - \rho_{22} \sin^2 \frac{\beta}{2} - \rho_{21} \cos \beta \cos \alpha$$

$$w(\frac{1}{2}, \hat{U}) = \rho_{11} - \rho_{21} \cos \beta \cos \alpha - \sin^2 \frac{\beta}{2}$$

3.2 Ответы на Вопросы и задачи

Приложение II. Различные способы определения классической и квантовой механик

Список литературы

- [1] Leonard Mandel and Emil Wolf, *"Optical Coherence and Quantum Optics"*, Cambridge University Press, Cambridge (1995); ISBN-10: 0521417112.
- [2] Малкин И.А., Манько И.В. *"Динамические симметрии и когерентные состояния квантовых систем"*, М.: Наука 1979
- [3] Фейнман Р., Хибс А. *Интегралы по траекториям*, М.: Мир, 1968
- [4] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М., *"Квантовая механика: Нерелятивистская теория"*, М.: Наука, 1989
- [5] Asher Peres, *"Quantum Theory, Concepts and Methods"*, Kluwer, 1993; ISBN 0-7923-2549-4.
- [6] R.A. Horn, C.H. Johnson *"Matrix Analysis"*, Cambridge Press, 1993; ISBN 0-7923-2549-4.
- [7] Archiv quant-ph, xxx.lanl.gov, 2006-2007 Journal of Russian Laser Research, Manko V.I., Chernago, Springer
- [8] Leslie E. Ballentine *"Quantum Mechanics: Modern Development"*, World Scientific Publishing 2000
- [9] Aspect, A., Grangier, P., and Roger, G. *"Experimental Tests of Realistic Local Theories via Bell's Theorem"*, Phys. Rev. Lett. 47, 460–463. 1981
- [10] S. Mancini, V.I. Man'ko and P. Tombesi, *Phys. Lett. A*, **213**, (1996)
- [11] Man'ko O. V., Man'ko V. I. and Marmo G. *J. Phys. A: Math. Gen.* 35 699 (2002)
- [12] V.I. Man'ko and O.V. Man'ko, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, **112**, JETP 1 (1997)
- [13] Dodonov V. V. and Man'ko V. I. 1997 *Phys. Lett. A* 229 335
- [14] V. I. Man'ko, S. S. Safonov, *Teor. Mat. Fiz.*, 112:3 467–478 (1997)
- [15] O. V. Man'ko, V. I. Man'ko and G. Marmo, *Phys. Scr.* 62 No. 6 446-452 (2000)
- [16] M. A. Man'ko, V.I. Man'ko and R.V. Mendes, *J. Russ. Laser Res.* 27 (2006) 507-532
- [17] V.I. Man'ko, G. Marmo, A. Simoni, E.C.G. Sudarshan, F. Ventriglia, *Rept. Math. Phys.*, vol.61, p.337-359 (2008)
- [18] Bell J.S., *Physics* 1, 195 (1964)
- [19] Clauser J. F., Horne M. A., Shimony A. and Holt R. A. *Phys. Rev. Lett.* 23 880 (1969)
- [20] Andreev V. A., Man'ko V. I., Man'ko O. V. and Shchukin E. V. *Theor. Math. Phys.*, 146 172 (2006)
- [21] C. Lupo, V. I. Man'ko, G. Marmo, *J.Phys.* A39 12515-12524 (2006)
- [22] C. Lupo, V. I. Man'ko, G. Marmo, *J.Phys.A* 40 99 13091-13100 (2007)
- [23] Chernega V. N., Man'ko V. I. 2007 *J. Russ. Laser Res.* 28 2
- [24] V. I. Man'ko, G. Marmo, P. Vitale, *Phys.Lett. A*. 334 1 (2005)

- [25] V. I. Man'ko, G. Marmo and P. Vitale, *Phys. Lett. A*, 334:1 1–11 (2005)
- [26] V.N. Chernega, V.I. Man'ko, *J. Russ. Laser Res.*, Volume 28, Number 2 (2007)
- [27] V. I. Man'ko, G. Marmo, A. Simoni, F. Ventriglia, *Phys.Lett.A*372:6490-6497,(2008)
- [28] Aspect, 1981-2: A. Aspect et al., *Phys. Rev. Lett.* 47, 460 (1981); 49, 91 (1982); 49, 1804 (1982)
- [29] Olga V. Man'ko, Vladimir I. Man'ko, Giuseppe Marmo, Patrizia Vitale, *Phys.Lett. A* 360 522-532 (2007)
- [30] V.I. Man'ko and G. Marmo, *Phys. Scr.*, **60** (1996)
- [31] V. I. Man'ko, G. Marmo, E. C. G. Sudarshan, F. Zaccaria *J.Russ.Laser Res.*, **24** 507-543 (2003)
- [32] William Feller, *John Wiley and Sons, Inc.* (1968)
- [33] Loran V. Akopyan and Vladimir I. Man'ko, *Journal of Russian Laser Research*, Volume 30, Number 1 / January, 2009
- [34] D. Collins, N. Gisin, N. Linden, S. Massar, S. Popescu *Phys. Rev. Lett.* **88**, 040404-1 (2002)
- [35] Matzkin A. *J. Phys. A: Math. Theor.* 41, 085303, 2008
- [36] V.I. Man'ko, G. Marmo, A. Simoni, F. Ventriglia, quant-ph/0811.4115 (2008)
- [37] A. Ibort, V.I. Man'ko, G. Marmo, A. Simoni, F. Ventriglia, quant-ph/0904.4439v1
- [38] B.S. Cirel'son *Lett. Math. Phys.*, **4**, 93, 1980
- [39] M. Asorey, P. Facchi, V.I. Man'ko, G. Marmo, S. Pascazio, E.C.G. Sudarshan *Phys. Rev. A*, **77**,042115(2008)
- [40] V.I.Man'ko, G.Marmo, C.Stornaiolo *Gen.Rel.Grav.*, **37**, 99,(2005)