

Entropia w mechanice kwantowej

Krzysztof Golec-Biernat
Instytut Fizyki Jądrowej PAN

(21 lipca 2024)

Wersja robocza nie do dystrybucji

Kraków
2021

Spis treści

1	Operatory gęstości	5
1.1	Definicja	5
1.2	Wartości średnie obserwabli	6
1.3	Stany czyste i mieszane	7
1.4	Przykład 1	8
1.5	Pomiar elementów macierzowych ρ	9
1.6	Przykład 2	10
1.7	Koherencja	11
1.8	Przykład 3	13
2	Ewolucja kwantowa	15
2.1	Równanie Liouville'a	15
2.2	Obraz Heisenberga	17
2.3	Rozwiązanie równania Liouville'a	18
2.4	Równanie Liouville'a dla spinu $1/2$	19
3	Funkcja Wignera dla spinu $1/2$	21
3.1	Konstrukcja	21
3.2	Równanie ewolucji	25
3.3	Procesy Markowa	26

4	Entropia w mechanice kwantowej	28
4.1	Entropia stanu kwantowego	28
4.2	Komentarz	29
4.3	Przykład 4	30
4.4	Replica trick	31
4.5	Entropia Tsalisa i Rényiego	33
4.6	Ewolucja unitarna a entropia	34
4.7	Dowód twierdzenia: $S(\rho_D) \geq S(\rho)$	35
5	Splątanie kwantowe	37
5.1	Stan splątany	37
5.2	Operatory gęstości podukładów X i Y	38
5.3	Rozkład Schmidta	40
5.4	Entropia splątania	42
5.5	Przykład 5	44
5.6	Ewolucja w przestrzeni $\mathcal{H}_X \otimes \mathcal{H}_Y$	45
6	Informacja kwantowa	47
6.1	Klasyczna entropia względna	47
6.2	Kwantowa entropia względna	48

Rozdział 1

Operatory gęstości

1.1 Definicja

Stany w mechanice kwantowej opisywane są liniowymi operatorami gęstości ρ działającymi w przestrzeni Hilberta \mathcal{H} ,

$$\rho : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \quad (1.1)$$

i zdefiniowanymi poprzez trzy warunki:

- hermitowskość: $\rho^\dagger = \rho$
- unormowanie śladu: $\text{Tr}\rho = 1$
- dodatnia określoność: $\rho \geq 0 \iff \forall \psi \in \mathcal{H}, \langle \psi | \rho | \psi \rangle \geq 0$

Wybierając ortonormalną i zupełną bazę stanów w przestrzeni Hilberta, $\{\phi_i\}_{i=1,2,\dots}$,

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \delta_{ij}, \quad \sum_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| = \mathbb{1} \quad (1.2)$$

otrzymujemy macierz gęstości odpowiadającą operatorowi gęstości ρ ,

$$\rho_{ij} = \langle \phi_i | \rho | \phi_j \rangle \quad (1.3)$$

Operator gęstości można zapisać przy pomocy elementów macierzy gęstości

$$\rho = \sum_{i,j} \rho_{ij} |\phi_i\rangle \langle \phi_j| \quad (1.4)$$

o czym łatwo się przekonać obliczając elementy (1.3),

$$\langle \phi_{i'} | \rho | \phi_{j'} \rangle = \sum_{i,j} \rho_{ij} \langle \phi_{i'} | \phi_i \rangle \langle \phi_j | \phi_{j'} \rangle = \sum_{i,j} \rho_{ij} \delta_{ii'} \delta_{jj'} = \rho_{i'j'} \quad (1.5)$$

Warunki definiujące operator gęstości przyjmują teraz następującą postać:

- $\rho_{ij}^* = \rho_{ji}$
- $\sum_i \rho_{ii} = 1$
- $\forall i \rho_{ii} \geq 0$

Z pierwszego warunku wynika, że elementy diagonalne macierzy gęstości są rzeczywiste: $\rho_{ii} \in \mathbb{R}$, co uzasadnia zapis dwóch pozostałych warunków.

1.2 Wartości średnie obserwabli

Niech A będzie dowolnym operatorem hermitowskim reprezentującym wielkość fizyczną (obserwabłą). Wartość średnia tej obserwabli dla układu kwantowego w stanie ρ jest dana wzorem

$$\langle A \rangle_\rho = \text{Tr}(A\rho) = \text{Tr}(\rho A) \quad (1.6)$$

Wzór ten uzasadniamy tym, że dla stanu czystego otrzymujemy relację znaną z mechaniki kwantowej

$$\langle A \rangle_\rho = \text{Tr}(A|\psi\rangle\langle\psi|) = \langle\psi|A|\psi\rangle \quad (1.7)$$

Ostatnią równość można otrzymać obliczając ślad liczony w dowolnej ortogonalnej i zupełnej bazie stanów $\{\phi_i\}$ w przestrzeni Hilberta \mathcal{H}

$$\langle A \rangle_\rho = \sum_i \langle \phi_i | A | \psi \rangle \langle \psi | \phi_i \rangle = \sum_i \langle \psi | \phi_i \rangle \langle \phi_i | A | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle \quad (1.8)$$

gdzie w ostatniej równości wykorzystaliśmy warunek zupełności stanów bazowych.

1.3 Stany czyste i mieszane

Stan czysty to stan spełniający warunek

$$\rho^2 = \rho \quad (1.9)$$

Operator gęstości jest wtedy operatorem rzutowym, który można przedstawić jako

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (1.10)$$

gdzie $\psi \in \mathcal{H}$.

Aby znaleźć taki stan zdiagonalizujemy operator ρ . W bazie stanów własnych $\{\phi_i\}$ macierz gęstości ma postać diagonalną

$$\rho_{ij} = p_i \delta_{ij} = \begin{pmatrix} p_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & p_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & p_N \end{pmatrix} \quad (1.11)$$

gdzie N to wymiar przestrzeni Hilberta. Warunek czystości stanu prowadzi do wniosku

$$p_i^2 = p_i \quad (1.12)$$

dla każdego i . Ponieważ

$$\sum_i p_i = \sum_i p_i^2 = 1 \quad (1.13)$$

stąd wniosek, że istnieje tylko jedna różna od zera liczba $p_i = 1$ w tej sumie dla pewnego stanu i . Oznacza to, że

$$\rho = |\phi_i\rangle\langle\phi_i| = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & 1 & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \quad (1.14)$$

czyli $\psi = \phi_i$ w relacji (1.10).

Zauważmy, że dla stanu czystego

$$\det \rho = 0. \quad (1.15)$$

Dla wymiaru przestrzeni Hilberta $N = 2$ to równoważny sposób definiowania stanu czystego, gdyż wtedy istnieje baza ortonormalna $|e_1\rangle, |e_2\rangle$, w której

$$\rho = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.16)$$

i stąd $\rho^2 = \rho$.

1.4 Przykład 1

Rozważmy macierz gęstości w bazie stanów

$$|e_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |e_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1.17)$$

w postaci

$$\rho = \begin{pmatrix} p_1 & 0 \\ 0 & p_2 \end{pmatrix} = p_1 |e_1\rangle\langle e_1| + p_2 |e_2\rangle\langle e_2| \quad (1.18)$$

gdzie $p_1 + p_2 = 1$. Jest to macierz gęstości stanu mieszanego będącego sumą ważoną dwóch macierzy gęstości dla stanów czystych, $|e_1\rangle$ i $|e_2\rangle$.

Nie jest to jedyna interpretacja tej macierzy gęstości. Możemy ją również zapisać w postaci

$$\rho = \frac{1}{3}(\rho_1 + \rho_2 + \rho_3) \quad (1.19)$$

gdzie $\rho_{1,2,3}$ to macierze gęstości stanów czystych. W przypadku dwuwymiarowym oznacza to, że

$$\det \rho_{1,2,3} = 0 \quad (1.20)$$

Aby skonstruować takie macierze gęstości, zapiszmy

$$\rho = \frac{1}{3} \left\{ \begin{pmatrix} p_1 & a_1 \\ a_1^* & p_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p_1 & a_2 \\ a_2^* & p_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p_1 & a_3 \\ a_3^* & p_2 \end{pmatrix} \right\} \quad (1.21)$$

gdzie liczby zespolone $a_{1,2,3}$ muszą spełniać warunki

$$|a_1|^2 = |a_2|^2 = |a_3|^2 = p_1 p_2 \quad (1.22)$$

by spełniony był warunek (1.20) oraz

$$a_1 + a_2 + a_3 = 0 \quad (1.23)$$

by otrzymać zgodność z postacią (1.18). Pierwszy warunek oznacza, że poszukiwane liczby zespolone leżą na okręgu o promieniu $\sqrt{p_1 p_2}$ w płaszczyźnie zespolonej, natomiast drugi prowadzi do wniosku, że są one trzema trzecimi pierwiastkami z jedynki $\sqrt[3]{1}$, tzn.

$$a_1 = \sqrt{p_1 p_2}, \quad a_2 = \sqrt{p_1 p_2} e^{2\pi i/3}, \quad a_3 = \sqrt{p_1 p_2} e^{4\pi i/3}, \quad (1.24)$$

gdyż

$$1 + e^{2\pi i/3} + e^{4\pi i/3} = 0 \quad (1.25)$$

W oczywisty sposób można uogólnić ten przykład na dowolne n , stosując $\sqrt[n]{1}$.

1.5 Pomiar elementów macierzowych ρ

Z twierdzenia spektralnego dla dowolnej obserwabli o dyskretnym spektrum zachodzi

$$A = \sum_k a_k |a_k\rangle\langle a_k|, \quad a_k \in \mathbb{R} \quad (1.26)$$

Licząc wartość średnią w stanie ρ otrzymujemy

$$\langle A \rangle_\rho = \text{Tr} \left(\sum_k a_k |a_k\rangle\langle a_k| \rho \right) = \sum_k a_k \text{Tr} (|a_k\rangle\langle a_k| \rho) = \sum_k a_k \langle a_k | \rho | a_k \rangle \quad (1.27)$$

Elementy diagonalne operatora gęstości ρ w bazie stanów własnych obserwabli A są prawdopodobieństwami pomiaru wartości własnej a_k ,

$$p(a_k) = \langle a_k | \rho | a_k \rangle \equiv \rho_{kk} \quad (1.28)$$

gdź otrzymujemy wtedy prawidłowy wzór dla wartości średniej pomiaru obserwabli

$$\langle A \rangle_\rho = \sum_k a_k p(a_k) \quad (1.29)$$

Mierząc więc częstości występowania w pomiarze wartości własnych a_k obserwabli A wyznaczmy prawdopodobieństwa ich występowania, a tym samym elementy diagonalne macierzy gęstości ρ_{kk} . Zauważmy, że wzór (1.28) można zapisać w formie

$$\boxed{p(a_k) = \text{Tr}(|a_k\rangle\langle a_k| \rho)} \quad (1.30)$$

Wyznaczenie elementów pozadiagonalnych, $\rho_{kl} = \langle a_k | \rho | a_l \rangle$ dla $k \neq l$, wymaga pomiaru innego zespołu obserwabli B , niekomutujących z A ,

$$[A, B] \neq 0 \quad (1.31)$$

Nie istnieje więc wspólny układ wektorów bazowych. Oznaczmy bazę wektorów własnych B przez $|b_m\rangle$ a wartości własne przez b_m . Mierząc częstości występowania wartości własnych B otrzymujemy prawdopodobieństwa

$$p(b_m) = \text{Tr}(|b_m\rangle\langle b_m| \rho) = \langle b_m | \rho | b_m \rangle \quad (1.32)$$

Podstawiając

$$\rho = \sum_{k,l} \rho_{kl} |a_k\rangle\langle a_l| \quad (1.33)$$

znajdujemy

$$p(b_m) = \sum_{k,l} \rho_{kl} \langle b_m | a_k \rangle \langle a_l | b_m \rangle \quad (1.34)$$

Wynik ten możemy zapisać w postaci

$$p(b_m) = \sum_k \rho_{kk} |\langle a_k | b_m \rangle|^2 + \sum_{k \neq l} \rho_{kl} \langle b_m | a_k \rangle \langle a_l | b_m \rangle \quad (1.35)$$

Ponieważ ρ_{kk} to wyznaczone już prawdopodobieństwa, ostatecznie otrzymujemy

$$p(b_m) = \sum_k p(a_k) |\langle a_k | b_m \rangle|^2 + \sum_{k \neq l} \rho_{kl} \langle b_m | a_k \rangle \langle a_l | b_m \rangle \quad (1.36)$$

Powtarzamy pomiary dla takiej liczby niekomutujących między sobą obserwabli, która pozwoli wyznaczyć elementy pozadiagonalne ρ_{kl} na podstawie powyższych równań.

1.6 Przykład 2

Wyznamy elementy macierze operatora gęstości spinu $1/2$ poprzez pomiar odpowiednich obserwabli. W tym celu rozważmy operator rzutu spinu na osie x, y, z dane przez macierze Pauliego

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.37)$$

Operatory te nie komutują ze sobą, gdyż

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z, \quad [\sigma_y, \sigma_z] = 2i\sigma_x, \quad [\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y \quad (1.38)$$

Każdy z tych operatorów posiada swój układ dwóch wektorów własnych do wartości własnych ± 1 , oznaczających wartość rzutu spinu na odpowiednią oś

$$|x \pm \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}, \quad |y \pm \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix} \quad (1.39)$$

oraz

$$|z + \rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |z - \rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1.40)$$

Macierz gęstości operator gęstości w bazie stanów rzutu spinu na os z to

$$\rho = \begin{pmatrix} \langle z + | \rho | z + \rangle & \langle z + | \rho | z - \rangle \\ \langle z - | \rho | z + \rangle & \langle z - | \rho | z - \rangle \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \rho_{++} & \rho_{+-} \\ \rho_{-+} & \rho_{--} \end{pmatrix} \quad (1.41)$$

gdzie

$$\rho_{++} + \rho_{--} = 1, \quad \rho_{\pm\pm} \geq 0, \quad \rho_{-+} = \rho_{+-}^* \quad (1.42)$$

Aby wyznaczyć elementy diagonalne mierzymy rzuty spinu na oś z , określając prawdopodobieństwa ich pomiaru,

$$\begin{aligned} p(z+) &= \langle z + | \rho | z + \rangle = \rho_{++} \\ p(z-) &= \langle z - | \rho | z - \rangle = \rho_{--} \end{aligned} \quad (1.43)$$

Elementy pozadiagonalne wyznaczmy mierząc rzuty spinów na inne osie. Część rzeczywistą ρ_{-+} wyznaczmy mierząc jeden z rzutów na oś x ,

$$\begin{aligned} p(x+) &= \langle x + | \rho | x + \rangle = \frac{1}{2} + \operatorname{Re} \rho_{-+} \\ p(x-) &= \langle x - | \rho | x - \rangle = \frac{1}{2} - \operatorname{Re} \rho_{-+} \end{aligned} \quad (1.44)$$

Część urojoną ρ_{-+} wyznaczmy mierząc jeden z rzutów spinu na oś y ,

$$\begin{aligned} p(y+) &= \langle y + | \rho | y + \rangle = \frac{1}{2} + \operatorname{Im} \rho_{-+} \\ p(y-) &= \langle y - | \rho | y - \rangle = \frac{1}{2} - \operatorname{Im} \rho_{-+} \end{aligned} \quad (1.45)$$

gdzie część rzeczywista i urojona to

$$\operatorname{Re} \rho_{-+} = \frac{1}{2} (\rho_{-+} + \rho_{-+}), \quad \operatorname{Im} \rho_{-+} = \frac{1}{2i} (\rho_{-+} - \rho_{-+}) \quad (1.46)$$

Z procedury tej wynika, że przy pomocy tylko pomiaru rzutu na oś z nie jesteśmy w stanie rozróżnić stanu czystego

$$\rho = \begin{pmatrix} p_1 & \rho_{12} \\ \rho_{21} & p_2 \end{pmatrix}, \quad |\rho_{12}|^2 = p_1 p_2, \quad p_1 + p_2 = 1, \quad (1.47)$$

od stanu mieszanego

$$\rho = \begin{pmatrix} p_1 & 0 \\ 0 & p_2 \end{pmatrix}. \quad (1.48)$$

W obu przypadkach dostaniemy ten sam wynik: $p(z+) = p_1$ i $p(z-) = p_2$.

1.7 Koherencja

Istnieją ograniczenia na elementy niediagonalne macierzy gęstości wynikające z nierówności Schwartza. Forma hermitowska

$$\rho(\phi, \psi) = \langle \phi | \rho | \psi \rangle \quad (1.49)$$

jest dodatnio określona, gdyż

$$\rho(\phi, \phi) = \langle \phi | \rho | \phi \rangle \geq 0 \quad \forall \phi \in \mathcal{H} \quad (1.50)$$

Rozważamy więc wielkość

$$\rho(\phi - \lambda\psi, \phi - \lambda\psi) = \rho(\phi, \phi) - \lambda\rho(\phi, \psi) - \bar{\lambda}\rho(\psi, \phi) + \lambda\bar{\lambda}\rho(\psi, \psi) \geq 0 \quad (1.51)$$

Podstawiając

$$\lambda = \frac{\rho(\psi, \phi)}{\rho(\psi, \psi)} \quad (1.52)$$

otrzymujemy nierówność Schwartza

$$|\rho(\phi, \psi)|^2 \leq \rho(\phi, \phi) \cdot \rho(\psi, \psi) \quad (1.53)$$

Tym samym dla elementów macierzowych operatora gęstości w bazie ϕ_i

$$\rho_{ij} = \langle \phi_i | \rho | \phi_j \rangle \quad (1.54)$$

otrzymujemy

$$\boxed{|\rho_{ij}|^2 \leq \rho_{ii} \rho_{jj}} \quad (1.55)$$

Nierówność (1.55) charakteryzuje stopień koherencji kwantowej.

1.8 Przykład 3

Niech wiązka cząstek będzie utworzona poprzez fizyczne zmieszanie w proporcji N_1/N_2 cząstek o spinie $\frac{1}{2}$ spolaryzowanych wzdłuż dodatnich wartości osi z i takich samych cząstek spolaryzowanych wzdłuż dodatnich wartości osi x . Stan kwantowy wiązki jest opisany przez operator gęstości

$$\rho = P_1 |z+\rangle\langle z+| + P_2 |x+\rangle\langle x+| \quad (1.56)$$

gdzie stany $|z+\rangle$ oraz $|x+\rangle$ to odpowiednio stany własne operatorów $\frac{1}{2}\sigma_z$ i $\frac{1}{2}\sigma_x$ do wartości własnych $+\frac{1}{2}$, natomiast

$$P_1 = \frac{N_1}{N_1 + N_2}, \quad P_2 = \frac{N_2}{N_1 + N_2} \quad (1.57)$$

tak, że

$$P_1 + P_2 = 1 \quad (1.58)$$

Znajdziemy macierz gęstości operatora ρ w bazie stanów $|z \pm\rangle$, wykorzystując relację wynikającą z postaci stanów własnych (1.39) i (1.40)

$$|x + \rangle = \frac{|z + \rangle + |z - \rangle}{\sqrt{2}} \quad (1.59)$$

Podstawiając ją do (1.58) otrzymujemy

$$\rho = \left(P_1 + \frac{1}{2}P_2 \right) |z + \rangle \langle z + | + \frac{1}{2}P_2 \left(|z - \rangle \langle z - | + |z + \rangle \langle z - | + |z - \rangle \langle z + | \right) \quad (1.60)$$

co prowadzi do następującej macierzy gęstości w bazie stanów $|z \pm\rangle$

$$(\rho)_{ij} = \begin{pmatrix} P_1 + P_2/2 & P_2/2 \\ P_2/2 & P_2/2 \end{pmatrix} \quad (1.61)$$

Jest to macierz hermitowska, spełniająca warunek unormowania śladu do jedynki. Nie jest to stan czysty, gdyż w ogólności

$$\frac{1}{2}P_2 (P_1 + \frac{1}{2}P_2) \neq \frac{1}{4}P_2^2 \quad (1.62)$$

Jedynie dla $P_1 = 0$ lub $P_2 = 0$ otrzymujemy wtedy stan czysty o maksymalnej koherencji ze 100% polaryzacją wzdłuż osi z lub x .

Macierz gęstości (1.63) można zdiagnozować rozwiązując równanie

$$(P_1 + \frac{1}{2}P_2 - \lambda)(\frac{1}{2}P_2 - \lambda) - \frac{1}{4}P_2^2 = 0 \quad (1.63)$$

które prowadzi do następujących wartości własnych

$$\begin{aligned} p_1 &\equiv \lambda_1 = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{1 - 2P_1P_2}) \\ p_2 &\equiv \lambda_2 = \frac{1}{2}(1 - \sqrt{1 - 2P_1P_2}) \end{aligned} \quad (1.64)$$

Pierwiastek jest zawsze rzeczywisty oraz spełniony jest warunek unormowania do jedynki

$$p_1 + p_2 = 1 \quad (1.65)$$

Otrzymujemy w ten sposób nową macierz gęstości operatora gęstości ρ ,

$$(\rho)_{ij} = \begin{pmatrix} p_1 & 0 \\ 0 & p_2 \end{pmatrix} \quad (1.66)$$

w nowej ortonormalnej bazie stanów

$$\begin{aligned} |n + \rangle &= \cos \phi |z + \rangle - \sin \phi |z - \rangle \\ |n - \rangle &= \sin \phi |z + \rangle + \cos \phi |z - \rangle \end{aligned} \quad (1.67)$$

gdzie dla $P_2 \neq 0$ mamy

$$\operatorname{tg} \phi = \frac{P_1 + \sqrt{1 - 2P_1P_2}}{P_2} \quad (1.68)$$

Operator (1.58) można więc zapisać jako niekoherentną mieszankę tych stanów

$$\rho = p_1 |n+\rangle\langle n+| + p_2 |n-\rangle\langle n-| \quad (1.69)$$

Rozdział 2

Ewolucja kwantowa

2.1 Równanie Liouville'a

Operator ewolucji w mechanice kwantowej to operator unitarny

$$U(t) = e^{-iHt/\hbar} \quad (2.1)$$

spełniający równania

$$U(t)U^\dagger(t) = U^\dagger(t)U(t) = 1 \quad (2.2)$$

Różniczkując po czasie dostajemy

$$i\hbar \frac{dU(t)}{dt} = HU(t) \quad (2.3)$$

lub sprzęgając hermitowsko obie strony

$$-i\hbar \frac{dU^\dagger(t)}{dt} = U^\dagger(t)H \quad (2.4)$$

Stąd dla dowolnego stanu kwantowego ψ otrzymujemy

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle \quad (2.5)$$

gdyż spełnione jest równania Schroedingera dla stanów

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} &= i\hbar \frac{dU(t)}{dt} |\psi(0)\rangle \\ &= HU(t)|\psi(0)\rangle \\ &= H|\psi(t)\rangle \end{aligned} \quad (2.6)$$

Z definicji (1.10) operatora gęstości dla stanu czystego otrzymujemy

$$|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| = U(t) |\psi(0)\rangle\langle\psi(0)| U^\dagger(t) \quad (2.7)$$

Stąd po uogólnieniu postulat ewolucji dowolnego operatora gęstości

$$\boxed{\rho(t) = U(t)\rho(0)U^\dagger(t)} \quad (2.8)$$

Obliczając pochodną po czasie dostajemy

$$i\hbar \frac{d\rho(t)}{dt} = i\hbar \left(\frac{dU(t)}{dt} \rho(0) U^\dagger(t) + U(t) \rho(0) \frac{dU^\dagger(t)}{dt} \right) \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned} &= H U(t) \rho(0) U^\dagger(t) - U(t) \rho(0) U^\dagger(t) H \\ &= H \rho(t) - \rho(t) H \end{aligned} \quad (2.10)$$

Stąd równanie Liouville'a dla operatorów gęstości

$$\boxed{i\hbar \frac{d\rho(t)}{dt} = [H, \rho(t)]} \quad (2.11)$$

Ważne są następujące twierdzenia:

Twierdzenie 1

Ewolucja unitarna (2.8) przeprowadza operator gęstości w operator gęstości.

Dowód. Hermitowskość $\rho(t)$ jest spełniona:

$$[\rho(t)]^\dagger = \left(U(t)\rho(0)U^\dagger(t) \right)^\dagger = U(t)\rho(0)U^\dagger(t) = \rho(t) \quad (2.12)$$

Podobnie, $\rho(t)$ jest unormowane do jedynki

$$\text{Tr}\rho(t) = \text{Tr} \left(U(t)\rho(0)U^\dagger(t) \right) = \text{Tr} \left(U^\dagger(t)U(t)\rho(0) \right) = \text{Tr}\rho(0) = 1 \quad (2.13)$$

Warunek dodatniej określoności jest także spełniony, gdyż $\forall\psi \in \mathcal{H}$

$$\begin{aligned} \langle\psi|\rho(t)|\psi\rangle &= \langle\psi|U(t)\rho(0)U^\dagger(t)|\psi\rangle \\ &= \langle U^\dagger(t)\psi|\rho(0)|U^\dagger(t)\psi\rangle \\ &= \langle\psi|\rho(0)|\psi\rangle \geq 0 \end{aligned} \quad (2.14)$$

gdzie wykorzystaliśmy unitarność operatora ewolucji.

Twierdzenie 2

Ewolucja unitarna (2.8) przeprowadza stan czysty w stan czysty.

Dowód. Policzmy

$$\begin{aligned} [\rho(t)]^2 &= U(t) \rho(0) U^\dagger(t) U(t) \rho(0) U^\dagger(t) \\ &= U(t) [\rho(0)]^2 U^\dagger(t) \\ &= U(t) \rho(0) U^\dagger(t) \\ &= \rho(t) \end{aligned} \tag{2.15}$$

gdzie wykorzystaliśmy warunek stanu czystego $[\rho(0)]^2 = \rho(0)$.

2.2 Obraz Heisenberga

Wartość średnia obserwabli A w stanie $\rho(t)$ to

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_{\rho(t)} &= \text{Tr}(\rho(t)A) \\ &= \text{Tr}(U(t)\rho(0)U^\dagger(t)A) \\ &= \text{Tr}(\rho(0)U^\dagger(t)AU(t)) \end{aligned} \tag{2.16}$$

Definiując operator

$$A_H(t) = U^\dagger(t)AU(t) \tag{2.17}$$

otrzymujemy następujący wzór na wartość średnią w obrazie Heisenberga

$$\langle A \rangle_{\rho(t)} = \text{Tr}(\rho(0)A_H(t)) = \langle A_H(t) \rangle_{\rho(0)} \tag{2.18}$$

W obrazie tym stany $\rho(0)$ nie ewoluują w czasie, natomiast ewoluują operatory $A_H(t)$.

2.3 Rozwiązanie równania Liouville'a

Rozwiążemy równanie (2.11) w przypadku hamiltonianu niezależnego od czasu. Z twierdzenia spektralnego

$$H = \sum_m E_m |m\rangle\langle m| \quad (2.19)$$

gdzie stany $|m\rangle$ tworzą bazę ortonormalną i zupełną

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn}, \quad \sum_m |m\rangle\langle m| = 1 \quad (2.20)$$

Zapiszmy równanie (2.11) w tej bazie

$$i\hbar \frac{d\rho_{kl}}{dt} = \langle k|(H\rho - \rho H)|l\rangle \quad (2.21)$$

Podstawiając (2.19) otrzymujemy

$$i\hbar \frac{d\rho_{kl}}{dt} = \sum_m E_m (\langle k|m\rangle\rho_{ml} - \rho_{km}\langle m|l\rangle) \quad (2.22)$$

Korzystając z warunku ortonormalności bazy dostajemy

$$i\hbar \frac{d\rho_{kl}}{dt} = (E_k - E_l) \rho_{kl} \quad (2.23)$$

Stąd rozwiązanie

$$\rho_{kl}(t) = e^{-i\omega_{kl}t} \rho_{kl}(0) \quad (2.24)$$

gdzie

$$\omega_{kl} = \frac{E_k - E_l}{\hbar} \quad (2.25)$$

to częstości przejść pomiędzy stanami stacjonarnymi hamiltonianu. Dla $k = l$ otrzymujemy

$$\rho_{kk}(t) = \rho_{kk}(0) \quad (2.26)$$

czyli brak ewolucji elementów diagonalnych macierzy gęstości. Ewoluują tylko elementy pozadiagonalne z $k \neq l$ o ile $E_k \neq E_l$.

2.4 Równanie Liouville'a dla spinu 1/2

Skonstruujemy macierz gęstości spinu 1/2. Najogólniejsza postać macierzy hermitowskiej w bazie stanów $|z \pm\rangle$ to

$$\rho = \frac{1}{2}(n_0 + \mathbf{n} \cdot \sigma) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} n_0 + n_3 & n_1 - in_2 \\ n_1 + in_2 & n_0 - n_3 \end{pmatrix} \quad (2.27)$$

gdzie $n_0 \in \mathbb{R}_+$, \mathbf{n} to trójwymiarowy wektor rzeczywisty, natomiast σ to układ trzech macierzy Pauliego,

$$\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3), \quad \sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) \quad (2.28)$$

Warunek unormowania śladu to

$$\text{Tr}\rho = n_0 \quad (2.29)$$

natomiast warunek dodatniej określoności macierzy oznacza, że wartości własne tej macierzy,

$$\lambda_{\pm} = n_0 \pm |\mathbf{n}|, \quad (2.30)$$

są nieujemne. Stąd warunek

$$|\mathbf{n}| \leq n_0 \quad (2.31)$$

Przy normalizacji śladu macierzy gęstości do jedynki, $n_0 = 1$. Stan czysty, $\rho^2 = \rho$, jest wtedy określony przez warunek

$$|\mathbf{n}| = 1 \quad (2.32)$$

Wartość $n_0 = 1$ przyjmiemy jednak na końcu naszych rozważań.

Najogólniejsza postać hermitowskiego hamiltonianu $H = \hbar h$ o wymiarze 2×2 to

$$h = \frac{1}{2}(h_0 + \mathbf{h} \cdot \sigma) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} h_0 + h_3 & h_1 - ih_2 \\ h_1 + ih_2 & h_0 - h_3 \end{pmatrix} \quad (2.33)$$

gdzie h_0 jest rzeczywiste, a $\mathbf{h} = (h_1, h_2, h_3)$ trójwymiarowy wektor rzeczywisty. Parametry te mają wymiar częstości: s^{-1} .

Równanie Liouville'a (2.11) z hamiltonianem H przyjmuje więc postać

$$i \frac{dn_0}{dt} + i \frac{d\mathbf{n}}{dt} \cdot \sigma = \frac{1}{2} [h_0 + \mathbf{h} \cdot \sigma, n_0 + \mathbf{n} \cdot \sigma] = \frac{1}{2} [\mathbf{h} \cdot \sigma, \mathbf{n} \cdot \sigma] \quad (2.34)$$

Licząc komutator otrzymujemy

$$[\mathbf{h} \cdot \sigma, \mathbf{n} \cdot \sigma] = n_i h_j [\sigma_i, \sigma_j] = 2i \epsilon_{ijk} h_i n_j \sigma_k = 2i (\mathbf{h} \times \mathbf{n}) \cdot \sigma \quad (2.35)$$

i stąd

$$\frac{dn_0}{dt} + \frac{d\mathbf{n}}{dt} \cdot \boldsymbol{\sigma} = (\mathbf{h} \times \mathbf{n}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2.36)$$

Ostatecznie otrzymujemy równania ewolucji w postaci:

$$\frac{dn_0}{dt} = 0, \quad (2.37)$$

co oznacza, że $n_0 = \text{const}$ oraz

$$\boxed{\frac{d\mathbf{n}}{dt} = \mathbf{h} \times \mathbf{n}} \quad (2.38)$$

Oba równania można zapisać w postaci macierzowej,

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} n_0 \\ n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -h_3 & h_2 \\ 0 & h_3 & 0 & -h_1 \\ 0 & -h_2 & h_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_0 \\ n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{pmatrix}. \quad (2.39)$$

Przykładowo, dla hamiltonianu z wektorem

$$\mathbf{h} = (0, 0, h) \quad (2.40)$$

otrzymujemy równania

$$\begin{aligned} \frac{dn_1}{dt} &= -hn_2 \\ \frac{dn_2}{dt} &= hn_1 \\ \frac{dn_3}{dt} &= 0 \end{aligned} \quad (2.41)$$

Stąd rozwiązania precesji wektora \mathbf{n} wokół osi z

$$n_1 = A \cos(ht + \phi), \quad n_2 = A \sin(ht + \phi), \quad n_3 = B \quad (2.42)$$

gdzie stałe A, B, ϕ są wyznaczone z warunków początkowych. Z warunku $|\mathbf{n}| \leq 1$ wynika

$$A^2 + B^2 \leq 1 \quad (2.43)$$

Rozdział 3

Funkcja Wignera dla spinu 1/2

3.1 Konstrukcja

Zdefiniujemy funkcję rzutów spinów na oś x oraz z , która posiada cechy łącznego rozkładu prawdopodobieństwa pomimo tego, że operatory rzutu spinu na te osie, σ_x i σ_z , nie komutują ze sobą. Poszukiwane **rzeczywiste** funkcje Wignera oznaczmy przez

$$f_{++}, \quad f_{+-}, \quad f_{-+}, \quad f_{--} \quad (3.1)$$

gdzie pierwszy symbol od lewej oznacza rzut spinu na oś z , a drugi na oś x . Chcemy by te funkcje sumowały się do jedynki

$$f_{++} + f_{+-} + f_{-+} + f_{--} = 1 \quad (3.2)$$

a także posiadały cechy łącznego rozkładu prawdopodobieństwa, tzn. sumując po drugim wskaźniku otrzymujemy rozkład brzegowy prawdopodobieństwa

$$\begin{aligned} f_{++} + f_{+-} &= p(z+) \\ f_{-+} + f_{--} &= p(z-) \end{aligned} \quad (3.3)$$

natomiast sumując po pierwszym wskaźniku otrzymujemy

$$\begin{aligned} f_{++} + f_{-+} &= p(x+) \\ f_{+-} + f_{--} &= p(x-) \end{aligned} \quad (3.4)$$

Dodatkowo chcemy by zachodziło

$$\begin{aligned} f_{++} + f_{--} &= p(y+) \\ f_{+-} + f_{-+} &= p(y-) \end{aligned} \quad (3.5)$$

Podsumowując, każda para w sumie daje dodatnio określone prawdopodobieństwo. Powstaje pytanie czy są one dodatnio określone by móc pełnić rolę łącznego rozkładu prawdopodobieństwa rzutów spinu na dwie wzajemnie prostopadłe osie.

Aby skonstruować funkcje Wignera skorzystamy z operatora gęstości ρ spinu $1/2$. W bazie stanów własnych rzutu spinu na oś z , $|z \pm \rangle$, otrzymujemy macierz gęstości

$$\rho = \begin{pmatrix} \langle z + | \rho | z + \rangle & \langle z + | \rho | z - \rangle \\ \langle z - | \rho | z + \rangle & \langle z - | \rho | z - \rangle \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \rho_{++} & \rho_{+-} \\ \rho_{-+} & \rho_{--} \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

gdzie elementy diagonalny są nieujemne oraz

$$\rho_{++} + \rho_{--} = 1 \quad (3.7)$$

Zdefiniujmy funkcje

$$\begin{aligned} f_{++} &= \frac{\langle z + | \rho | x + \rangle + \langle x + | \rho | z + \rangle}{2\sqrt{2}} + F_{++} \\ f_{+-} &= \frac{\langle z + | \rho | x - \rangle + \langle x - | \rho | z + \rangle}{2\sqrt{2}} + F_{+-} \\ f_{-+} &= \frac{\langle z - | \rho | x + \rangle + \langle x + | \rho | z - \rangle}{2\sqrt{2}} + F_{-+} \\ f_{--} &= -\frac{\langle z - | \rho | x - \rangle + \langle x - | \rho | z - \rangle}{2\sqrt{2}} + F_{--} \end{aligned} \quad (3.8)$$

Wyrażenia te są rzeczywiste pod warunkiem że funkcje $F_{\pm\pm}$ są rzeczywiste. Sumując po drugim wskaźniku oraz wykorzystując relacje

$$|z \pm \rangle = \frac{|x + \rangle \pm |x - \rangle}{\sqrt{2}} \quad (3.9)$$

otrzymujemy

$$\begin{aligned} f_{++} + f_{+-} &= \langle z + | \rho | z + \rangle + (F_{++} + F_{+-}) = p(z+) + (F_{++} + F_{+-}) \\ f_{-+} + f_{--} &= \langle z - | \rho | z - \rangle + (F_{-+} + F_{--}) = p(z-) + (F_{-+} + F_{--}) \end{aligned} \quad (3.10)$$

Stąd otrzymujemy wynik (3.3) gdy wyrażenia w nawiasie są równe zero,

$$F_{++} + F_{+-} = F_{-+} + F_{--} = 0 \quad (3.11)$$

Podobnie, sumując po pierwszym wskaźniku znajdujemy,

$$\begin{aligned} f_{++} + f_{-+} &= \langle x + | \rho | x + \rangle + (F_{++} + F_{-+}) = p(x+) + (F_{++} + F_{-+}) \\ f_{+-} + f_{--} &= \langle x - | \rho | x - \rangle + (F_{+-} + F_{--}) = p(x-) + (F_{+-} + F_{--}) \end{aligned} \quad (3.12)$$

Stąd, dostajemy wynik (3.4) gdy wyrażenia w nawiasie są równe zero,

$$F_{++} + F_{-+} = F_{+-} + F_{--} = 0 \quad (3.13)$$

Warunek unormowania do jedynki (3.2) jest spełniony, gdy

$$F_{++} + F_{+-} + F_{-+} + F_{--} = 0 \quad (3.14)$$

Biorąc pod uwagę warunki (3.11), (3.13) i (3.14) możemy zapisać

$$F_{++} = F_{--} = -F_{+-} = -F_{-+} \quad (3.15)$$

Wielkości te wyznaczymy na podstawie relacji (3.5). Licząc występujące tam kombinacje dostajemy

$$\begin{aligned} f_{++} + f_{--} &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \left\{ \langle z + |\rho|x + \rangle + \langle x + |\rho|z + \rangle \right. \\ &\quad \left. + \langle z - |\rho|x - \rangle + \langle x - |\rho|z - \rangle \right\} + (F_{++} + F_{--}) \\ f_{+-} + f_{-+} &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \left\{ \langle z + |\rho|x - \rangle + \langle x - |\rho|z + \rangle \right. \\ &\quad \left. + \langle z - |\rho|x + \rangle + \langle x + |\rho|z - \rangle \right\} + (F_{+-} + F_{-+}) \end{aligned} \quad (3.16)$$

Sprowadzając elementy macierzowe po prawej stronie do wspólnej bazy $|z \pm \rangle$ przy pomocy wzoru (3.9), znajdujemy

$$\begin{aligned} f_{++} + f_{--} &= \frac{1}{2} + F_{++} + F_{--} = p(y+) + F_{++} + F_{--} \\ f_{+-} + f_{-+} &= \frac{1}{2} + F_{+-} + F_{-+} = p(y-) + F_{+-} + F_{-+} \end{aligned} \quad (3.17)$$

Porównując z relacjami (3.5), mamy

$$\begin{aligned} F_{++} + F_{--} &= \langle y + |\rho|y + \rangle - \frac{1}{2} \\ F_{+-} + F_{-+} &= \langle y - |\rho|y - \rangle - \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (3.18)$$

Policzmy elementy macierzowe w powyższych wzorach wykorzystując wzór

$$|y \pm \rangle = \frac{|z + \rangle \pm i|z - \rangle}{\sqrt{2}}. \quad (3.19)$$

Dostaniemy

$$\langle y \pm |\rho|y \pm \rangle = \frac{1}{2} \pm \text{Im } \rho_{-+} \quad (3.20)$$

i stąd

$$\begin{aligned} F_{++} + F_{--} &= \operatorname{Im} \rho_{-+} \\ F_{+-} + F_{-+} &= -\operatorname{Im} \rho_{-+} \end{aligned} \quad (3.21)$$

Biorąc pod uwagę relacje (3.15), otrzymujemy

$$\begin{aligned} F_{++} = F_{--} &= \frac{1}{2} \operatorname{Im} \rho_{-+} \\ F_{+-} = F_{-+} &= -\frac{1}{2} \operatorname{Im} \rho_{-+} \end{aligned} \quad (3.22)$$

Ostatecznie, dostajemy następujące funkcje Wignera

$$\begin{aligned} f_{++} &= \frac{1}{2} (\rho_{++} + \operatorname{Re} \rho_{-+} + \operatorname{Im} \rho_{-+}) \\ f_{+-} &= \frac{1}{2} (\rho_{++} - \operatorname{Re} \rho_{-+} - \operatorname{Im} \rho_{-+}) \\ f_{-+} &= \frac{1}{2} (\rho_{--} + \operatorname{Re} \rho_{-+} - \operatorname{Im} \rho_{-+}) \\ f_{--} &= \frac{1}{2} (\rho_{--} - \operatorname{Re} \rho_{-+} + \operatorname{Im} \rho_{-+}) \end{aligned} \quad (3.23)$$

Z konstrukcji wynika, że relacje (3.2)-(3.5) są spełnione, a funkcje Wignera są rzeczywiste. Ponadto sumują się do jedynki

$$f_{++} + f_{+-} + f_{-+} + f_{--} = 1 \quad (3.24)$$

Nie spełniają one jednak warunku dodatniej określoności i nie mogą być traktowane jako łączny rozkład prawdopodobieństwa. Aby to wykazać rozpoczniemy od nierówności Schwartza (1.55),

$$|\rho_{+-}|^2 = (\operatorname{Re} \rho_{+-})^2 + (\operatorname{Im} \rho_{+-})^2 \leq \rho_{++}\rho_{--} \quad (3.25)$$

Z postaci

$$\rho_{+-} = R e^{i\phi} \quad \phi \in [0, 2\pi) \quad (3.26)$$

mamy

$$R \leq \sqrt{\rho_{++}\rho_{--}}, \quad (3.27)$$

Dla stanu czystego, gdy nierówność Schwartza jest wysycona, przyjmijmy

$$R = \sqrt{\rho_{++}\rho_{--}}, \quad \phi = 0 \quad (3.28)$$

Wtedy, element f_{+-} funkcji Wignera to

$$f_{+-} = \frac{1}{2} (\rho_{++} - \sqrt{\rho_{++}\rho_{--}}) = \frac{1}{2} \sqrt{\rho_{++}} (\sqrt{\rho_{++}} - \sqrt{\rho_{--}}) \quad (3.29)$$

Stąd, dla $\rho_{++} < \rho_{--}$ otrzymujemy $f_{+-} < 0$.

3.2 Równanie ewolucji

Elementy macierzy gęstości (2.27) dla spinu 1/2 są dane wzorami

$$\rho_{++} = \frac{n_0 + n_3}{2}, \quad \rho_{--} = \frac{n_0 - n_3}{2}, \quad \text{Re } \rho_{-+} = \frac{n_1}{2}, \quad \text{Im } \rho_{-+} = \frac{n_2}{2} \quad (3.30)$$

gdzie na końcu położymy $n_0 = 1$, tak by

$$\text{Tr} \rho = n_0 = 1. \quad (3.31)$$

Relacje (3.23) przyjmują teraz postać

$$\begin{aligned} f_{++} &= \frac{1}{4} (n_0 + n_1 + n_2 + n_3) \\ f_{+-} &= \frac{1}{4} (n_0 - n_1 - n_2 + n_3) \\ f_{-+} &= \frac{1}{4} (n_0 + n_1 - n_2 - n_3) \\ f_{--} &= \frac{1}{4} (n_0 - n_1 + n_2 - n_3) \end{aligned} \quad (3.32)$$

co może być zapisane w formie macierzowej

$$\begin{pmatrix} f_{++} \\ f_{+-} \\ f_{-+} \\ f_{--} \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_0 \\ n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{pmatrix} \quad (3.33)$$

podczas gdy relacja odwrotna to

$$\begin{pmatrix} n_0 \\ n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_{++} \\ f_{+-} \\ f_{-+} \\ f_{--} \end{pmatrix} \quad (3.34)$$

Różniczkując po czasie równanie (3.33) dostajemy po wykorzystaniu równania (2.39),

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} f_{++} \\ f_{+-} \\ f_{-+} \\ f_{--} \end{pmatrix} &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -h_3 & h_2 \\ 0 & h_3 & 0 & -h_1 \\ 0 & -h_2 & h_1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_0 \\ n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & h_3 - h_2 & h_1 - h_3 & h_2 - h_1 \\ 0 & -h_3 - h_2 & h_3 + h_1 & h_1 - h_2 \\ 0 & h_2 - h_3 & -h_3 - h_1 & h_1 + h_2 \\ 0 & h_3 + h_2 & h_3 - h_1 & -h_2 - h_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_0 \\ n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.35)$$

Zauważmy, że suma wyrażzeń w każdej kolumnie wynosi zero, co oznacza, że zachodzi

$$\frac{d}{dt} (f_{++} + f_{+-} + f_{-+} + f_{--}) = 0 \quad (3.36)$$

Stąd wynika zachowanie wielkości

$$f_{++} + f_{+-} + f_{-+} + f_{--} = n_0 \quad (3.37)$$

Wybierając $n_0 = 1$ otrzymujemy prawidłową normalizację macierzy gęstości ρ .

Po podstawieniu relacji odwrotnej (3.34) musimy pomnożyć macierze

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} 0 & h_3 - h_2 & h_1 - h_3 & h_2 - h_1 \\ 0 & -h_3 - h_2 & h_3 + h_1 & h_1 - h_2 \\ 0 & h_2 - h_3 & -h_3 - h_1 & h_1 + h_2 \\ 0 & h_3 + h_2 & h_3 - h_1 & -h_2 - h_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 2(h_2 - h_1) & 2(h_3 - h_2) & 2(h_1 - h_3) \\ 2(h_1 - h_2) & 0 & -2(h_1 + h_3) & 2(h_2 + h_3) \\ 2(h_2 - h_3) & 2(h_1 + h_3) & 0 & -2(h_1 + h_2) \\ 2(h_3 - h_1) & -2(h_2 + h_3) & 2(h_1 + h_2) & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.38)$$

Stąd ostatecznie otrzymujemy

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} f_{++} \\ f_{+-} \\ f_{-+} \\ f_{--} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -(h_1 - h_2) & -(h_2 - h_3) & -(h_3 - h_1) \\ (h_1 - h_2) & 0 & -(h_1 + h_3) & (h_2 + h_3) \\ (h_2 - h_3) & (h_1 + h_3) & 0 & -(h_1 + h_2) \\ (h_3 - h_1) & -(h_2 + h_3) & (h_1 + h_2) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_{++} \\ f_{+-} \\ f_{-+} \\ f_{--} \end{pmatrix} \quad (3.39)$$

Podobnie jak poprzednio suma wyrażzeń w każdej kolumnie wynosi zero, by zachowane było wyrażenie (3.37).

3.3 Procesy Markowa

Równanie (3.39) porównamy z równaniem master dla procesów Markowa z n stanami, które są obsadzone z prawdopodobieństwem p_n ,

$$\frac{dp_n}{dt} = \sum_m W_{nm} p_m - \sum_m W_{mn} p_n \quad (3.40)$$

gdzie W_{nm} to prawdopodobieństwo przejścia między stanami $m \rightarrow n$ na jednostkę czasu. Równanie master jest równaniem bilansu przejść z dowolnego stanu m do stanu

n , powiększających obsadzenie tego stanu, oraz przejść ze stanu n do dowolnego stanu m , obniżających obsadzenie stanu n . Sumując obie strony równania po n otrzymamy

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_n p_n(t) \right) = 0 \quad (3.41)$$

co oznacza zachowanie całkowite prawdopodobieństwa w czasie

$$\sum_n p_n(t) = 1 \quad (3.42)$$

Prawą stronę równania master można zapisać w formie macierzowej wprowadzając macierz

$$\mathcal{W}_{nm} = W_{nm} - \left(\sum_{m'} W_{m'n} \right) \delta_{nm} \quad (3.43)$$

Wtedy

$$\frac{dp_n}{dt} = \sum_m \mathcal{W}_{nm} p_m \quad (3.44)$$

Zauważmy, że elementy diagonalne tej macierzy wynoszą

$$\mathcal{W}_{nn} = W_{nn} - \sum_{m'} W_{m'n} = - \sum_{m' \neq n} W_{m'n} \quad (3.45)$$

natomiast wyrazy niediagonalne to

$$\mathcal{W}_{n \neq m} = W_{n \neq m} \quad (3.46)$$

Stąd suma elementów macierzy \mathcal{W}_{nn} w każdej kolumnie wynosi więc zero, by zachowane było całkowite prawdopodobieństwo. Na przykład, dla czterech stanów otrzymujemy

$$\mathcal{W}_{nm} = \begin{pmatrix} -W_{21} - W_{31} - W_{41} & W_{12} & W_{13} & W_{14} \\ W_{21} & -W_{12} - W_{32} - W_{42} & W_{23} & W_{24} \\ W_{31} & W_{32} & -W_{13} - W_{23} - W_{43} & W_{34} \\ W_{41} & W_{42} & W_{43} & -W_{14} - W_{24} - W_{34} \end{pmatrix}$$

gdzie wszystkie elementy W_{ik} są nieujemne.

Widzimy, że równanie (3.39) ma postać równania master (3.44) z czterema stanami, w którym elementy diagonalne $\mathcal{W}_{nn} = 0$. Nie jest to jednak równanie master, gdyż zarówno funkcje Wignera jak i współczynniki macierzy przejścia w tym równaniu nie są dodatnio określone.

Rozdział 4

Entropia w mechanice kwantowej

4.1 Entropia stanu kwantowego

Zdefiniujmy entropię von Neumanna S stanu kwantowego opisywanego operatorem gęstości ρ

$$S = -\text{Tr}(\rho \ln \rho) \quad (4.1)$$

przy założeniu, że $\text{Tr}\rho = 1$.

Z twierdzenia spektralnego wynika, że istnieje baza ortonormalna $\{\phi_i\}$, w której operator gęstości jest diagonalny

$$\rho = \sum_i p_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| \quad (4.2)$$

gdzie $p_i \geq 0$ oraz

$$\sum_i p_i = 1 \quad (4.3)$$

Licząc entropię w tej bazie otrzymujemy wzór

$$S = -\sum_i p_i \ln p_i \geq 0 \quad (4.4)$$

Dla układów kwantowych w przestrzeni Hilberta z przeliczalną bazą entropia von Neumana stanu ρ jest nieujemna.

Ważne jest następujące twierdzenie.

Twierdzenie 3

Entropia von Neumanna stanu czystego wynosi zero.

Dowód. Operator gęstości dla stanu czystego,

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| \tag{4.5}$$

ma tylko jedną niezerową wartość własną równą 1. Wybierając bowiem $|\psi\rangle$ jako pierwszy wektor bazowy widzimy, że (4.5) jest rozkładem spektralnym operatora ρ . Z jednoznaczności tego rozkładu wynika: $p_1 = 1$ i $p_{i>1} = 0$. Stąd entropia von Neumanna jest równa zero na podstawie wzoru (4.4).

4.2 Komentarz

Pojęcie entropii von Neumanna wymaga komentarza, mając w tle rozważań entropię Boltzmanną zdefiniowaną dla układów klasycznych. Niezerowa entropia Boltzmanną, zwana także **entropią gruboziarnistą**, pojawia się w wyniku niepełnej informacji o układzie klasycznym, jaką jest dokładna znajomość położenia i pędów wszystkich cząstek układu. Jeżeli znamy je jedynie z pewną dokładnością to pojawia się ich rozkład prawdopodobieństwa w układach, który pozwala zdefiniować niemalejącą w czasie wielkość będącą entropią Boltzmanną.

W przypadku mechaniki kwantowej, stany czyste określają maksimum informacji, która jest dostępna w eksperymencie. Pomimo, probabilistycznego charakteru wyników pomiarów w mechanice kwantowej jest to stwierdzenie o charakterze fundamentalnym, które nie wynika z ograniczeń pomiarowych. Stąd równa zero entropia von Neumann stanu czystego.

Stan mieszany zawiera jednak niepełną informację o układach kwantowych. W Przykładzie 1 rozważyliśmy dwie wiązki kwantowych cząstek, które zostały zmieszane w określonej proporcji. Proces klasycznie rozumianego mieszania jest tutaj elementem prowadzącym do utraty pełnej informacji o wypadkowym układzie kwantowym jakim są dwie zmieszane wiązki. Nie sposób, bez naruszenia drugiej zasady termodynamiki, rozseparować je na dwa początkowe układy kwantowe. Stąd niezerowa entropia von Neumanna.

Istnieje drugi, bardziej fundamentalny, mechanizm prowadzący do niezerowej entropii von Neumanna, będącej przejawem utraty pełnej informacji o układzie kwantowym. Rozważmy **stan czysty** układu kwantowego, który w bazie zupełnego układu obserwabli przyjmuje postać macierzy gęstości

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \dots & \rho_{1n} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \dots & \rho_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \rho_{n1} & \rho_{n2} & \dots & \rho_{nn} \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

z niediagonalnymi elementami spełniającymi związek maksymalnej interferencji, określony przez równość w relacji (1.55). Entropia von Neumanna stanu czystego ρ wynosi zero:

$$S(\rho) = 0 \quad (4.7)$$

Jeżeli umieścimy taki układ w makroskopowym otoczeniu, z którym on oddziałuje, następuje **dekoherencja** polegająca na utracie efektu kwantowych interferencji i znikaniu pozadiagonalnych elementów macierzy gęstości stanu czystego. W wyniku tego otrzymujemy **stan mieszany** ρ_D układu z diagonalną macierzą gęstości,

$$\rho_D = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \rho_{22} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \rho_{nn} \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

Prowadzi to do niezerowej entropii von Neumanna

$$S(\rho_D) = - \sum_k \rho_{kk} \ln \rho_{kk} > S(\rho) = 0 \quad (4.9)$$

Stan ρ nie musi być stanem czystym. Prawdziwe jest bowiem twierdzenie, że

$$S(\rho_D) \geq S(\rho) \quad (4.10)$$

którego szczególnym przypadkiem jest rozważana wyżej sytuacja. Dowód twierdzenia (4.10) przedstawimy w rozdziale 4.7.

4.3 Przykład 4

W Przykładzie 3 rozważyliśmy stan mieszany dwóch wiązek cząstek o spinie 1/2 spolaryzowanych dodatnio wzdłuż osi z oraz x i zmieszanych w proporcji P_1/P_2 ,

$$\rho = P_1 |z+\rangle\langle z+| + P_2 |x+\rangle\langle x+| \quad (4.11)$$

gdzie

$$P_1 + P_2 = 1 \quad (4.12)$$

W bazie stanów własnych $|z_{\pm}\rangle$ macierz gęstości operatora gęstości ρ przyjmuje postać

$$\rho_{ij} = \begin{pmatrix} P_1 + P_2/2 & P_2/2 \\ P_2/2 & P_2/2 \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

Po zdiagonalizowaniu otrzymujemy

$$\rho_{ij} = \begin{pmatrix} p_+ & 0 \\ 0 & p_- \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

gdzie

$$p_{\pm} = \frac{1}{2} \left(1 \pm \sqrt{1 - 2P_1P_2} \right) \quad (4.15)$$

Stąd entropia von Neumanna stanu ρ

$$S = -p_+ \ln p_+ - p_- \ln p_- \quad (4.16)$$

Dla $P_1 = 1$ i $P_2 = 0$ otrzymujemy stan czysty, dla którego

$$p_+ = 1, \quad p_- = 0 \quad (4.17)$$

a entropia $S = 0$. Podobnie dla $P_1 = 0$ i $P_2 = 1$. Natomiast maksymalną wartość entropii otrzymujemy, gdy $P_1 = P_2 = 1/2$ co daje

$$p_+ = p_- = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \quad (4.18)$$

4.4 Replica trick

Entropię S można również policzyć stosując tzw. "*replica trick*" polegający na wykorzystaniu definicji logarytmu operatora jako

$$\ln \rho = \lim_{n \rightarrow 1} \left(\frac{\rho^{n-1} - 1}{n-1} \right) \quad (4.19)$$

gdymamy

$$\rho^{n-1} = e^{(n-1) \ln \rho} = 1 + (n-1) \ln \rho + \frac{(n-1)^2}{2!} \ln^2 \rho + \dots \quad (4.20)$$

Wtedy entropia von Neumanna to

$$S = -\text{Tr}(\rho \ln \rho) = -\text{Tr} \left[\rho \lim_{n \rightarrow 1} \left(\frac{\rho^{n-1} - 1}{n-1} \right) \right] \quad (4.21)$$

skąd otrzymujemy

$$S = -\lim_{n \rightarrow 1} \text{Tr} \left(\frac{\rho^n - \rho}{n-1} \right) = -\lim_{n \rightarrow 1} \frac{\text{Tr} \rho^n - \text{Tr} \rho}{n-1} \quad (4.22)$$

co prowadzi do wzoru na replica trick

$$\boxed{S = -\lim_{n \rightarrow 1} \frac{\partial}{\partial n} \text{Tr} \rho^n} \quad (4.23)$$

Powyższy wynik można również zapisać w formie

$$S = -\lim_{n \rightarrow 1} \frac{\partial}{\partial n} \ln(\text{Tr} \rho^n) \quad (4.24)$$

gdyż

$$\frac{\partial}{\partial n} \ln(\text{Tr} \rho^n) = \left(\frac{1}{\text{Tr} \rho} \frac{\partial}{\partial n} \text{Tr} \rho^n \right) = \frac{\partial}{\partial n} \text{Tr} \rho^n \quad (4.25)$$

Czasami wygodnie jest używać nieunormowany operator gęstości ρ . Normując go do jedynki, wprowadzamy operator gęstości

$$\hat{\rho} = \frac{\rho}{\text{Tr} \rho} \quad (4.26)$$

Wykorzystując (4.19), otrzymujemy

$$\begin{aligned} S &= -\text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}) = -\text{Tr} \left[\frac{\rho}{\text{Tr} \rho} \ln \left(\frac{\rho}{\text{Tr} \rho} \right) \right] \\ &= -\lim_{n \rightarrow 1} \text{Tr} \left[\frac{1}{n-1} \left(\frac{\rho^n}{(\text{Tr} \rho)^n} - \frac{\rho}{\text{Tr} \rho} \right) \right] \\ &= -\lim_{n \rightarrow 1} \left[\frac{1}{n-1} \left(\frac{\text{Tr} \rho^n}{(\text{Tr} \rho)^n} - 1 \right) \right] \end{aligned} \quad (4.27)$$

Tak więc

$$\boxed{S = -\lim_{n \rightarrow 1} \frac{\partial}{\partial n} \left(\frac{\text{Tr} \rho^n}{[\text{Tr} \rho]^n} \right)} \quad (4.28)$$

lub co łatwo sprawdzić bezpośrednim rachunkiem

$$S = -\lim_{n \rightarrow 1} \frac{\partial}{\partial n} \left(\ln \frac{\text{Tr} \rho^n}{[\text{Tr} \rho]^n} \right) \quad (4.29)$$

4.5 Entropia Tsalisa i Rényiego

Nie wykonując granicy $n \rightarrow 1$ w równaniu (4.22), otrzymujemy *entropię Tsalisa*

$$S_{\text{T}}(n) = \frac{\text{Tr}\rho^n - 1}{1 - n} \quad (4.30)$$

Możemy ją policzyć jako funkcję $n \in \mathbb{N}$. Przedłużając analitycznie otrzymany wynik do zespolonych wartości n i wykonując granicę $n \rightarrow 1$ dostajemy entropię von Neumanna,

$$S = \lim_{n \rightarrow 1} S_{\text{T}}(n) \quad (4.31)$$

Rzeczywiście

$$\lim_{n \rightarrow 1} S_{\text{T}}(n) = \lim_{n \rightarrow 1} \frac{\text{Tr}(\rho^n - \rho)}{1 - n} = \text{Tr} \left[\rho \lim_{n \rightarrow 1} \frac{\rho^{n-1} - 1}{1 - n} \right] = -\text{Tr}\rho \ln \rho = S \quad (4.32)$$

gdzie wykorzystaliśmy definicję (4.19) logarytmu operatora.

Zdefiniujmy także *entropę Rényiego*

$$S_{\text{R}}(n) = \frac{\ln [\text{Tr}\rho^n]}{1 - n} \quad (4.33)$$

Podobnie jak poprzednio, policzmy ją dla $n \in \mathbb{N}$ i przedłużmy analitycznie na płaszczyznę zespolonego n . W granicy $n \rightarrow 1$ otrzymamy entropię von Neumanna,

$$S = \lim_{n \rightarrow 1} S_{\text{R}}(n) \quad (4.34)$$

Rzeczywiście, w bazie własnej operatora ρ mamy

$$S_{\text{R}}(n) = \frac{\ln (\sum_k p_k^n)}{1 - n} = -\frac{\ln (\sum_k e^{n \ln p_k})}{n - 1} \quad (4.35)$$

W granicy $n \rightarrow 1$ licznik i mianownik dążą do zera. Stosujemy więc regułę de l'Hospitala do obliczenia tej granicy,

$$\lim_{n \rightarrow 1} S_{\text{R}}(n) = -\lim_{n \rightarrow 1} \frac{\sum_k e^{n \ln p_k} \ln p_k}{\sum_k e^{n \ln p_k}} = -\sum_k p_k \ln p_k = S \quad (4.36)$$

4.6 Ewolucja unitarna a entropia

Przypomnijmy, że operator gęstości ewoluuje w czasie zgodnie ze wzorem

$$\rho(t) = U(t) \rho(0) U^\dagger(t) \quad (4.37)$$

gdzie $U(t)$ jest rodziną operatorów unitarnych

$$U(t)U^\dagger(t) = U^\dagger(t)U(t) = 1 \quad (4.38)$$

Możemy więc zdefiniować entropię w każdej chwili czasu

$$S(t) = -\text{Tr}[\rho(t) \ln \rho(t)] \quad (4.39)$$

Prawdziwe jest następujące twierdzenie.

Twierdzenie 4

Ewolucja unitarna (4.37) operatora gęstości zachowuje entropię,

$$S(t) = S(0)$$

W dowodzie wykorzystamy wzór (4.34) dla entropii Rényiego. Policzmy najpierw

$$\begin{aligned} \text{Tr}[\rho^n(t)] &= \text{Tr}[\rho(t)\rho(t) \dots \rho(t)] \\ &= \text{Tr}[U(t)\rho(0)U^\dagger(t)U(t)\rho(0)U^\dagger(t) \dots U(t)\rho(0)U^\dagger(t)] \\ &= \text{Tr}[U(t)\rho^n(0)U^\dagger(t)] \\ &= \text{Tr}[U^\dagger(t)U(t)\rho^n(0)] = \text{Tr}[\rho^n(0)] \end{aligned} \quad (4.40)$$

i stąd

$$S(t) = \lim_{n \rightarrow 1} \frac{\ln [\text{Tr}[\rho^n(t)]]}{1 - n} = \lim_{n \rightarrow 1} \frac{\ln [\text{Tr}[\rho^n(0)]]}{1 - n} = S(0) \quad (4.41)$$

Zauważmy, że z naszego dowodu wynika, że operatory gęstości ρ_1 i ρ_2 powiązane transformacją unitarną U ,

$$\rho_1 = U \rho_2 U^\dagger, \quad (4.42)$$

mają tę samą entropię von Neumanna,

$$S(\rho_1) = S(\rho_2). \quad (4.43)$$

4.7 Dowód twierdzenia: $S(\rho_D) \geq S(\rho)$

Niech

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \cdots & \rho_{1n} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \cdots & \rho_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \rho_{n1} & \rho_{n2} & \cdots & \rho_{nn} \end{pmatrix} \quad (4.44)$$

będzie dowolną macierzą gęstości, natomiast

$$\rho_D = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \rho_{22} & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & \rho_{nn} \end{pmatrix} \quad (4.45)$$

będzie macierzą gęstości powstałą po wyzerowaniu elementów pozadiagonalnych macierzy ρ . Pokażemy, że entropia von Neumanna ρ_D jest większa lub równa entropii von Neumanna ρ ,

$$S(\rho_D) \geq S(\rho). \quad (4.46)$$

Macierz ρ można zdiagonalizować przy pomocy transformacji unitarnej U ,

$$U^\dagger \rho U = \tilde{\rho} = \begin{pmatrix} \tilde{\rho}_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \tilde{\rho}_{22} & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & \tilde{\rho}_{nn} \end{pmatrix} \quad (4.47)$$

Z Twierdzenia 4 mamy

$$S(\rho) = S(\tilde{\rho}) = - \sum_k \tilde{\rho}_{kk} \ln \tilde{\rho}_{kk} \quad (4.48)$$

Z równania (4.47) i unitarności U wynika relacja odwrotna

$$\rho = U \tilde{\rho} U^\dagger, \quad (4.49)$$

skąd otrzymujemy

$$\rho_{kk} = \sum_{l,m} U_{kl} \tilde{\rho}_{lm} (U^\dagger)_{mk} = \sum_l U_{kl} \tilde{\rho}_{ll} U_{kl}^* = \sum_l |U_{kl}|^2 \tilde{\rho}_{ll}, \quad (4.50)$$

gdzie wykorzystaliśmy warunek $(U^\dagger)_{lk} = U_{kl}^*$ oraz postać diagonalną $\tilde{\rho}$. Policzmy

$$S(\rho_D) = - \sum_k \rho_{kk} \ln \rho_{kk} = - \sum_k \left(\sum_l |U_{kl}|^2 \tilde{\rho}_{ll} \right) \ln \left(\sum_l |U_{kl}|^2 \tilde{\rho}_{ll} \right). \quad (4.51)$$

Nierówność $S(\rho_D) \geq S(\rho)$ oznacza, że musi być spełniony warunek

$$-\sum_k \left(\sum_l |U_{kl}|^2 \tilde{\rho}_{ll} \right) \ln \left(\sum_l |U_{kl}|^2 \tilde{\rho}_{ll} \right) \geq -\sum_k \tilde{\rho}_{kk} \ln \tilde{\rho}_{kk} \quad (4.52)$$

Pokażemy, że powyższa nierówność jest spełniona na mocy nierówności Jenessena dla funkcji wypukłych $y = f(x)$:

$$f(a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_nx_n) \geq a_1f(x_1) + a_2f(x_2) + \dots + a_nf(x_n), \quad (4.53)$$

gdzie

$$a_1 + a_2 + \dots + a_n = 1. \quad (4.54)$$

Wybierając bowiem funkcję wypukłą $f(x) = -x \ln x$ oraz zauważając, że z warunku unitarności $UU^\dagger = 1$ wynika relacja dla każdego k :

$$\sum_l |U_{kl}|^2 = 1, \quad (4.55)$$

możemy zastosować nierówności Jenessena do lewej strony (4.52),

$$-\sum_k \left(\sum_l |U_{kl}|^2 \tilde{\rho}_{ll} \right) \ln \left(\sum_l |U_{kl}|^2 \tilde{\rho}_{ll} \right) \geq -\sum_k \left(\sum_l |U_{kl}|^2 \tilde{\rho}_{ll} \ln \tilde{\rho}_{ll} \right) \quad (4.56)$$

Sumując po k po prawej stronie, wykorzystamy analogiczny do (4.55) warunek unitarności,

$$\sum_k \left(\sum_l |U_{kl}|^2 \tilde{\rho}_{ll} \right) = 1, \quad (4.57)$$

otrzymując

$$-\sum_k \left(\sum_l |U_{kl}|^2 \tilde{\rho}_{ll} \right) \ln \left(\sum_l |U_{kl}|^2 \tilde{\rho}_{ll} \right) \geq -\sum_l \tilde{\rho}_{ll} \ln \tilde{\rho}_{ll}. \quad (4.58)$$

Dostajemy więc nierówność (4.52) po zmianie niemego wskaźnika po prawej stronie nierówności: $l \rightarrow k$.

Rozdział 5

Splątanie kwantowe

5.1 Stan splątany

Mamy do czynienia z dwoma układami kwantowymi X i Y , których stany są opisywane przy pomocy dwóch przestrzeni Hilberta \mathcal{H}_X i \mathcal{H}_Y o wymiarach, odpowiednio N_X i N_Y . Załóżmy, że całość jest opisywana przy pomocy przestrzeni Hilberta

$$\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_X \otimes \mathcal{H}_Y \quad (5.1)$$

o wymiarze $N_X N_Y$. Wybierzmy dowolną bazę ortonormalną $\{x_i\}$ w przestrzeni \mathcal{H}_X i analogiczną bazę $\{y_j\}$ w przestrzeni \mathcal{H}_Y . Bazy te definiują bazę w przestrzeni \mathcal{H}_{tot} daną poprzez iloczyny tensorowe $|x_i \otimes y_j\rangle$, które spełniają warunek ortonormalności

$$\langle x_i \otimes y_j | x_{i'} \otimes y_{j'} \rangle = \langle x_i | x_{i'} \rangle \langle y_j | y_{j'} \rangle = \delta_{ii'} \delta_{jj'} \quad (5.2)$$

Dowolny stan $|z\rangle \in \mathcal{H}_{tot}$ to kombinacja liniowa wektorów bazowych

$$|z\rangle = \sum_{i=1}^{N_X} \sum_{j=1}^{N_Y} c_{ij} |x_i \otimes y_j\rangle, \quad c_{ij} \in \mathbb{C} \quad (5.3)$$

Warunek unormowania stanu $|z\rangle$ do jedynki prowadzi do następującego warunku dla współczynników rozwinięcia c_{ij}

$$\begin{aligned}
\langle z|z\rangle &= \sum_{i,i'=1}^{N_X} \sum_{j,j'=1}^{N_Y} c_{ij} c_{i'j'}^* \langle x_{i'} \otimes y_{j'} | x_i \otimes j_j \rangle \\
&= \sum_{i,i'=1}^{N_X} \sum_{j,j'=1}^{N_Y} c_{ij} c_{i'j'}^* \langle x_{i'} | x_i \rangle \langle y_{j'} | y_j \rangle \\
&= \sum_{i,i'=1}^{N_X} \sum_{j,j'=1}^{N_Y} c_{ij} c_{i'j'}^* \delta_{ii'} \delta_{jj'} \\
&= \sum_{i=1}^{N_X} \sum_{j=1}^{N_Y} |c_{ij}|^2 = 1
\end{aligned} \tag{5.4}$$

Wprowadźmy następującą definicję.

Definicja

Stan $|z\rangle$ nazywamy *produktowym* jeżeli istnieją wektory $|x\rangle \in \mathcal{H}_X$ i $|y\rangle \in \mathcal{H}_Y$ takie, że zachodzi

$$|z\rangle = |x \otimes y\rangle$$

Każdy stan $|z\rangle$, który *nie jest* stanem produktowym nazywamy *stanem splątanym*.

5.2 Operatory gęstości podukładów X i Y

W tym celu rozważmy operator gęstości stanu czystego

$$\rho = |z\rangle\langle z| = \sum_{i,i'=1}^{N_X} \sum_{j,j'=1}^{N_Y} c_{ij} c_{i'j'}^* |x_i \otimes y_j\rangle\langle x_{i'} \otimes y_{j'}| \tag{5.5}$$

a następnie zdefiniujmy operator gęstości dla stanu układu X wysredniowując po stanach układów Y

$$\rho_X = \text{Tr}_{\mathcal{H}_Y}(\rho) = \sum_{i,i'=1}^{N_X} \sum_{j,j'=1}^{N_Y} (c_{ij} c_{i'j'}^* |x_i\rangle\langle x_{i'}|) \text{Tr}_{\mathcal{H}_Y}(|y_j\rangle\langle y_{j'}|) \tag{5.6}$$

Wykorzystując wektory bazy $\{y_i \in \mathcal{H}_Y\}$ do obliczenia śladu dostajemy

$$\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_Y}(|y_j\rangle\langle y_{j'}|) = \sum_{k=1}^{N_Y} \langle y_k|y_j\rangle\langle y_{j'}|y_k\rangle = \sum_{k=1}^{N_Y} \delta_{jk}\delta_{kj'} = \delta_{jj'} \quad (5.7)$$

co prowadzi do operatora gęstości

$$\rho_X = \sum_{i,i'=1}^{N_X} \left(\sum_{j=1}^{N_Y} c_{ij} c_{i'j}^* \right) |x_i\rangle\langle x_{i'}| \quad (5.8)$$

którego elementy macierzowe w bazie $\{x_i \in \mathcal{H}_X\}$ to

$$[\rho_X]_{ii'} = \sum_{j=1}^{N_Y} c_{ij} c_{i'j}^*, \quad i, i' = 1, 2, \dots, N_X \quad (5.9)$$

Łatwo przy ich pomocy pokazać, że jest ρ_X jest operatorem gęstości.

- Warunek hermitowskości jest spełniony

$$[\rho_X]_{ii'}^* = \sum_{j=1}^{N_Y} (c_{ij} c_{i'j}^*)^* = \sum_{j=1}^{N_Y} c_{i'j} c_{ij}^* = [\rho_X]_{i'i} \quad (5.10)$$

- Ślad jest unormowany do jedynki

$$\sum_{i=1}^{N_X} [\rho_X]_{ii} = \sum_{i=1}^{N_X} \sum_{j=1}^{N_Y} c_{ij} c_{ij}^* = \sum_{i=1}^{N_X} \sum_{j=1}^{N_Y} |c_{ij}|^2 = 1, \quad (5.11)$$

- Warunek dodatniej określoności wynika z relacji

$$[\rho_X]_{ii} = \sum_{j=1}^{N_Y} |c_{ij}|^2 \geq 0 \quad (5.12)$$

Podobnie definiujemy operator gęstości ρ_Y dla stanu układu Y średniując po stanach układu X ,

$$\rho_Y = \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_X}(\rho) = \sum_{j,j'=1}^{N_Y} \left(\sum_{i=1}^{N_X} c_{ij} c_{ij'}^* \right) |y_j\rangle\langle y_{j'}| \quad (5.13)$$

którego elementy macierzowe w bazie $\{y_j \in \mathcal{H}_Y\}$ to

$$[\rho_Y]_{jj'} = \sum_{i=1}^{N_X} c_{ij} c_{ij'}^*, \quad j, j' = 1, 2, \dots, N_Y \quad (5.14)$$

Ważne jest twierdzenie.

Twierdzenie 5

Operatory gęstości ρ_X i ρ_Y mają te same **niezerowe** wartości własne $p_k > 0$.

Dowód tego twierdzenia jest oparty na rozkładzie Schmidta stanu czystego $|z\rangle$.

5.3 Rozkład Schmidta

Rozważmy stan czysty

$$|z\rangle = \sum_{i=1}^{N_X} \sum_{j=1}^{N_Y} c_{ij} |x_i \otimes y_j\rangle, \quad c_{ij} \in \mathbb{C} \quad (5.15)$$

gdzie bez straty ogólności zakładamy, że $N_X \leq N_Y$. Zapiszmy operator ρ_X w bazie stanów własnych $\{\tilde{x}_i \in \mathcal{H}_X\}$

$$\rho_X = \text{Tr}_{\mathcal{H}_Y}(|z\rangle\langle z|) = \sum_{i=1}^{N_X} p_i |\tilde{x}_i\rangle\langle \tilde{x}_i| \quad p_i \geq 0 \quad (5.16)$$

Stan czysty (5.15) w nowej bazie to

$$|z\rangle = \sum_{i=1}^{N_X} \sum_{j=1}^{N_Y} d_{ij} |\tilde{x}_i \otimes y_j\rangle \quad (5.17)$$

gdzie $d_{ij} \in \mathbb{C}$ to nowe współczynniki rozwinięcia. Definiując wektory

$$|Y_i\rangle = \sum_{j=1}^{N_Y} d_{ij} |y_j\rangle, \quad i = 1, 2, \dots, N_X \quad (5.18)$$

otrzymujemy

$$|z\rangle = \sum_{i=1}^{N_X} |\tilde{x}_i \otimes Y_i\rangle \quad (5.19)$$

Licząc ρ_X dla dowolnej ortonormalnej bazy zupełnej $\{y_k\} \in \mathcal{H}_Y$, otrzymamy

$$\begin{aligned} \rho_X &= \sum_{i,i'=1}^{N_X} |\tilde{x}_i\rangle\langle \tilde{x}_{i'}| \sum_{k=1}^{N_Y} \langle y_k | Y_i\rangle \langle Y_{i'} | y_k\rangle \\ &= \sum_{i,i'=1}^{N_X} |\tilde{x}_i\rangle\langle \tilde{x}_{i'}| \langle Y_{i'} | \left(\sum_{k=1}^{N_Y} |y_k\rangle\langle y_k| \right) | Y_i\rangle \end{aligned} \quad (5.20)$$

Wykorzystując warunek zupełności bazy $\{y_k\}$

$$\sum_{k=1}^{N_Y} |y_k\rangle\langle y_k| = 1 \quad (5.21)$$

dostajemy

$$\rho_X = \sum_{i,i'=1}^{N_X} \langle Y_{i'}|Y_i\rangle |\tilde{x}_i\rangle\langle\tilde{x}_{i'}| \quad (5.22)$$

Z jednoznaczności rozkładu spektralnego (5.16) operatora gęstości ρ_X , znajdujemy

$$\langle Y_{i'}|Y_i\rangle = p_i \delta_{ii'} \quad (5.23)$$

Otrzymujemy więc $N \leq N_X$ **niezerowych** i ortogonalnych wektorów $\{Y_i\} \in \mathcal{H}_Y$, dla niezerowych wartości własnych $p_i > 0$. Po unormowaniu do jedynki,

$$|Y_i\rangle \rightarrow |\tilde{y}_i\rangle = e^{i\phi_i} \frac{|Y_i\rangle}{\sqrt{p_i}} \quad (5.24)$$

gdzie $\phi_i \in \mathbb{R}$ jest dowolną fazą, stan czysty (5.17) przyjmuje postać

$$|z\rangle = \sum_{i=1}^{N \leq N_X} e^{i\phi_i} \sqrt{p_i} |\tilde{x}_i \otimes \tilde{y}_i\rangle \quad (5.25)$$

Można położyć fazy $\phi_i = 0$, chociaż dobrze pamiętać, że mogą być dowolne. Wtedy

$$\boxed{|z\rangle = \sum_{i=1}^{N \leq N_X} \sqrt{p_i} |\tilde{x}_i \otimes \tilde{y}_i\rangle} \quad (5.26)$$

Otrzymaliśmy w ten sposób rozkład Schmidta stanu produktowego $|z\rangle$.

Co nam mówi rozkład Schmidta? Zapisując stan $|z\rangle \in \mathcal{H}_X \otimes \mathcal{H}_Y$ w dowolnej bazie produktowej $|x_i \otimes y_j\rangle \in \mathcal{H}_X \otimes \mathcal{H}_Y$ otrzymujemy w ogólności $N_X N_Y$ współczynników rozwinięcia c_{ij} , charakteryzujących splątanie kwantowe. Przykładowo, dla $N_X = 2$ i $N_Y = 3$ otrzymujemy następującą macierz współczynników

$$c_{ij} = \begin{pmatrix} * & * & * \\ * & * & * \end{pmatrix} \quad (5.27)$$

gdzie gwiazdki oznaczają wartości współczynników c_{ij} . Rozkład Schmidta polega na znalezieniu nowych baz w przestrzeniach \mathcal{H}_X i \mathcal{H}_Y , dla których macierz współczynników c'_{ij} rozwinięcia stanu czystego w nowej bazie produktowej przyjmuje postać

$$c'_{ij} = \begin{pmatrix} \sqrt{p_1} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{p_2} & 0 \end{pmatrix} \quad (5.28)$$

Pozwala to zredukować liczbę niezerowych współczynników charakteryzujących splątanie do $N \leq N_X$.

Jeżeli tylko jedna w wartości p_i jest różna od zera i równa 1 to stan $|z\rangle$ jest stanem produktowym. W przeciwnym wypadku jest stanem splątanym.

Stopień splątania zależy od wartości p_i . Jeżeli wszystkie z nich są takie same, $p_i = 1/N_X$, to splątanie stanu $|z\rangle$ jest maksymalne. Ten aspekt splątania jest scharakteryzowany przy pomocy entropii splątania.

5.4 Entropia splątania

Policzmy operator gęstości ρ_Y dla stanu (5.26), którego operator gęstości to

$$\rho = |z\rangle\langle z| = \sum_{i,i'=1}^{N \leq N_X} \sqrt{p_i p_{i'}} |x_i \otimes \tilde{y}_i\rangle\langle x_{i'} \otimes \tilde{y}_{i'}| \quad (5.29)$$

Licząc ślad w bazie $\{\tilde{x}_k \in \mathcal{H}_X\}$ otrzymujemy

$$\begin{aligned} \rho_Y = \text{Tr}_{\mathcal{H}_X}(|z\rangle\langle z|) &= \sum_{k=1}^{N_X} \langle \tilde{x}_k | z \rangle \langle z | \tilde{x}_k \rangle \\ &= \sum_{i,i'=1}^{N \leq N_X} \sqrt{p_i p_{i'}} |\tilde{y}_i\rangle\langle \tilde{y}_{i'}| \sum_{k=1}^{N_X} \langle \tilde{x}_k | \tilde{x}_{i'} \rangle \langle \tilde{x}_i | \tilde{x}_k \rangle \\ &= \sum_{i,i'=1}^{N \leq N_X} \sqrt{p_i p_{i'}} |\tilde{y}_i\rangle\langle \tilde{y}_{i'}| \sum_{k=1}^{N_X} \langle \tilde{x}_i | \tilde{x}_k \rangle \langle \tilde{x}_k | \tilde{x}_{i'} \rangle \\ &= \sum_{i,i'=1}^{N \leq N_X} \sqrt{p_i p_{i'}} |\tilde{y}_i\rangle\langle \tilde{y}_{i'}| \delta_{ii'} \\ &= \sum_{i=1}^{N \leq N_X} p_i |\tilde{y}_i\rangle\langle \tilde{y}_i| \end{aligned} \quad (5.30)$$

gdzie w drugiej linii wykorzystaliśmy warunek zupełności bazy $\{x_k \in \mathcal{H}_X\}$,

$$\sum_{k=1}^{N_X} |\tilde{x}_k\rangle\langle \tilde{x}_k| = 1 \quad (5.31)$$

Z jednoznaczności rozkładu spektralnego ρ_Y wynika, że ρ_Y ma te same **niezerowe** wartości własne co ρ_X dany wzorem (5.16). Entropie von Neumanna operatorów ρ_X i ρ_Y są więc takie same

$$S_X = -\text{Tr}(\rho_X \ln \rho_X) = -\sum_{k=1}^N p_k \ln p_k = -\text{Tr}(\rho_Y \ln \rho_Y) = S_Y \quad (5.32)$$

Stąd następująca definicja.

Definicja

Wspólna wartość entropii $S_X = S_Y$ nazywa się **entropią splątania**.

Jest to dobra miara splątania, gdyż nie zależy od tego czy obliczamy ją z perspektywy układu X czy Y . Wymieńmy jej podstawowe własności.

1. $S_X = S_Y$ tylko dla stanu **czystego**, $\rho = |z\rangle\langle z|$. Dla dowolnego operatora gęstości ρ na ogół $S_X \neq S_Y$.
2. Dla stanu **produktowego**, $|z\rangle = |x \otimes y\rangle$, entropia splątania wynosi **zero**. Licząc bowiem ρ_X oraz ρ_Y otrzymujemy

$$\rho_X = |x\rangle\langle x|, \quad \rho_Y = |y\rangle\langle y| \quad (5.33)$$

Oba operatory gęstości reprezentują stan czysty, a więc ich entropia von Neumana, równa entropii splątania, wynosi zero, $S_X = S_Y = 0$.

3. Stan czysty $|z\rangle$ jest **maksymalnie splątany**, gdy entropia splątania jest maksymalna. Odpowiada to $p_i = 1/N_X$ dla $i = 1, 2, \dots, N_X$, co daje

$$S = \sum_{i=1}^{N_X} \frac{1}{N_X} \ln N_X = \ln N_X \quad (5.34)$$

4. Maksymalna entropia splątania jest równa logarytmowi **wymiaru** przestrzeni Hilberta \mathcal{H}_X .

5.5 Przykład 5

Rozważmy dwa nieoddziałujące spiny $1/2$ i niech $|\pm\rangle$ oznacza ich stany z rzutami $\pm 1/2$ na oś z , zdefiniowanymi w dwóch niezależnych przestrzeniach Hilberta $\mathcal{H}_{1/2}$, w których stany te tworzą bazę zupełną. Rozważmy stan czysty

$$|\psi\rangle = \frac{|+-\rangle \pm |-+\rangle}{\sqrt{2}} \in \mathcal{H}_{1/2} \otimes \mathcal{H}_{1/2} \quad (5.35)$$

Odpowiadający mu operator gęstości to

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = \frac{|+-\rangle\langle+-| \pm |+-\rangle\langle-+| \pm |-+\rangle\langle+-| + |-+\rangle\langle-+|}{2} \quad (5.36)$$

co daje następującą macierz gęstości

$$\rho_{ij} = \begin{pmatrix} 1/2 & \pm 1/2 & 0 & 0 \\ \pm 1/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.37)$$

Jej niezerowe wartości własne to $\lambda = 1$, gdyż

$$\left(\frac{1}{2} - \lambda\right)^2 - \left(\frac{1}{2}\right)^2 = \lambda(\lambda - 1) = 0 \quad (5.38)$$

co potwierdza, że ρ jest stanem czystym z zerową entropią von Neumanna.

Licząc entropię splątania dla pierwszego spinu obliczmy ślad po stanach drugiego spinu otrzymując operator gęstości

$$\rho_1 = \text{Tr}_2(\rho) = \frac{1}{2} (|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|)_1 \quad (5.39)$$

gdzie zaznaczyliśmy, że stany należą do przestrzeni Hilberta pierwszego spinu. Podobnie licząc operator gęstości dla drugiego spinu, średniując po stanach pierwszego otrzymujemy

$$\rho_2 = \text{Tr}_1(\rho) = \frac{1}{2} (|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|)_2 \quad (5.40)$$

W obu przypadkach macierze gęstości są takie same

$$[\rho_1]_{ij} = [\rho_2]_{ij} = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix} \quad (5.41)$$

a entropia splątania wynosi

$$S = -\frac{1}{2} \ln \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \ln \frac{1}{2} = \ln 2 \quad (5.42)$$

Stan $|\psi\rangle$ jest maksymalnie splątany, gdyż entropia splątania jest maksymalna i równa logarytmowi wymiaru przestrzeni Hilberta spinu $1/2$.

5.6 Ewolucja w przestrzeni $\mathcal{H}_X \otimes \mathcal{H}_Y$

Założmy, że w chwili $t = 0$ stan czysty $|z(0)\rangle \in \mathcal{H}_X \otimes \mathcal{H}_Y$ jest dany poprzez rozkład Schmidta

$$|z(0)\rangle = \sum_{i=1}^{N_X} \sqrt{p_i} |x_i \otimes y_i\rangle \quad (5.43)$$

Ewolucja w przestrzeni Hilberta $\mathcal{H} = \mathcal{H}_X \otimes \mathcal{H}_Y$ jest realizowana poprzez operator unitarny $U(t)$,

$$|z(t)\rangle = U(t) |z(0)\rangle \quad (5.44)$$

Wprowadźmy elementy macierzowe operatora $U(t)$ w bazie $|x_i \otimes y_j\rangle$

$$U(t) |x_i \otimes y_j\rangle = \sum_{I=1}^{N_X} \sum_{J=1}^{N_Y} |x_I \otimes y_J\rangle U_{(IJ)(ij)}(t) \quad (5.45)$$

Stąd otrzymujemy

$$\begin{aligned} |z(t)\rangle &= \sum_{i=1}^{N_X} \sqrt{p_i} \left(U(t) |x_i \otimes y_i\rangle \right) \\ &= \sum_{i=1}^{N_X} \sum_{I=1}^{N_X} \sum_{J=1}^{N_Y} |x_I \otimes y_J\rangle U_{(IJ)(ii)}(t) \sqrt{p_i} \end{aligned} \quad (5.46)$$

Założmy, że stan początkowy jest stanem produktowym, tzn. $p_i = \delta_{i1}$,

$$|z(0)\rangle = |x_1 \otimes y_1\rangle \quad (5.47)$$

Po czasie $t > 0$ otrzymujemy

$$|z(t)\rangle = \sum_{I=1}^{N_X} \sum_{J=1}^{N_Y} |x_I \otimes y_J\rangle U_{(IJ)(11)}(t) \quad (5.48)$$

Operator gęstości dla tego stanu to

$$\begin{aligned} \rho(t) &= |z(t)\rangle \langle z(t)| \\ &= \sum_{I,J} \sum_{I',J'} |x_I \otimes y_J\rangle \langle x_{I'} \otimes y_{J'}| U_{(IJ)(11)}(t) U_{(I'J')(11)}^*(t) \end{aligned} \quad (5.49)$$

Licząc operator gęstości $\rho_X(t)$ otrzymujemy

$$\begin{aligned}\rho_X(t) &= \text{Tr}_{\mathcal{H}_Y}(\rho(t)) = \sum_{I,J} \sum_{I',J'} |x_I\rangle\langle x_{I'}| U_{(IJ)(11)}(t) U_{(I'J')(11)}^*(t) \delta_{JJ'} \\ &= \sum_{I,I'=1}^{N_X} |x_I\rangle\langle x_{I'}| \left(\sum_{J=1}^{N_Y} U_{(IJ)(11)}(t) U_{(I'J)(11)}^*(t) \right)\end{aligned}\quad (5.50)$$

Stąd elementy macierzowe operatora gęstości $\rho_X(t)$

$$[\rho_X(t)]_{II'} = \sum_{J=1}^{N_Y} U_{(IJ)(11)}(t) U_{(I'J)(11)}^*(t) \quad (5.51)$$

gdzie $I, I' = 1, 2, \dots, N_X$. Po diagonalizacji tej macierzy otrzymujemy dodatnie wartości własne $p_i(t)$, unormowane do jedynki,

$$\sum_{i=1}^{N_X} p_i(t) = 1 \quad (5.52)$$

Nie ma powodu by tylko jedna z wartości własnych była równa 1, co oznaczałoby, że stan $|z(t)\rangle$ po rozkładzie Schmidta jest stanem produktowym.

Udowodniliśmy, że **ewolucja unitarna** w przestrzeni $\mathcal{H} = \mathcal{H}_X \otimes \mathcal{H}_Y$ **może splątywać stany**. Odwrotna sytuacja nie jest wykluczona - ewolucja unitarna może również rozplątywać stany.

Rozdział 6

Informacja kwantowa

6.1 Klasyczna entropia względna

Rozważmy dwa znormalizowane do jedynki dyskretne rozkłady prawdopodobieństwa: p_k i q_k ,

$$\sum_k p_k = \sum_k q_k = 1. \quad (6.1)$$

Zakładamy, że przestrzeń stanów (zdarzeń) jest identyczna dla obu rozkładów. Rozważmy q_k jako rozkład odniesienia dla innych rozkładów p_k . W konkretnej sytuacji fizycznej q_k może być rozkładem równowagowym Boltzmana układu fizycznego pozostającego w równowadze z rezerwuarem o temperaturze T ,

$$q_k = \frac{1}{Z} e^{-E_k/T} \quad (6.2)$$

gdzie E_k to energia stanu k .

Entropia względna rozkładu p_k względem rozkładu q_k to wielkość

$$S(p||q) = \sum_k p_k \ln(p_k/q_k). \quad (6.3)$$

Udowodnimy, że zachodzi

$$S(p||q) \geq 0, \quad (6.4)$$

gdzie równość zachodzi jedynie dla $p_k = q_k$. Entropia względna jest więc miarą różnicy pomiędzy rozkładem odniesienia q_k , a dowolnym rozkładem p_k .

Dowód dodatniości entropii względnej bazuje na twierdzeniu o funkcjach wypukłych w zastosowaniu do funkcji wypukłej $f(x) = x \ln x$,

$$x \ln x \geq (x - 1), \quad x \geq 0, \quad (6.5)$$

gdzie równość zachodzi jedynie dla $x = 1$. Podstawiając $x = p_k/q_k$ dostajemy

$$p_k \ln(p_k/q_k) \geq (p_k - q_k) \quad (6.6)$$

Stąd wynika teza (6.4) naszego twierdzenia

$$S(p||q) = \sum_k p_k \ln(p_k/q_k) \geq \sum_k (p_k - q_k) = 0, \quad (6.7)$$

gdzie wykorzystaliśmy warunek unormowania (6.1).

Rozważmy tylko takie stany k , dla których prawdopodobieństwo $q_k > 0$. Warunek $S(p||q) = 0$ jest spełniony przez prawdopodobieństwa $p_k = q_k$ dla każdego stanu k . Gdybyśmy przyjęli, że dla części stanów $p_k = 0$, entropia względna pozostałaby równa zero, jednak warunek unormowania do jedynki dla rozkładu prawdopodobieństwa p_k zostałby naruszony. Stąd jedynie dla $p_k = q_k$ entropia względna jest równa zero.

6.2 Kwantowa entropia względna

W przypadku stanów kwantowych opisywanych przy pomocy operatorów gęstości, entropia względna stanu ρ względem stanu odniesienia σ jest dana przez

$$S(\rho||\sigma) = \text{Tr} [\rho (\ln \rho - \ln \sigma)], \quad (6.8)$$

gdzie założyliśmy, że oba operatory gęstości działają w tej samej przestrzeni Hilberta. Pokażemy, że tak jak w przypadku klasycznym entropia względna jest nieujemna,

$$S(\rho||\sigma) \geq 0, \quad (6.9)$$

gdzie równość zachodzi jedynie dla $\rho = \sigma$. Tak więc entropia względna jest miarą różnicy pomiędzy stanami ρ i σ .

Przypominamy, że w dowolnej bazie operator gęstości ma postać macierzy

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \dots & \rho_{1n} & \dots \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \dots & \rho_{2n} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \rho_{n1} & \rho_{n2} & \dots & \rho_{nn} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (6.10)$$

gdzie elementy diagonalne $\rho_{kk} \geq 0$ oraz

$$\sum_k \rho_{kk} = 1 \quad (6.11)$$

Po wyzerowaniu elementów pozadiagonalnych otrzymujemy macierz

$$\rho_D = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & \dots & 0 & \dots \\ 0 & \rho_{22} & \dots & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \rho_{nn} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (6.12)$$

która reprezentuje operator gęstości ρ_D , gdyż wszystkie warunki definiujące operator gęstości są spełnione. Tak zdefiniowany operator gęstości zależy od bazy, w której zapisujemy oryginalny operator gęstości ρ . W rozdziale 4.7 udowodniliśmy, że wyzerowanie elementów pozadiagonalnych zwiększa entropię stanu:

$$S(\rho_D) = -\text{Tr}(\rho_D \ln \rho_D) \geq -\text{Tr}(\rho \ln \rho) = S(\rho) \quad (6.13)$$

Rozważmy bazę, w której operator σ jest diagonalny. Wtedy

$$\text{Tr}(\rho \ln \sigma) = \sum_k \rho_{kk} \ln \sigma_{kk} = \text{Tr}(\rho_D \ln \sigma) \quad (6.14)$$

Tak więc

$$S(\rho||\sigma) = \text{Tr}(\rho \ln \rho) - \text{Tr}(\rho \ln \sigma) = \text{Tr}(\rho \ln \rho) - \text{Tr}(\rho_D \ln \sigma). \quad (6.15)$$

Dodając i odejmując $\text{Tr}(\rho_D \ln \rho_D)$ po prawej stronie otrzymujemy

$$\begin{aligned} S(\rho||\sigma) &= \text{Tr}(\rho \ln \rho) - \text{Tr}(\rho_D \ln \rho_D) + \text{Tr}(\rho_D \ln \rho_D) - \text{Tr}(\rho_D \ln \sigma) \\ &= \text{Tr}(\rho \ln \rho) - \text{Tr}(\rho_D \ln \rho_D) + \text{Tr}[\rho_D(\ln \rho_D - \ln \sigma)] \\ &= S(\rho_D) - S(\rho) + S(\rho_D||\sigma). \end{aligned} \quad (6.16)$$

Z relacji (6.18) wynika

$$S(\rho||\sigma) \geq S(\rho_D||\sigma) \quad (6.17)$$

W bazie, w której σ jest diagonalne, ρ_D jest z definicji także diagonalne. Stąd

$$S(\rho_D||\sigma) = \sum_k \rho_{kk} \ln(\rho_{kk}/\sigma_{kk}) \quad (6.18)$$

Wyrażenie po prawej stronie można potraktować jak klasyczną entropię względną, która jest zawsze dodatnia

$$S(\rho_D||\sigma) \geq 0 \quad (6.19)$$

Stąd teza naszego twierdzenia:

$$S(\rho||\sigma) \geq 0 \quad (6.20)$$

Warunek $S(\rho||\sigma) = 0$ jest spełniony, gdy $S(\rho_D||\sigma) = 0$ i $S(\rho_D) = S(\rho)$. Z pierwszego warunku wynika równość $\rho_D = \sigma$, natomiast z drugiego $\rho_D = \rho$. Stąd $S(\rho||\sigma) = 0$ jedynie dla $\rho = \sigma$.

Zwróćmy uwagę na podstawie wzoru (6.16), że różnica pomiędzy kwantową a klasyczną entropią względną tkwi w niezerowej różnicy

$$S(\rho_D) - S(\rho) > 0. \quad (6.21)$$

Tak więc, jedynie dla komutujących ze sobą operatorów gęstości ρ i σ znajdziemy wspólną bazę własną, w której powyższa różnica wynosi zero i w konsekwencji entropia kwantowa jest dana wzorem klasycznym (6.18).