

7 Кубит. Формализъм на хилбертовите пространства в квантовата теория

7.1 Кубит: наблюдаеми, събития, сфера на Блох

Напомняме: чисто състояние на квантова система, която се определя от алгебра на наблюдаемите $\mathcal{A} = \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ ($*$ -алгебрата на комплексните квадратни $n \times n$ -матрици). Числото n се оказва *нивото* на системата, така както го въведохме в квантово логическия подход: това е максималния брой алтернативи, които могат да се случат в един експеримент над системата. За система “бит”: $n = 2$ и за квантовия случай, кубит, имаме: $\mathcal{A} = \text{Mat}_2(\mathbb{C})$. Забележете: нивото е $n = 2$, но алгебрата на наблюдаемите $n^2 = 4$ мерно *комплексно* линейно пространство. Разбира се, следва да помним първо, че не всички елементи на алгебрата на наблюдаемите са наблюдаеми, а

само самоспрегнатите елементи; и второ, не всички наблюдаеми са съвместно измерими, а само взаимно комутиращите. Така, за системата на кубит, както ще видим сега, наблюдаемите ще образуват 4 мерно *реално* линейно пространство, но максималните подпространства от съвместно измерими наблюдаеми ще бъдат двумерни, според нивото $n = 2$ на системата.

И така, наблюдаема за кубит: това е матрица $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = A^* = \begin{pmatrix} \bar{a} & \bar{c} \\ \bar{b} & \bar{d} \end{pmatrix}$, за $a, b, c, d \in \mathbb{C}$. Следователно, $a = \bar{a}$, $b = \bar{c}$, $d = \bar{d}$. Оттук, $a, d \in \mathbb{R}$ и $\bar{b} = c =: x + iy$, за $x, y \in \mathbb{R}$. Така получихме, както вече казахме, че наблюдаемите за кубит са линейно пространство над реалните числа, но с 4 ($=$ нивото²) на брой измерения. Нека преозначим и въведем еквивалентни параметри: $a = r + z$ и $d = r - z$ ($\Leftrightarrow r = \frac{1}{2}(a + d)$ и $z = \frac{1}{2}(a - d)$). Тогава, общият вид на една наблюдаема за кубит става $A = \begin{pmatrix} r + z & x - iy \\ x + iy & r - z \end{pmatrix}$, за произволни четири реални числа x, y, z, r .

Следващ въпрос: така установените за

кубит наблюдаеми A , кога са събития?
 Тоест, кога се изпълняват равенствата $A^* = A = A^2$. Първото равенство вече го удовлетворихме, а за второто извършваме следните пресмятания:

$$\begin{aligned}
 \begin{pmatrix} r+z & x-iy \\ x+iy & r-z \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} r+z & x-iy \\ x+iy & r-z \end{pmatrix}^2 \\
 &= \begin{pmatrix} (r+z)^2 + (x-iy)(x+iy) & (x+iy)(r+z) + (r-z)(x+iy) \\ (r+z)(x-iy) + (x-iy)(r-z) & (x+iy)(x-iy) + (r-z)^2 \end{pmatrix} \\
 \Leftrightarrow &\begin{cases} r+z = x^2 + y^2 + z^2 + r^2 + 2rz \\ x+iy = (x+iy) 2r \\ x-iy = (x-iy) 2r \\ r-z = x^2 + y^2 + z^2 + r^2 - 2rz \end{cases}
 \end{aligned}$$

Получената система от уравнения за реалните параметри x, y, z, r води до два случая.

1ви случай) $x = y = 0$. Тогава:

$$\begin{cases} r+z = (r+z)^2 \\ r-z = (r-z)^2 \end{cases}$$

Това води до две решения:

$$\left\{ \begin{array}{ll} r = 1 & , \quad z = 0 \\ r = 0 & , \quad z = 1 \end{array} \right. \Leftrightarrow \boxed{\begin{array}{l} A = \hat{1}, \\ A = \hat{0}. \end{array}}$$

И така, този случай води до нулевото и единичното събитие, които бяха съответно събитията от най-ниското, нулево ниво и най-високото, второ ниво, на решетката на събитията.

2ри случай) $x + iy \neq 0$. Тогава получаваме

$$\left| \begin{array}{l} r = \frac{1}{2} \\ x^2 + y^2 + z^2 = \frac{1}{4} \end{array} \right.$$

и ако отново преозначим (с цел удобство, което след малко ще стане ясно):

$$x \mapsto \frac{x}{2}, \quad y \mapsto \frac{y}{2}, \quad z \mapsto \frac{z}{2}, \quad r \mapsto \frac{r}{2},$$

то получаваме следния общ вид на събитията от този случай:

$$\boxed{\begin{array}{l} A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} r + z & x - iy \\ x + iy & r - z \end{pmatrix} \\ \text{за } x^2 + y^2 + z^2 = 1 = r, \end{array}}$$

където на втория ред получихме уравнение за единичната сфера в $\mathbb{R}^3$ за тройката (x, y, z) . Резултата от този случай може да се запише и както е показано на следната фигура:

$$P_{\vec{u}} \equiv P_{(x,y,z)} := \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+z & x-iy \\ x+iy & 1-z \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (\hat{1} + \vec{\sigma}_{\vec{u}})$$

$$P_{\vec{u}}^{\perp} := \hat{1} - P_{\vec{u}} = P_{-\vec{u}}$$

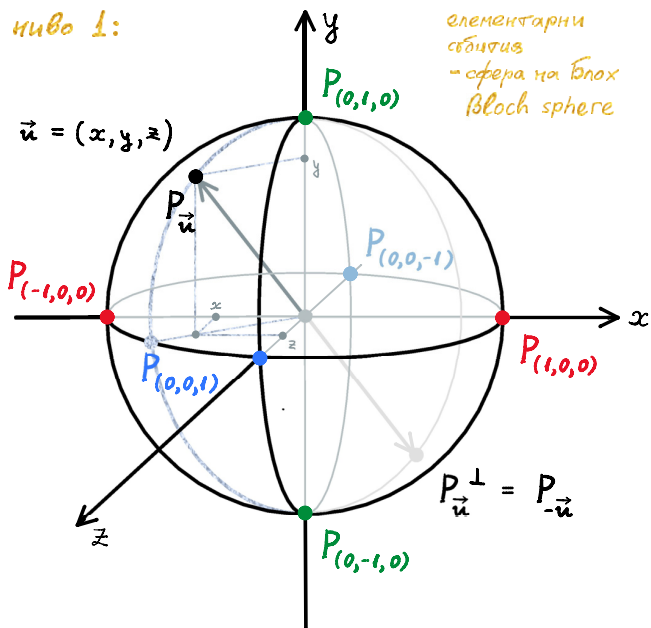
фиг. 46: Общ вид на елементарните събития за квантов бит, където $\sigma_{\vec{u}} = \sigma_{(x,y,z)} = x \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + y \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ са т.нар. матрици на Паули.

Сумирайки двата случая получаваме следната картина на събитията на квантовия бит:

ниво 2 :



ниво 1 :



ниво 0 :



фиг. 47: Квантов бит: диаграма на Хасе на решетката на събитията.

7.2 Хилбертови пространства и линейни оператори в тях

Един от главните резултати в тази лекция е

Теорема. *Нека е дадена неприводима квантова система с алгебра на наблюдаемите $\mathcal{A} = \text{Mat}_n(\mathbb{C})$. Тогава всеки единичен вектор $\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^N$ (т.е., $\|\Psi\|^2 = |\psi_1|^2 + \dots + |\psi_n|^2 = 1$) определя чисто състояние*

$$\rho_\Psi : \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{C} : A \mapsto \rho_\Psi(A), \quad (7.1)$$

$$\rho_\Psi(A) := \langle \Psi | A \Psi \rangle$$

$$= (\overline{\psi_1}, \dots, \overline{\psi_n}) \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}.$$

Обратно, за всяко чисто състояние ρ съществува единичен вектор $\Psi \in \mathbb{C}^n$, така че $\rho = \rho_\Psi$. При това,

$$\rho_\Psi = \rho_{\Psi'} \iff \Psi' = e^{i\varphi} \Psi \quad (7.2)$$

за реално число φ (т.е., Ψ' и Ψ са пропорционални вектори с комплексен множител $e^{i\varphi}$ по модул равен на единица).

Векторът Ψ от горната теорема се нарича **вектор на състоянието**.

Така, една наблюдаема при измерване в състояние с вектор Ψ има средна стойност

$$\langle A \rangle_{\Psi} = \langle \Psi | A \Psi \rangle.$$

Последната формула е известна, като **формула на Дирак** (за средната стойност).

Също, подчертаваме отново специално последното изречение в горната теорема, което изказано с думи гласи, че **векторът на състоянието е фиксиран от състоянието с точност до пропорционалност с комплексен множител равен по модул на 1**.

Да си припомним, че по определение: хилбертовото пространство е комплексно линейно пространство $\mathcal{H}$, което е снабдено с функция $\mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$, наречена скалярно произведение със свойствата:

- $\langle \alpha\Phi + \beta\Psi | \alpha'\Phi' + \beta'\Psi' \rangle$
 $= \bar{\alpha}\alpha' \langle \Phi | \Phi' \rangle + \bar{\alpha}\beta' \langle \Phi | \Psi' \rangle$
 $+ \bar{\beta}\alpha' \langle \Psi | \Phi' \rangle + \bar{\beta}\beta' \langle \Psi | \Psi' \rangle;$
- $\langle \Phi | \Psi \rangle = \overline{\langle \Psi | \Phi \rangle};$
- $\langle \Phi | \Phi \rangle \geq 0$, като $\langle \Phi | \Phi \rangle = 0 \Leftrightarrow \Phi = 0$,

за всеки $\Phi, \Psi, \Phi', \Psi' \in \mathcal{H}$ $\alpha, \beta, \alpha', \beta' \in \mathbb{C}$.

Означаваме числото: $\|\Phi\| := \sqrt{\langle \Phi | \Phi \rangle}$ и го наричаме **норма** на вектора Φ . Ако $\|\Phi\| = 1$, то казваме че Φ е **единичен вектор**.

7.2.1 Орто-нормирани базиси и разлагане на вектори в тях

Нека $\mathcal{H}$ е (крайно-мерно, комплексно) хилбертово пространство.

Едно множество от вектори $\{e_1, \dots, e_n\} \subseteq \mathcal{H}$ се нарича **орто-нормирано**, ако

$$\langle e_j | e_k \rangle = \begin{cases} 1 & \text{при } j = k, \\ 0 & \text{при } j \neq k. \end{cases}$$

Доказва се, че *всяко такова множество е линейно независимо*. Когато $\{e_1, \dots, e_n\}$ е и базис, казваме че е **орто-нормиран базис**. Ако един вектор $\Psi \in \mathcal{H}$ се развие в орто-нормиран базис, $\Psi = \psi_1 e_1 + \dots + \psi_n e_n$, тогава координатите се изразяват $\psi_j = \langle e_j | \Psi \rangle$. Това може да запишем също като:

$$\Psi = \langle e_1 | \Psi \rangle e_1 + \dots + \langle e_n | \Psi \rangle e_n. \quad (7.3)$$

Скаларното произведение в орто-нормиран базис се изразява така: ако $\Phi = \phi_1 e_1 + \dots$

+ $\phi_n e_n$ и $\Psi = \psi_1 e_1 + \cdots + \psi_n e_n$, тогава

$$\begin{aligned} \langle \Phi | \Psi \rangle &= \overline{\phi_1} \psi_1 + \cdots + \overline{\phi_n} \psi_n \\ &= (\overline{\psi_1}, \dots, \overline{\psi_n}) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (7.4)$$

Така, скаларното произведение в орто-нормиран базис придобива вида на скаларното произведение в $\mathbb{C}^n$ и по такъв начин, разглеждането на хилбертовото пространство $\mathbb{C}^n$ е равносилно на задаване на n -мерно хилбертово пространство с посочен орто-нормиран базис.

7.2.2 Оператори и матрици

Ако $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ е линеен оператор в хилбертово пространство и $\{e_1, \dots, e_n\} \subseteq \mathcal{H}$ е орто-нормиран базис, то развивайки $\hat{e}_j = a_{j1}e_1 + \cdots + a_{jn}e_n$ ($j = 1, \dots, n$) дава матрицата

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \text{ на оператора } \hat{A}. \text{ Тогава,}$$

ако в орто-нормиран базис

$$\begin{aligned} \Psi &\leftrightarrow \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} \quad \text{то} \\ \hat{A}\Psi &\leftrightarrow \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (7.5)$$

Ермитово спрегнат оператор $\hat{A}^* : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ се определя по формулата

$$\langle \hat{A}^* \Phi | \Psi \rangle = \langle \Phi | \hat{A} \Psi \rangle. \quad (7.6)$$

Тогава, в орто-нормиран базис

$$\begin{aligned} \hat{A} &\leftrightarrow \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \quad \text{то} \\ \hat{A}^* &\leftrightarrow \begin{pmatrix} \overline{a_{11}} & \cdots & \overline{a_{n1}} \\ \vdots & & \vdots \\ \overline{a_{1n}} & \cdots & \overline{a_{nn}} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (7.7)$$

т.е., на ермитово спрегнатия оператор съответства ермитово спрегната матрица (в орто-нормиран базис).

7.2.3 Бра–кет означения

Термините “бра” и “кет” идват от “дисекцията” на английската дума “bracket”:



фиг. 48: Схема на английската етимология на термина “bra-ket”.

Оттук нататък:

- $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$ – стандартното n -мерно хилбертово пространство на вектор-стълбове $\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}$.
- Матриците $A \in Mat_n(\mathbb{C})$ ще се разглеждат също като линейни оператори, които действат на вектор-стълбовете $\Psi \in \mathbb{C}^n$, посредством матричното умножение, $A\Psi$.
- Скаларното произведение в $\mathbb{C}^n$, $\langle \Phi | \Psi \rangle = \Phi^* \Psi$ може удобно да се презапише, като вектор-стълба Ψ се означава, като “дясната половина” $|\Psi\rangle$, а ермитово спрегнатия вектор-ред Φ^* се означава, като “лявата половина” $\langle \Psi|$. При това междинната вертикал-

на черта в означението на скаларното произведение $\langle \Phi | \Psi \rangle$ се удвоява. Това ни доведе до бра-кет означенията, които схематично са дадени на долната фигура:

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \Phi^* \Psi \equiv (\bar{\phi}_1, \dots, \bar{\phi}_n) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}$$

$\underbrace{\langle \Phi |}_{\text{бра}} \underbrace{|| \Psi \rangle}_{\text{кет-вектор}}$

фиг. 49: Скаларното произведение в “бра-кет” означенията.

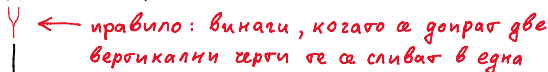
- Подробно: за всеки вектор-стълб $\Phi = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \vdots \\ \phi_n \end{pmatrix}$ ще пишем $\Phi =: |\Phi\rangle$ и ще го наречем също **кет-вектор**. Ермитово спрегнатия вектор-ред $\Phi^* = (\bar{\phi}_1, \dots, \bar{\phi}_n)$ ще наречем **бра-вектор** и ще го означим с $\langle \Phi| := \Phi^*$.

Така, поставянето на скобите “ $|\cdot\rangle$ ” и “ $\langle\cdot|$ ” на един вектор-стълб $\Phi \in \mathbb{C}^n$ ще разглеждаме, като едноместни операции върху $i\Phi$, първата от които, $\Phi \mapsto |\Phi\rangle$ е просто идентитета, $|\Phi\rangle \equiv \Phi$, докато втората, $\Phi \mapsto \langle\Phi|$, е ермитовото спрягане, $\langle\Phi| \equiv \Phi^*$, което прави вектор-стълбовете в вектор-редове и е анти-линейно.

Примери на бра-кет смятане:

- Първият пример е обръщането на равенството от фиг. 49, както е дадено на долната фигура:

$$\langle \Phi | \cdot | \Psi \rangle = \langle \Phi | \Psi \rangle$$

 ← правило: винаги, когато се допрат две вертикални линии те се сливат в една

фиг. 50: Матрично произведение ред $\times$ стълб = число (1×1 - матрица).

- И така, умножението бра $\times$ кет вектор е число – това е скаларното произведение. В обратния ред, кер $\times$ бра вектор е матрица,

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle \langle \Phi| &= \Psi \Phi^* = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} (\overline{\phi_1}, \dots, \overline{\phi_n}) \\ &= \begin{pmatrix} \psi_1 \overline{\phi_1} & \cdots & \psi_1 \overline{\phi_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_n \overline{\phi_1} & \cdots & \psi_n \overline{\phi_n} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (7.8)$$

(стълб $\times$ ред с една и съща дължина n дава квадратна $n \times n$ -матрица).

- Нека сега разгледаме произведенията на квадратните матрици получени преди мал-

ко, като “кет $\times$ бра” произведение. Нека Φ , Ψ , Φ' , $\Psi' \in \mathbb{C}^n$ са вектор-стълбове, тогава имаме следната формула

$$(|\Psi\rangle\langle\Phi|)(|\Psi'\rangle\langle\Phi'|) = (\langle\Phi|\Psi'\rangle) |\Psi\rangle\langle\Phi'|, \quad (7.9)$$

чийто извод е показан на долната фигура:

$$\begin{aligned} (|\Psi\rangle\langle\Phi|) \cdot (|\Psi'\rangle\langle\Phi'|) &= |\Psi\rangle \left(\underbrace{\langle\Phi|\Psi'\rangle}_{\text{число}} \right) \langle\Phi'| \\ &= |\Psi\rangle \left(\langle\Phi|\Psi'\rangle \right) \langle\Phi'| = \left(\langle\Phi|\Psi'\rangle \right) |\Psi\rangle\langle\Phi'| \end{aligned}$$

фиг. 51: Асоциативността на бра-кет означенията.

В частност, ако $\|\Phi\| := \sqrt{\langle\Phi|\Phi\rangle} = 1$ (единичен вектор), то

$$(|\Phi\rangle\langle\Phi|)^2 = |\Phi\rangle\langle\Phi|, \quad (7.10)$$

т.е., това е *идемпотент* в $\text{Mat}_n(\mathbb{C})$. Освен това,

$$(|\Phi\rangle\langle\Phi|)^* = |\Phi\rangle\langle\Phi|, \quad (7.11)$$

понеже, по-общо $(|\Psi\rangle\langle\Phi|)^* = (\Psi\Phi^*)^* = \Phi^{**}\Psi^* = \Phi\Psi^* = |\Phi\rangle\langle\Psi|$. И така, $|\Phi\rangle\langle\Phi|$ е

самоспрегнат идемпотент в $Mat_n(\mathbb{C})$, т.е., това е събитие в една неприводима квантова (чисто квантова) система от ниво n .

- Да презапишем ф-ла (7.3) за развитие на вектор в орто-нормиран базис в бра-кет означенията и да я преработим, както е показано на фигурата:

$$\begin{aligned}
 \Psi &= \langle e_1 | \Psi \rangle e_1 + \dots + \langle e_n | \Psi \rangle e_n \\
 \left(\begin{aligned}
 |\Psi\rangle &= (\langle e_1 | \Psi \rangle) |e_1\rangle + \dots + (\langle e_n | \Psi \rangle) |e_n\rangle \\
 \uparrow \cdot |\Psi\rangle &= (|e_1\rangle \langle e_1|) |\Psi\rangle + \dots + (|e_n\rangle \langle e_n|) |\Psi\rangle \\
 &= (|e_1\rangle \langle e_1| + \dots + |e_n\rangle \langle e_n|) |\Psi\rangle
 \end{aligned} \right.
 \end{aligned}$$

фиг. 52: Развитие в орто-нормиран базис в бра-кет означения.

Извод:

$$\hat{1} = |e_1\rangle \langle e_1| + \dots + |e_n\rangle \langle e_n|. \quad (7.12)$$

Това се проверява непосредствено за стандартния орто-нормиран базис в $\mathbb{C}^n$:

$$e_j = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad \leftarrow j\text{-та позиция} \quad (7.13)$$

Наистина:

$$\hat{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ & \ddots & & \\ 0 & & & 1 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}}_{\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} (10 \dots 0)} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}}_{\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} (01 \dots 0)} + \dots$$

Изходната формула обаче е в сила за всеки орто-нормиран базис $\{f_1, \dots, f_n\} \subseteq \mathbb{C}^n$.
Затова имаме:

$$\hat{1} = |f_1\rangle\langle f_1| + \dots + |f_n\rangle\langle f_n|. \quad (7.14)$$

Освен това, *то е разбиване на единицата*, понеже знаем вече, че $|f_j\rangle\langle f_j|$ са събития ($\|f_j\| = 1$) и също за $j \neq k$ имаме $(|f_j\rangle\langle f_j|)(|f_k\rangle\langle f_k|) = \underbrace{(\langle f_j|f_k\rangle)}_0 (|f_j\rangle\langle f_j|)$. Ние също ще видим след малко, че това е *максимално разбиване на единицата*. С това ще установим вече обявения резултат, че всеки максимален експеримент в една чисто квантова система е свързан с орто-нормиран базис в $\mathbb{C}^n$.

- Забележете: за действието на матрицата $A \in \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ върху вектор-стълб $\Psi \in$

$\mathbb{C}^n$ имаме следните алтернативи в бра-кет означенията:

$$A\Psi = A|\Psi\rangle = |A\Psi\rangle.$$

Същевременно,

$$\langle\Psi|A = \langle A^*\Psi|.$$

Имаме още:

$$\langle\Phi|A\Psi\rangle \equiv \langle\Phi|A|\Psi\rangle, \quad (7.15)$$

за вектори-стълбове $\Phi, \Psi \in \mathbb{C}^n$, което се нарича още общ “матричен елемент” на A , понеже в случаите, когато Φ и Ψ пробягват стандартния орто-нормиран базис, това наистина стават матричните елементи на матрицата A :

$$a_{jk} = \langle e_j | A | e_k \rangle$$

$$\equiv (0 \dots 1 \dots 0) \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1k} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ a_{j1} & \dots & a_{jk} & \dots & a_{jn} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nk} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

7.2.4 Ортогонални проектори = самос- прегнати идемпотенти = събития

Да си припомним теоремата за ортогонално разбиване в хилбертово пространство

Теорема. Нека $V \subseteq \mathbb{C}^n$ ($= \mathcal{H}$) е линейно подпространство на n мерно хилбертово пространство. Нека $V^\perp := \{\Phi | \underbrace{\langle \Phi | \Psi \rangle}_{\Phi \perp \Psi} = 0 \text{ за всяко } \Psi \in V\}$ – ортогоналното допълнение на V . Тогава $V \cap V^\perp = \{0\}$ и $\mathbb{C}^n = V \oplus V^\perp$, което е равносилно на това, че всеки вектор $\Theta \in \mathbb{C}^n$ се записва по единствен начин, като сума $\Theta = \Psi + \Phi$, за $\Phi \in V$ и $\Psi \in V^\perp$.

Определение. Въз основа на горната теорема определяме линейния оператор

$$P_V \Theta := \Phi, \quad (7.16)$$

ако $\Theta = \Psi + \Phi$ е разбиването по $\mathbb{C}^n = V \oplus V^\perp$. Така, $P_V : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$ е линеен оператор, който ще отъждествяваме с матрицата му $P \in \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ (както и другите линейни оператори върху $\mathbb{C}^n$). Казваме, че P_V е **отрогонален проектор** върху V .

Понеже за $\Psi \in V$ имаме $\Psi = \Psi + 0$, то от единствеността следва, че $P_V(P_V \Theta) = P_V \Psi =$

$$\Psi = P_V \Psi, \text{ т.е.,}$$

$$P_V^2 = P_V. \quad (7.17)$$

С други думи, P_V е *идемпотент* в $\text{Mat}_n(\mathbb{C})$, което фактически се явява алгебричния израз на геометричното понятие “проектор”. Освен това, като проектор, P_V има допълнителното свойство да бъде **ортогонален** проектор, понеже $P_V \Phi = 0$ тогава и само тогава, когато $\Phi \in V^\perp$. Оказва се, че последното е равносилно на това, че P_V е самоспрегнат. *Наистина, ако* еднозначното разлагане на векторите от $\mathbb{C}^n$ в сума по V и негово допълнение идва от алгебричното равенство $\hat{1} = P_V + (\hat{1} - P_V)$, като $\hat{1} - P_V$ е също идемпотент ($(\hat{1} - P_V)^2 = \hat{1} - P_V$, понеже $P_V^2 = P_V$); тогава образите на P_V и $\hat{1} - P_V$ ще са взаимно ортогонални, когато

$$\langle (\hat{1} - P_V)\Phi | P_V \Psi \rangle = 0$$

за всеки два вектора $\Phi, \Psi \in \mathbb{C}^n$; последното е равносилно на това, че $(\hat{1} - P_V)^* P_V = \hat{0}$, т.е., $P_V = P_V^* P_V$ и в частност, P_V е самоспрегнат.

И така, установихме първото “равенства” в заглавието на тази точка, което можем да запишем, като:

Теорема. Един линеен оператор $Q : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$ е ортогонален проектор $Q = P_V$ за единствено линейно подпространство $V \subseteq \mathbb{C}^n$, тогава и само тогава, когато Q е самоспрегнат идемпотент, т.е., когато Q е събитие в $\text{Mat}_n(\mathbb{C})$.

Така, имаме в частност 1–1 съответствие между събития и линейни подпространства. Това съответствие е изоморфизъм на орто-решетки:

Следствия. (i) $P_{V^\perp} = \hat{1} - P_V$

(ii) $V_1 \subseteq V_2 \iff P_{V_1} P_{V_2} = P_{V_1}$
 $\iff P_{V_2} P_{V_1} = P_{V_1}.$

7.2.5 Орто-нормирани базиси в подпространства и разбиване на събития

Теорема. Нека $V \subseteq \mathbb{C}^n$ е линейно подпространство. Нека $f_1, \dots, f_m \in V$ е орто-нормиран базис. Тогава,

$$P_V = |f_1\rangle\langle f_1| + \dots + |f_m\rangle\langle f_m|. \quad (7.18)$$

Доказателство. Нека продължим базиса до

орто-нормиран базис $f_1, \dots, f_m, f_{m+1}, \dots, f_n$ на $\mathbb{C}^n$. Тогава непосредствено се проверява, че в разлагането

$$|\Theta\rangle = (\langle f_1 | \Theta \rangle |f_1\rangle + \dots + (\langle f_n | \Theta \rangle |f_n\rangle$$

първите m члена дават ортогоналната проекция $P_V \Theta$. $\square$

7.2.6 Спектрална теорема за ермитови матрици

7.2.6.a Формулировка на спектралната теорема в хилбертово пространство

Напомняме: ермитова матрица = самоспрегнатата матрица = самоспрегнат елемент на $*$ -алгебрата $Mat_n(\mathbb{C})$ и в частност, за тях важи спектралната теорема от миналата лекция. Сега ще я свържем с “по-традиционната” ѝ форма, която е следната:

Теорема. Нека $A = A^* \in Mat_n(\mathbb{C})$ (ермитова матрица), тогава съществува орто-нормиран базис $f_1, \dots, f_n \in \mathbb{C}^n$, който се състои от собствени вектори за A с реални собствени стойности $\lambda_1, \dots, \lambda_n$. Тоест, $Af_j = \lambda_j f_j$.

7.2.6.b Връзка с алгебричната спектрална теорема

(i) В сила е равенството

$$A = \lambda_1 |f_1\rangle\langle f_1| + \cdots + \lambda_n |f_n\rangle\langle f_n| . \quad (7.19)$$

(Проверява се с непосредствена проверка върху базисните вектори.)

(ii) Тогава, ако подредим

$$\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_n$$

и въведем

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \lambda_1 = \cdots = \lambda_{k_1} \\ < \alpha_2 &= \lambda_{k_1+1} = \cdots = \lambda_{k_1+k_2} \\ &\vdots \\ < \alpha_m &= \lambda_{k_1+\cdots+k_{m-1}+1} = \cdots = \lambda_{k_1+\cdots+k_m} \\ &\equiv \lambda_n , \end{aligned}$$

което дава разбиване $k_1 + \cdots + k_m = n$. Тогава ф-ла (7.19) дава:

$$\begin{aligned} A &= \alpha_1 \underbrace{(|f_1\rangle\langle f_1| + \cdots + |f_{k_1}\rangle\langle f_{k_1}|)}_{:= Q_1} \\ &+ \alpha_2 \underbrace{(|f_{k_1+1}\rangle\langle f_{k_1+1}| + \cdots + |f_{k_1+k_2}\rangle\langle f_{k_1+k_2}|)}_{:= Q_2} \end{aligned}$$

$$+ \cdots + \alpha_m Q_m,$$

което е точно спектралното разбиване на A , съгласно алгебричната спектрална теорема от миналата лекция.

7.2.6.c Положителна дефинитност на матрици

Като непосредствено следствие от спектралната теорема получаваме следното уточнение на теоремата за положителна дефинитност на матрици от миналата лекция .

Теорема. Нека $A \in \text{Mat}_n(\mathbb{C})$, тогава следните условия са еквивалентни:

- (1) A е неотрицателен елемент на $*$ -алгебрата $\text{Mat}_n(\mathbb{C})$ (т.е., $A = C_1^* C_1 + \cdots + C_k^* C_k$ в $\text{Mat}_n(\mathbb{C})$).
- (2) $A = B^2$ за ермитова матрица B .
- (3) A е ермитова матрица, чийто собствени числа са неотрицателни.
- (4) За всеки $\Psi \in \mathbb{C}^n$: $\langle \Psi | A \Psi \rangle \geq 0$.

В кой да е от горните случаи казваме, че A е **положително дефинитна матрица** и ще пишем $A \geq 0$.

7.2.6.d Обобщената спектрална теорема и нейната интерпретация

Теорема. Нека $A, B, \dots, C \in \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ са ермитови матрици, които комутират две по две:

$$\begin{aligned} AB &= BA, \dots, AC = CA, \dots, \\ BC &= CB, \dots \end{aligned}$$

Тогава съществува орто-нормиран базис, който се състои от общи собствени вектори:

$$\begin{aligned} Af_j &= \lambda_j f_j, \\ Bf_j &= \mu_j f_j, \\ &\vdots \\ Cf_j &= \nu_j f_j. \end{aligned} \tag{7.20}$$

Интерпретация.

- Множеството от наборите от числа $(\lambda_j, \mu_j, \dots, \nu_j)$ се нарича **съвместен спектър** на взаимно комутиращите наблюдаеми $A, B, \dots, C$. Наличието на съвместния спектър пряко изразява съвместната измеримост на наблюдаеми.
- В квантовата теория числата $(\lambda_j, \mu_j, \dots, \nu_j)$ се наричат **квантови числа** на системата.

Ако за различни j наборите $(\lambda_j, \mu_j, \dots, \nu_j)$ са различни, тогава казваме, че имаме “**максимален набор от квантови числа**” – това съответства на информация от максимален експеримент.

- Например: електрона в един атом има пълен набор от четири квантови числа (n, m, ℓ, s) , които се изучават в атомната физика, но са и в основата на химията. Тези числа се наричат:
 - “главно квантово число” $n \in \{1, 2, \dots\}$. То номерира електронните слоеве.
 - “Орбитално квантово число” $\ell \in \{0, 1, \dots\}$. То номерира “електронните орбитали”, които в химията също ги наричат “ s –”, “ p –”, “ d –” и т.н. орбитали, когато $\ell = 0, 1, 2$, и т.н., съответно.
 - “Магнитно квантово число” $m \in \{-\ell, -\ell + 1, \dots, +\ell\}$.
 - “Спиново квантово число” $s = \pm \frac{1}{2}$. По някой път, тези две алтернативи на s се изобразяват графично, като “ $\uparrow$ ” и “ $\downarrow$ ”.

7.2.6.e Нов тип бра-кет означения

Ако имаме пълен набор квантови числа $(\lambda_j, \mu_j, \dots, \nu_j)$, които съответстват на ортонормирания базис f_j от последната теорема, тогава въвеждаме означение:

$$f_j =: |\lambda_j, \mu_j, \dots, \nu_j\rangle . \quad (7.21)$$

Забележете, в новото означение:

$$| \underbrace{\lambda_j, \mu_j, \dots, \nu_j}_{\substack{\text{вътре стои} \\ \text{“информация”} \\ \text{за базисния} \\ \text{вектор}}} \rangle .$$

По такъв начин, в новото означение (7.21) ф-ла (7.20) се записва така:

$$\begin{aligned} A |\lambda, \mu, \dots, \nu\rangle &= \lambda |\lambda, \mu, \dots, \nu\rangle , \\ B |\lambda, \mu, \dots, \nu\rangle &= \mu |\lambda, \mu, \dots, \nu\rangle , \\ &\vdots \\ C |\lambda, \mu, \dots, \nu\rangle &= \nu |\lambda, \mu, \dots, \nu\rangle , \end{aligned} \quad (7.22)$$

където набора $(\lambda, \mu, \dots, \nu)$ пробягва съвместния спектър на $A, B, \dots, C$.

В някои случаи дори самия индекс на базисния вектор служи, като информацията, която се поставя в скобите. Например,

$$e_j =: |j\rangle . \quad (7.23)$$

В този случай следва обаче да се помни и внимава, че в скобите не стои вектор, а само “информация за вектор”. Това е важно, защото ние ще продължим да ползваме бракет означенията от точка 7.2.3, които ще наричаме **бра-кет означения от първи вид**, а означенията от ф-ли (7.21) и (7.23) ще наричаме **бра-кет означения от втори вид**. Много често, контекста ще бъде този, който ще решава вида на бра-кет означенията: ако в скобите “ $|\cdot\rangle$ ” и “ $\langle\cdot|$ ” стои вектор на хилбертовото пространство на състоянията, то това ще бра-кет означенията от първия вид, а ако вътре стоят други обекти и най-вече индекси на базисни вектори, то това са бра-кет означенията от втория вид. Забележете също, че втория вид бра-кет означения се отнася изключително само за векторите от един специално избран орто-нормиран базис (който е например, от интерес в

даден изследван проблем), докато при първия вид бра-кет означения се получават всички вектори на хилбертовото пространство (и всъщност, имаме линейност по аргумента в скобите “ $|\bullet\rangle$ ”).

Една от най-основните употреби на бра-кет означенията от втория вид е в задачите за квантови изчисления, където ще имаме избран орто-нормиран базис, наречен “изчислителен базис” и този базис ще означаваме с

$$|a_1, a_2, \dots, a_n\rangle,$$

където $a_1, a_2, \dots, a_n \in \{0, 1\}$ ще са стойностите на кубитите. Това обаче ще отложим до десетата лекция, а в тази и в следващата лекция ще продължим да работим единствено с бра-кет означенията от първия вид.

7.2.7 Неравенства на Коши–Шварц и приложенията им

Неравенството на Коши–Шварц (Cauchy–Schwartz) за скаларното произведение $\langle\Phi|\Psi\rangle$ в едно хилбертово пространство $\mathcal{H} =: (\mathbb{C}^n)$ $\ni \Phi, \Psi$ гласи, че

$$|\langle\Phi|\Psi\rangle| \leq \|\Phi\| \|\Psi\|, \quad (7.24)$$

като равенство се достига тогава и само тогава, когато Φ и Ψ са пропорционални вектори. Неравенството (7.24) е аналога на неравенството от евклидовата геометрия, че “косинуса на ъгъла между два вектора е по модул ≤ 1 ” (наистина, можем да положим, както в евклидовата геометрия $\langle \Phi | \Psi \rangle =: \|\Phi\| \|\Psi\| \cos \vartheta$).

Еквивалентна форма на неравенството (7.24) е:

$$|\langle \Phi | \Psi \rangle|^2 \leq \langle \Phi | \Phi \rangle \langle \Psi | \Psi \rangle. \quad (7.25)$$

Всъщност, в последната си форма, неравенството на Коши–Шварц може да се формулира за всяка т.нар. ермитова, неотрицателно дефинитна, билинейна форма в едно комплексно линейно пространство. В частност, такава ситуация възниква и за алгебрата на наблюдаемите $\mathcal{A}$ в най-общия случай на квантови системи и за произволно състояние ρ . В сила е, че за всеки $A, B \in \mathcal{A}$:

$$|\rho(A^* B)|^2 \leq \rho(A^* A) \rho(B^* B). \quad (7.26)$$

Едно от най-първите приложения на (7.26) е, ако вземем $A = Q$ да е събитие ($Q^* = Q =$

Q^2) и $B = \hat{1}$:

$$\left| \rho(\underbrace{Q^*}_{Q} \underbrace{\hat{1}}_{\hat{1}}) \right|^2 \leq \rho(\underbrace{Q^* Q}_{Q^2 = Q}) \rho(\underbrace{\hat{1}^* \hat{1}}_{\hat{1}}),$$

т.е., $|\rho(Q)|^2 \leq \rho(Q)$, от където следва в частност, че $\rho(Q) \geq 0$. Затова, $|\rho(Q)| = \rho(Q)$ и $0 \leq \rho(Q)^2 \leq \rho(Q)$. В крайна сметка получаваме:

Следствие. За всяко събитие Q и състояние ρ на една най-обща квантова система е в сила $\rho(Q) \in [0, 1]$.

Следователно, $\rho(Q)$ може наистина да се интерпретира, както вероятност.

Следствие. За всеки единичен вектор $\Psi \in \mathcal{H}$ ($:= \mathbb{C}^n$) линейния функционал $\rho_\Psi : \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \rightarrow \mathbb{C} : A \mapsto \rho_\Psi(A) := \langle \Psi | A | \Psi \rangle$ ($\equiv \langle \Psi | A \Psi \rangle$) е състояние над $\text{Mat}_n(\mathbb{C})$, т.е., $\rho_\Psi(\hat{1}) = 1$ и $\rho_\Psi(A^* A) \geq 0$ за всяка $A \in \text{Mat}_n(\mathbb{C})$

Схемата на доказателството е дадена в долната фигура:

$$\begin{aligned}
 \rho_{\Psi}(\hat{1}) &= \langle \Psi | \hat{1} | \Psi \rangle \\
 &= \langle \Psi | \cdot | \Psi \rangle = \langle \Psi | \Psi \rangle = \|\Psi\|^2 = 1 \\
 \rho_{\Psi}(A^*A) &= \langle \Psi | A^*A \Psi \rangle \\
 &= \langle A\Psi | A\Psi \rangle (= \|A\Psi\|^2) \geq 0 \\
 \rho_{\Psi}(Q) &= \|Q\Psi\|^2
 \end{aligned}$$

фиг. 53: Доказателството схематично. На последния ред резултата е приложен за събитие Q : получаваме важна формула за вероятността на събитие в състоянието ρ_{Ψ} .

Да отбележим важен резултат от горния извод:

$$\rho_{\Psi}(Q) = \|Q\Psi\|^2, \quad (7.27)$$

което е вероятността за събитието Q в състояние с вектор Ψ . В следващата точка ще покажем, че чистите състояния на една неприводима квантова система от ниво n са тези и само тези, които са от вида ρ_{Ψ} .

7.2.8 Окончателно установяване на логическата наредба на събитията в алгебричния подход, както и нейното съвпадение с тази на квантово-логическия подход

До тук установихме следните съвпадения (или още, еквивалентности) на обекти: събитие Q в $Mat_n(\mathbb{C})$ това по определение е

= самоспрегнат идемпотент Q в $Mat_n(\mathbb{C})$

= ортогонален проектор хилбертовото пространство $\mathbb{C}^n$

$\Leftrightarrow$ линейно подпространство $V \subseteq \mathbb{C}^n$, като $Q = P_V$.

Теорема. Нека $Q_1 = P_{V_1}$ и $Q_2 = P_{V_2}$ са събития. Тогава следните условия са еквивалентни:

(1) За всяко състояние ρ :

$$Prob_\rho(Q_1) = 1 \implies Prob_\rho(Q_2) = 1.$$

(2) За всяко състояние ρ :

$$Prob_\rho(Q_1) \leq Prob_\rho(Q_2).$$

$$(3_1) \quad Q_1 Q_2 = Q_1.$$

$$(3_2) \quad Q_2 Q_1 = Q_1.$$

$$(4) \quad Q_2 - Q_1 \geq \hat{0}$$

(т.е., $Q_2 - Q_1$ е положително дефинитна

матрица).

$$(5) \quad V_1 \subseteq V_2.$$

Да припомним, че за състояние ρ и събитие Q : $Prob_{\rho}(Q) = \rho(Q)$.

Също ще въведем конвенцията: $Prob_{\Psi}(Q) := Prob_{\rho_{\Psi}}(Q)$.

Доказателството се извършва по схемата:

$$(2) \Rightarrow (1) \Rightarrow (5) \Rightarrow (3_1) \Leftrightarrow (3_2) \Rightarrow (4) \Rightarrow (2).$$

$$(2) \Rightarrow (1)) \text{ Очевидно.}$$

$$(1) \Rightarrow (5)) \text{ Понеже за } \rho = \rho_{\Psi} \text{ и } j = 1, 2 \text{ имаме } 1 = Prob_{\rho_{\Psi}}(P_{V_j}) = \rho_{\Psi}(P_{V_j}) = \|P_{V_j}\Psi\|^2 \Leftrightarrow \Psi \in V_j.$$

$$(5) \Rightarrow (3_1) \Leftrightarrow (3_2)) \text{ Непосредствено: ако } V_1 \subseteq V_2, \text{ то } P_{V_1}P_{V_2} = P_{V_1} = P_{V_2}P_{V_1}.$$

$$(3) \Rightarrow (4)) \text{ Това е защото, първо } Q_2 - Q_1 = (Q_2 - Q_1)^2 \text{ (понеже, дясната страна е } Q_2^2 + Q_1^2 - Q_1Q_2 - Q_2Q_1 = Q_2 - Q_1). \text{ Но тогава } Q_2 - Q_1 \text{ е квадрат на наблюдаема.}$$

$$(4) \Rightarrow (2)) \text{ Това следва, защото ако } Q_2 - Q_1 \geq \hat{0} \text{ и } \rho \text{ е положителен линеен функционал, то } \rho(Q_2 - Q_1) \geq 0. \quad \square$$

Следствие. Елементарните събития на една чисто квантова система с алгебра на

наблюдаемите $\text{Mat}_n(\mathbb{C})$ са в 1 – 1 съответствие с едномерните линейни подпространства на хилбертовото пространство $\mathbb{C}^n$. Това са самоспрегнатите проектори от вида $|\Psi\rangle\langle\Psi|$ за единичен вектор $\Psi \in \mathbb{C}^n$. В частност, всеки максимален експеримент отговаря на орто-нормиран базис $f_1, \dots, f_n \in \mathbb{C}^n$ и разбиването на единицата $\hat{1} = |f_1\rangle\langle f_1| + \dots + |f_n\rangle\langle f_n|$.

Доказателството следва непосредствено от доказаните резултати.

7.3 Състояния: матрици на плътността и вектори на състояния

7.3.1 Общ вид на състояние чрез следа

За простота ще започнем със случая на квантов бит с алгебра на наблюдаемите $Mat_2(\mathbb{C})$. Общият вид на линеен функционал $\rho : Mat_2(\mathbb{C}) \rightarrow \mathbb{C}$:

$$\rho \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \rho(a_{11}, a_{12}, a_{21}, a_{22})$$

– това е комплексна линейна функция на четири комплексни числа и общият ѝ вид е:

$$= \rho_{11} a_{11} + \rho_{21} a_{12} + \rho_{12} a_{21} + \rho_{22} a_{22}$$

– зависи отново от четири комплексни числа, които за удобство, което след малко ще стане ясно, сме означили по огледален начин: ρ_{11} , ρ_{21} , ρ_{12} , ρ_{22} . Това са параметрите на общо състояние на един квантов бит.

Нека сега да организираме параметрите на състоянието отново, като 2×2 -матрица

$$\begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} =: \hat{\rho}$$

и да я наречем **матрица на плътността** на състоянието ρ . Причината за това име ще стане ясна след малко. За момента, нека да се опитаме да изразим стойността на функционала $\rho(a_{11}, a_{12}, a_{21}, a_{22}) = \rho_{11}a_{11} + \rho_{21}a_{12} + \rho_{12}a_{21} + \rho_{22}a_{22}$, чрез матриците $\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix}$, и матричната алгебра. За целта забелязваме, че ако ги умножим

$$\begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_{11}a_{11} + \rho_{12}a_{21} & \rho_{11}a_{12} + \rho_{12}a_{22} \\ \rho_{21}a_{11} + \rho_{22}a_{21} & \rho_{21}a_{12} + \rho_{22}a_{22} \end{pmatrix}$$

и в получената матрица съберем диагоналните елементи, то получаваме нужния ни резултат. Интересно е също, че ако ги умножим в обратен ред, пак ни вършат същата работа:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}\rho_{11} + a_{12}\rho_{21} & a_{11}\rho_{12} + a_{12}\rho_{22} \\ a_{21}\rho_{11} + a_{22}\rho_{21} & a_{21}\rho_{12} + a_{22}\rho_{22} \end{pmatrix}.$$

Това е така, защото произведението на комплексните числа ρ_{jk} и a_{kj} е комутативно.

Направените начални разсъждения за общия вид на състояние могат да се обобщят непосредствено за всяка квантова система и ни водят до важното математическо понятие за **следа** в асоциативна алгебра. Ние ще означим следата с Tr и по такъв начин общият вид на състояние на кубит ще се запише, като

$$\rho \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = Tr \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}. \quad (7.28)$$

Първо ще въведем математическата теория на това понятие и след това ще доизследваме, какви условия са необходими за матрицата на плътността $\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix}$ за да даде състояние общия вид (7.28).

7.3.2 Следа на матрица: определение и свойства

- По определение, **следа** се въвежда само за квадратни матрици: това е сумата на диагоналните им елементи.⁶⁷ С формули,

⁶⁷надяваме се, че на всички веднага им е станало ясно, защо матриците трябва да са диагонални – само там има диагонал

това се записва така: следата се означава с “ Tr ” и се дава от израза

$$Tr \begin{pmatrix} c_{11} & \cdots & c_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ c_{n1} & \cdots & c_{nn} \end{pmatrix} := c_{11} + c_{22} + \cdots + c_{nn} \\ \equiv \sum_{j=1}^n c_{jj} . \quad (7.29)$$

• Свойства.

(цикличност) $Tr AB \cdots C = Tr B \cdots CA$.

Това свойство е в сила дори и за правоъгълни матрици $A, B, \dots, C$, стига произведението им $AB \cdots C$ да е квадратна матрица. Трябва да се има предвид, че в последния случай обаче двете произведения $AB \cdots C$ и $B \cdots CA$ ще бъдат с различни размери и това трябва да се отчита, по отношение на свойствата на следата, които зависят от размера (например, следващото свойство тук). Примерът който сме разгледали по-долу е именно такъв.

(нормировка)₁ $Tr \hat{1} = n$ – ето тук размера на квадратната матрица, върху която се

взема следата, има значение. Всъщност, строго погледнато, следата не е само една, а за всеки размер n следата е отделно линейно изображение $Tr_n : Mat_n(\mathbb{C}) \rightarrow \mathbb{C}$.

$$(\text{нормировка})_e \quad Tr(\text{елементарно събитие}) = 1.$$

• Пример.

$$\begin{aligned} Tr \left(\underbrace{A}_{n \times n} \underbrace{|\Psi\rangle\langle\Psi|}_{n \times 1} \underbrace{\quad}_{1 \times n} \right) &= Tr(A \Psi \Psi^*) \\ &= Tr(\Psi^* A \Psi) \equiv Tr \left(\underbrace{\langle\Psi|}_{1 \times n} \underbrace{A}_{n \times n} \underbrace{|\Psi\rangle}_{n \times 1} \right) \end{aligned}$$

(число)

Но следата на число е самото число, така че получаваме формулата:

$$Tr(A |\Psi\rangle\langle\Psi|) = \langle\Psi|A\Psi\rangle. \quad (7.30)$$

Теорема. Ако A е матрица със собствени стойности $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, то $Tr A = \lambda_1 + \dots + \lambda_n$.

Доказателството следва от това, че в този случай съществува обратима матрица C , такава че $CAC^{-1} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n) \xrightarrow{Tr} \lambda_1 + \dots + \lambda_n$. $\square$

Теорема. Нека $\mathcal{A}$ е алгебрата на наблюдаемите на произволна (крайна) квантова система. Тогава съществува единствен линеен функционал $\tau : \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{C}$, който има свойството

$$(\text{цикличност}) \quad \tau(AB) = \tau(BA),$$

за всеки $A, B \in \mathcal{A}$;

$$(\text{нормировка}) \quad \tau(\text{елементарно събитие}) = 1.$$

Така, в случая $\mathcal{A} = \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ имаме, че $\tau = \text{Tr}$.

- **Интерпретация.** За наблюдаема това е “квантова сума по стойностите ѝ.” За събития, това е неговата “квантова мощност” или още, нивото на събитието.

7.3.3 Характеризация на матриците на плътността

Теорема. Всеки линеен функционал $\rho : \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \rightarrow \mathbb{C}$ може да се представи във вида

$$\rho(A) = \text{Tr} \hat{\rho} A \quad (7.31)$$

($\forall A \in \text{Mat}_n(\mathbb{C})$), за единствена матрица $\hat{\rho} \in \text{Mat}_n(\mathbb{C})$. При това:

$$(1) \quad \rho \text{ е нормиран (т.е., } \rho(\hat{1}) = 1) \Leftrightarrow \text{Tr} \hat{\rho} = 1.$$

(2) ρ е положителен (т.е., $\rho(A^*A) \geq 0$ за всяко $A \in \text{Mat}_n(\mathbb{C})$) $\Leftrightarrow \hat{\rho} \geq \hat{0}$ (т.е., $\hat{\rho}$ е положително дефинитна матрица).

Матрицата $\hat{\rho}$ ще наричаме **матрица на плътността на състоянието** ρ (както вече направихме в точка 7.3.1).

Доказателство. Съществуването и единствеността на матрицата $\hat{\rho}$ се доказва, както в точка 7.3.1 при $n = 2$. Подтвърждение (1) се доказва непосредствено, а за (2) имаме: $0 \leq \rho(|\Psi\rangle\langle\Psi|) = \text{Tr}(\hat{\rho} |\Psi\rangle\langle\Psi|) = \langle\Psi|\hat{\rho}|\Psi\rangle \Leftrightarrow \hat{\rho} \geq \hat{0}$. $\square$

В частност, матрицата на плътността е *ермитова*, т.е., тя определя наблюдаема, която също може да се нарече “наблюдаема на плътността”. Всъщност, точно това трябва да имаме предвид, когато говорим за матрица на плътността, а именно, че матрица в този случай замества термина наблюдаема (която се описва с матрица).

Сега ще поясним значението на “плътността” в термина Първо, формулата за средната стойност на наблюдаема A в състояние ρ сега

придобива вида:

$$\langle A \rangle_\rho = \text{Tr} \hat{\rho} A = \text{Tr} A \hat{\rho}, \quad (7.32)$$

т.е., средната стойност на A се дава от “квантовата сума по стойностите на квантовото произведение на A по ρ . С други думи, наблюдаемата на плътността може да се интерпретира, като “квантовата плътност на вероятността спрямо квантовата бройна мярка” или по-просто казано, това е “квантовото вероятностно разпределение” на състоянието ρ .

В класическия случай имаме: $\langle A \rangle_\rho = \rho_1 a_1 + \dots + \rho_n a_n$, където

$$\begin{array}{ccc} \Omega = \{\omega_1, \dots, \omega_n\} \\ \downarrow \quad \downarrow \quad \downarrow \\ \mathbb{R} \ni a_1, \dots, a_n \end{array}$$

наблюдаемата
е функция върху Ω

$$\begin{array}{ccc} \Omega = \{\omega_1, \dots, \omega_n\} \\ \downarrow \quad \downarrow \quad \downarrow \\ [0,1] \ni \rho_1, \dots, \rho_n \end{array}$$

вероятностното разпределение
е функция върху Ω

7.3.4 Поведение на матриците на плътността при смесване

Нека $\rho = q_1\rho_1 + q_2\rho_2$ е смес на състоянията ρ_1 и ρ_2 с тегла $q_1, q_2 \in [0, 1]$ ($q_1 + q_2 = 1$). Ако $\hat{\rho}$, $\hat{\rho}_1$ и $\hat{\rho}_2$ са матриците на плътността на ρ , ρ_1 и ρ_2 , съответно, то еквивалентния израз на смесването се дава по формулата:

$$\hat{\rho} = q_1 \hat{\rho}_1 + q_2 \hat{\rho}_2. \quad (7.33)$$

7.3.5 Чисти състояния и вектори на състояния

Теорема. *Едно състояние ρ над $Mat_n(\mathbb{C})$ е чисто тогава и само тогава, когато ρ е от вида ρ_Ψ за единичен вектор $\Psi \in \mathbb{C}^n$. В този случай матрицата на плътността е $\hat{\rho}_\Psi = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ (което е също елементарно събитие).*

И така, ρ да бъде чисто състояние е равносилно на $\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ за единичен вектор $\Psi \in \mathbb{C}^n$. Векторът Ψ се нарича **вектор на състоянието**, а хилбертовото пространство $\mathbb{C}^n$, на което Ψ принадлежи се нарича **(хилбертово) пространство на състоянията**. Така, средната стойност на

наблюдаема A в чисто състояние ρ с вектор Ψ се дава по формулата

$$\langle A \rangle_\rho =: \langle A \rangle_\Psi = \langle \Psi | A \Psi \rangle, \quad (7.34)$$

понеже $\text{Tr}(\hat{\rho}A) \equiv \text{Tr}(|\Psi\rangle\langle\Psi|A) = \langle \Psi | A \Psi \rangle$.

Също така,

$$|\Psi\rangle\langle\Psi| = |\Phi\rangle\langle\Phi| \iff \Phi = e^{i\varphi} \Psi, \quad (7.35)$$

за $\varphi \in \mathbb{R}$. Тоест, векторът на състоянието е определен от състоянието с точност до пропорционалност и понеже, векторите на състояние са винаги единични, то коефициента на пропорционалност между вектори, определящи едно и също състояние, е комплексно число по модул 1 (т.е., то е от вида на експонента от имагинерно число).

7.3.6 1–1 съответствие между елементарни събития и чисти състояния. Вероятност за преход

Съгласно резултатите до тук:

- Q е елементарно събитие $\Leftrightarrow Q = |\Psi\rangle\langle\Psi|$,
за единичен вектор $\Psi \in \mathbb{C}^n$;
- ρ е чисто състояние $\Leftrightarrow \hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$,
за единичен вектор $\Psi \in \mathbb{C}^n$.

Получаваме 1 – 1 съответствие:

$$\begin{array}{ccc} \text{елементарни} & & \text{чисти} \\ \text{събития} & \longleftrightarrow & \text{състояния} \end{array} \quad (7.36)$$

$$Q = |\Psi\rangle\langle\Psi| = \hat{\rho}.$$

Забележете, че

$$\left. \begin{array}{l} \text{елементарното събитие } Q \\ \text{съответства на} \\ \text{чистото състояние } \rho \end{array} \right\} \Longleftrightarrow$$

$$Prob_{\rho}(Q) = 1. \quad (7.37)$$

Така, 1 – 1 съответствието между елементарни събития и чисти състояния може да се изкаже и по всеки от следните два еквивалентни начина:

- за всяко елементарно събитие Q съществува единствено чисто състояние ρ , в което Q настъпва с вероятност 1, и също
- за всяко чисто състояние ρ съществува единствено елементарно събитие Q , което ρ настъпва с вероятност 1.

Нека $Q = |\Psi\rangle\langle\Psi| = \hat{\rho}$ и $P = |\Phi\rangle\langle\Phi| = \hat{\eta}$ са съответстващи си елементарно събитие – чисто състояние. Тогава

$$Prob_{\rho}(P) = |\langle\Psi|\Phi\rangle|^2 = Prob_{\eta}(Q)$$

$$=: \text{вероятност за преход} \quad (7.38)$$

между Q и P или между ρ и η . Това следва от горните формули (кой?). Изказано с думи: ако

$$Q \leftrightarrow \rho,$$

$$P \leftrightarrow \eta,$$

са съответни, то вероятността за настъпване на събитието P в състояние ρ е същата, като тази за настъпване на събитието Q в състояние η . При това, тези две равни вероятности, са също равни и на модула на квадрат на скаларното произведение на двата вектора на състояние.

На този етап, “вероятността за преход” (7.38) има смисъл само на вероятност за кръстосани измервания без да е ясно от къде идва “прехода”. Това ще стане ясно в следващата лекция. За момента “вероятността за преход” (7.38) може да се разглежда, като количествен израз на “инцидентността” между елементарните събития от една страна, или между чистите състояния, от друга страна.

7.3.7 Състоянията на квантовия бит

Да се върнем на общия вид на наблюдаема на един кубит от точка 7.1, $A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} r+z & x-iy \\ x+iy & r-z \end{pmatrix}$, за реални параметри x, y, z , и r и да видим, кога тя изпълнява условията за матрица на плътността от теоремата в точка 7.3.3. Те бяха:

- следа $= 1$, което дава $\text{Tr } A = 1 \Leftrightarrow r = 1$.
- Положителна дефинитност: $A \geq \hat{0} \Leftrightarrow$ собствените стойности на A са неотрицателни (A вече е ермитова). Намираме собствените стойности на A :

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \sqrt{r \pm (x^2 + y^2 + z^2)}. \quad (7.39)$$

(Те се намират от уравнението за собствени стойности, т.е., от *характеристичното уравнение* на A : $0 = \det(A - \lambda \hat{1}) = \frac{1}{4} \det \begin{pmatrix} r+z & x-iy \\ x+iy & r-z \end{pmatrix} = \frac{1}{4} ((r-2\lambda)^2 - x^2 - y^2 - z^2)$.) И така, $A \geq \hat{0} \Leftrightarrow r - (x^2 + y^2 + z^2) \geq 0$.

Окончателно, общия вид на матрица на плътността на състояние на кубит е:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+z & x-iy \\ x+iy & 1-z \end{pmatrix}$$

за $x^2 + y^2 + z^2 \leq 1$

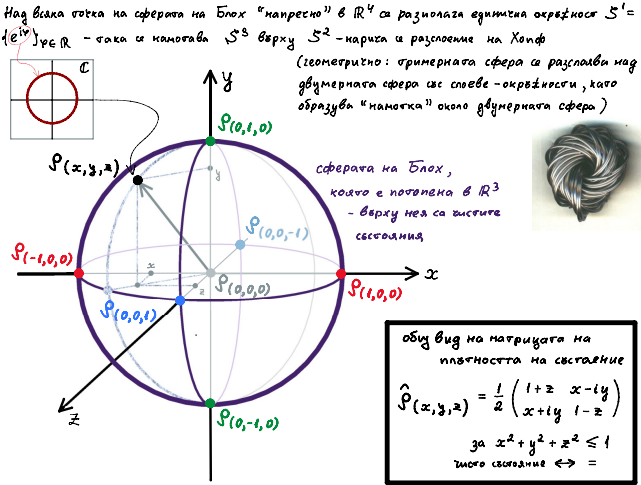
и следователно (съгласно точка 7.3.4), *както изпъкнало множество, множеството на състоянията на квантовия бит е изоморфно на затвореното единично кълбо в тримерното пространство*. Границата на това кълбо са чистите състояния, това е сферата на Блох, които от друга страна, както вече установихме (по два начина!), съответстват на елементарните събития на кубита.

Внимание: единичните вектори $\Psi = \begin{pmatrix} a+ib \\ c+id \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^2$ се определят от четири реални числа a , b , c , и d , такива че $1 = \|\Psi\|^2 = |a+ib|^2 + |c+id|^2 = a^2 + b^2 + c^2 + d^2$, което е пак условие за единична сфера, но в $\mathbb{R}^4$, а не в $\mathbb{R}^3$, както беше за чистите състояния за кубит. Защо?

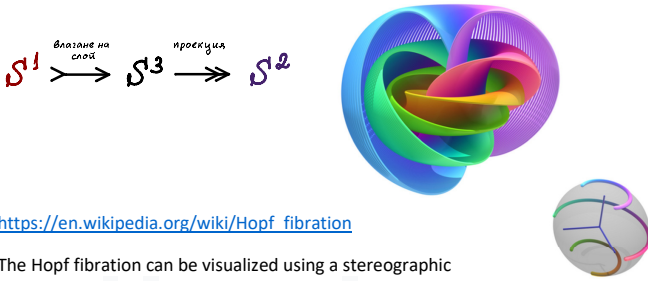
Отговор: защото едно чисто състояние не определя само един единичен вектор Ψ , а ця-

ло множество от вида $\{e^{i\varphi}\Psi\}_{\varphi\in\mathbb{R}}$, което е изоморфно на единичната окръжност. И така, получаваме следната картина за чистите състояния на кубит: като екстремални точки (а в случая и граница) на изпъкнало множество те са изоморфни на единичната сфера в $\mathbb{R}^3$; над всяка точка на тази сфера, пренесена в $\mathbb{R}^4$, се разполагат, без да се пресичат, по една единична окръжност, формирайки по такъв начин единичната сфера в $\mathbb{R}^4$; последната на свой ред описва всевъзможните вектори на състоянията на един кубит. Получената геометрична конструкция се нарича **разслоение на Хопф**.

Получените резултати са илюстрирани сумарно на долните фигури:



фиг. 54: Обща картина на състоянията на квантовия бит.



The Hopf fibration can be visualized using a stereographic projection of S^3 to $\mathbb{R}^3$ and then compressing $\mathbb{R}^3$ to a ball. This image shows points on S^2 and their corresponding fibers with the same color.

фиг. 55: Разслоението на Хопф.

7.4 Суперпозиция на вектори на състояния $\neq$ смес на състояния

Вече знаем, че чистите състояния на една неприводима квантова система от ниво n се определят от единичните вектори $\Psi \in \mathbb{C}^n$, т.е., вектори на n -мерно хилбертово пространство $\mathcal{H}$ ($= \mathbb{C}^n$).

Ще подчертаем специално две от най-важните тънкости тук:

- (1) не всички вектори на хилбертовото пространство на състоянията са вектори на състояния, а само единичните вектори;
- (2) само чистите състояния има вектори на състояние;
- (3) и всяко чисто състояние има безкрайно много вектори на състоянието: два единични вектора $\Psi, \Psi' \in \mathbb{C}^n$ определят едно и също състояние тогава и само тогава, когато $\Psi' = e^{i\varphi}\Psi$ за някакво $\varphi \in \mathbb{R}$.

В светлината на последната особеност (3) е особено важно да се следи, когато определяме някакъв наблюдаем ефект посредством

вектори на състояние дали това зависи от избора на представител на вектор за дадените състояния. Да разгледаме няколко примера за това:

(a) Средната стойност на наблюдаема $A \in \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ в чисто състояние с вектор $\Psi \in \mathbb{C}^n$ се дава по формулата на Дирак, $\langle A \rangle_\Psi = \langle \Psi | A \Psi \rangle$, но дясната страна не зависи от избора на вектора Ψ , който представя състоянието, а само от състоянието:

$$\langle A \rangle_\Psi = \langle \Psi | A \Psi \rangle = \langle \Psi' | A \Psi' \rangle$$

$$(\langle e^{i\varphi} \Psi | A e^{i\varphi} \Psi \rangle)$$

(b) Оставяме на читателя да провери, като аналогично упражнение, че и вероятността за преход от ф-ла (7.38) е също пример на величина, която не зависи от избраните вектори представляващи състоянията, а само от състоянията.

(c) Следва един важен, но отрицателен пример. Да разгледаме линейна комбинация на

два вектора на състояние, Ψ' и $\Psi'' \in \mathbb{C}^n$:

$$\Psi := \alpha' \Psi' + \alpha'' \Psi'', \quad (7.40)$$

за комплексни числа α' и α'' подбрани специално, така че резултантния вектор Ψ да е отново единичен и следователно, пак да определя състояние. Във физиката, описаната операция се нарича:

суперпозиция на вектори на състояние
 $:=$ линейна комбинация.

Суперпозицията обаче не води до операция върху състоянията, понеже зависи от избора на представителните вектори Ψ' и Ψ'' . Наистина, ако изберем други представители, $\Psi' \mapsto e^{i\varphi'} \Psi'$ и $\Psi'' \mapsto e^{i\varphi''} \Psi''$, то

$$e^{i\varphi'} \Psi' + e^{i\varphi''} \Psi'' \neq e^{i\varphi} (\alpha' \Psi' + \alpha'' \Psi''),$$

ако $e^{i\varphi'} \neq e^{i\varphi''}$ (т.е., $\varphi' \neq \varphi'' + 2k\pi$ за $k \in \mathbb{Z}$).

От друга страна,

суперпозицията $\neq$ смесване на състояния.

Наистина, ако векторите на състояния Ψ' , $\Psi'' \in \mathbb{C}^n$ определят чисти състояния с матрици на плътността $|\Psi'\rangle\langle\Psi'|$ и $|\Psi''\rangle\langle\Psi''|$, съответно, то смесването с тегла q_1 , q_2

(сега вече, $q_1, q_2 \in [0, 1]$, $q_1 + q_2 = 1$) е операция върху самите състояния, но нейния резултат, в общия случай не е чисто състояние, понеже ако $|\Psi'\rangle\langle\Psi'| \neq |\Psi''\rangle\langle\Psi''|$ и $q_1 \neq 0 \neq q_2$, то не съществува $\Psi \in \mathbb{C}^n$, такъв че

$$|\Psi\rangle\langle\Psi| = q_1 |\Psi'\rangle\langle\Psi'| + q_2 |\Psi''\rangle\langle\Psi''| .$$

По ирония на съдбата, суперпозицията е била разглеждана в началото на изграждането на квантовата теория именно, като операция върху състоянията. Това е било в същината на обяснението на вълновите свойства на микро-обектите, като интерференцията, за която споменахме в увода. Тази лекция ще завършим с коректната интерпретация на явлението интерференция.

7.5 Квантово “гасене” (интерференция) на вероятността

Да разгледаме преход $\Psi \mapsto \Phi$ между състояния на квантов бит в смисъла на точка 7.3.6. Тоест, за изходно състояние с вектор Ψ тестваем елементарното събитие $|\Phi\rangle\langle\Phi|$. Вероятността за положителна регистрация е

$$p_{\Psi \mapsto \Phi} = |\langle\Psi|\Phi\rangle|^2,$$

която и нарекохме “вероятност за преход”. Често самото скалярно произведение

$$\langle\Psi|\Phi\rangle =: a_{\Psi \mapsto \Phi}$$

се нарича **амплитуда (на вероятността) за прехода**. Това е вече комплексно число, но то е по модул ≤ 1 (поради неравенството на Коши–Шварц). По такъв начин,

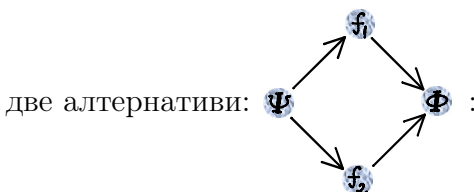
$$p_{\Psi \mapsto \Phi} = |a_{\Psi \mapsto \Phi}|^2.$$

Тогава, за всеки орто-нормиран базис $f_1, f_2 \in \mathbb{C}^2$ ($\in \Psi, \Phi$) имаме:

$$\begin{aligned} a_{\Psi \mapsto \Phi} &= \langle\Psi|\Phi\rangle = \langle\Psi|\hat{1}|\Psi\rangle \\ &= \langle\Psi|(\langle f_1||f_1\rangle + \langle f_2||f_2\rangle)|\Psi\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \langle \Psi | f_1 \rangle \langle f_1 | \Phi \rangle + \langle \Psi | f_2 \rangle \langle f_2 | \Phi \rangle \\
&= a_{\Psi \mapsto f_1} a_{f_1 \mapsto \Phi} + a_{\Psi \mapsto f_2} a_{f_2 \mapsto \Phi} .
\end{aligned}$$

Извод: класическата формула за преход през



$$p_{\Psi \mapsto \Phi} = p_{\Psi \mapsto f_1} p_{f_1 \mapsto \Phi} + p_{\Psi \mapsto f_2} p_{f_2 \mapsto \Phi}$$

се заменя от квантовата:

$$a_{\Psi \mapsto \Phi} = a_{\Psi \mapsto f_1} a_{f_1 \mapsto \Phi} + a_{\Psi \mapsto f_2} a_{f_2 \mapsto \Phi} ,$$

като сега обаче, вероятностите се дават от квадратите на модулите на съответните амплитуди

$$p_{\Psi \mapsto \Phi} = |a_{\Psi \mapsto \Phi}|^2 ,$$

$$p_{\Psi \mapsto f_j} = |a_{\Psi \mapsto f_j}|^2 ,$$

$$p_{f_j \mapsto \Phi} = |a_{f_j \mapsto \Phi}|^2 ,$$

за $j = 1, 2$.