محاسبات کوانتمی (۲۲۶۷۱) ترم بهار ۱۳۹۱-۱۳۹۰

مدرس: سلمان ابوالفتح بیگی نویسنده: فاطمه شمس

جلسه ۵

---

۱ ماتریس چگالی

برای هر بردار واحد $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ ماتریس چگالی[۱] متناظر آن به صورت زیر تعریف می‌شود

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|.$$

این ماتریس دو خاصیت دارد:

۱. $\rho \geq 0$

۲. $\text{tr}\rho = 1$

برای هر $|v\rangle \in \mathcal{H}$ واضح است که:

$$\langle v|\rho|v\rangle = |\langle v|\psi\rangle|^2 \geq 0,$$

$$\text{tr}\rho = \text{tr}|\psi\rangle\langle\psi| = \langle\psi|\psi\rangle = 1.$$

در حالت کلی $\rho \in \mathbf{L}(\mathcal{H})$ یک ماتریس چگالی نامیده می‌شود اگر خواص ۱ و ۲ را داشته باشد. مثلاً ماتریس $\frac{1}{d}I$ که در آن I ماتریس همانی در یک فضای d بعدی است، این دو خاصیت را دارد و ماتریس چگالی است. ولی این ماتریس چگالی «خالص»[۲] نیست، یعنی برای هر $|v\rangle$، $\frac{1}{d}I \neq |v\rangle\langle v|$.

اگر سیستم در حالت $|\psi\rangle$ باشد و اندازه‌گیری $\{M_i\}$ را روی آن اعمال کنیم، احتمال این که حاصل اندازه‌گیری i باشد برابر است با:

$$p(i) = \langle\psi|M_i^\dagger M_i|\psi\rangle = \text{tr}\left(M_i^\dagger M_i|\psi\rangle\langle\psi|\right) = \text{tr}\left(M_i^\dagger M_i\rho\right).$$

همچنین تغییر حالت سیستم با این رابطه به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &\rightarrow |\psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{p(i)}}M_i|\psi\rangle \\ \rho &\rightarrow \rho' = |\psi'\rangle\langle\psi'| = \frac{1}{p(i)}M_i|\psi\rangle\langle\psi|M_i^\dagger = \frac{1}{p(i)}M_i\rho M_i^\dagger \end{aligned}$$

---

[۱] Density matrix

[۲] Pure

بنابراین اندازه‌گیری را می‌توان بر حسب ماتریس‌های چگالی نوشت. تحول زمانی هم به همین صورت قابل بیان است:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &\to U|\psi\rangle \\ \rho &\to U\rho U^\dagger. \end{aligned}$$

اگر $X \geq 0$ آنگاه $MXM^\dagger$ نیز مثبت نیمه معین است، پس $U\rho U^\dagger$ مثبت نیمه معین است و داریم

$$\mathrm{tr}\left(U\rho U^\dagger\right) = \mathrm{tr}\left(\rho U^\dagger U\right) = \mathrm{tr}(\rho) = 1.$$

یعنی $U\rho U^\dagger$ نیز یک ماتریس چگالی است.

لذا اصول مکانیک کوانتم را می‌توان برحسب این فرمول‌بندی جدید نوشت:

- **فضای حالات:** به هر سیستم فیزیکی یک فضای هیلبرت متناظر است. حالت سیستم در هر لحظه با یک ماتریس چگالی $\rho \in \mathbf{L}(\mathcal{H})$ مشخص می‌شود.

- **تحول زمانی:** تحول زمانی یک سیستم فیزیکی با یک عملگر یکانی مشخص می‌شود. اگر حالت سیستم در زمان t_0، ρ و در زمان t_1، σ باشد، عملگر یکانی U وجود دارد که $\sigma = U\rho U^\dagger$.

- **اندازه‌گیری:** اندازه‌گیری یک سیستم فیزیکی با عمگرهای $\{M_1, \ldots, M_k\}$ مشخص می‌شود که $\sum_i M_i^\dagger M_i = I$. اگر حالت سیستم ρ باشد، حاصل اندازه‌گیری با احتمال $p(i) = \mathrm{tr}\left(M_i^\dagger M_i \rho\right)$ برابر i است، و در این صورت حالت سیستم به

$$\frac{1}{\mathrm{tr}\left(M_i^\dagger M_i \rho\right)} M_i \rho M_i^\dagger$$

تغییر می‌کند.

- **سیستم‌های ترکیبی:** فضای هیلبرت یک سیستم ترکیبی از ضرب تانسوری فضاهای کوچک‌تر بدست می‌آید.

توجه کنید که اگر ρ و σ ماتریس چگالی باشند $\rho \otimes \sigma$ نیز ماتریس چگالی است.

مثال:

اگر $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$ ماتریس چگالی متناظر آن برابر است با

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = \frac{1}{2}\left(|00\rangle\langle 00| + |00\rangle\langle 11| + |11\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 11|\right) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

۲ تمیز دادن حالات کوانتمی

فرض کنید یک سیستم فیزیکی داریم که به صورت تصادفی در یکی از حالات $\rho_1, \dots, \rho_k$ قرار داده شده است. یعنی با احتمال p_i در حالت ρ_i است. می‌خواهیم بفهمیم که سیستم واقعاً در چه حالتی است. برای این کار بر روی سیستم یک اندازه‌گیری انجام می‌دهیم و بر حسب حاصل اندازه‌گیری حالت سیستم را حدس می‌زنیم. در این مسأله از آنجا که تغییر حالت سیستم بعد از اندازه‌گیری برای ما مهم نیست از فرمول بندی POVM استفاده می‌کنیم. پس فرض کنید که اندازه‌گیری POVM $\{E_1, \dots, E_k\}$ را انجام می‌دهیم و اگر حاصل اندازه‌گیری i شد، حدس می‌زنیم که سیستم در حالت ρ_i بوده است. در این صورت داریم:

$$\begin{aligned}
\Pr(\text{حدس درست}) &= \sum_{i=1}^{k} \Pr(\text{انتخاب شده باشد } i) \cdot \Pr(\text{حدس درست} \mid \text{انتخاب شده باشد } i) \\
&= \sum_{i=1}^{k} p_i \, \mathrm{tr}(E_i \rho_i).
\end{aligned}$$

بنابراین برای حل مسأله تمیز دادن حالات کوانتمی باید مسأله بهینه‌سازی زیر را حل کنیم:

$$\max_{\{E_i\}} \sum_{i=1}^{k} p_i \mathrm{tr}(E_i \rho_i)$$

که در آن $E_i \geq 0$ و $\sum_i E_i = I$.

مثال:

فرض کنید $k = 2$:

$$\begin{aligned}
\max_{E_1, E_2} p\mathrm{tr}(E_1\rho_1) + (1-p)\mathrm{tr}(E_2\rho_2) &= \max_{0 \leq E_1 \leq I} p\mathrm{tr}(E_1\rho_1) + (1-p)\mathrm{tr}((I - E_1)\rho_2) \\
&= \max_{0 \leq E_1 \leq I} p\mathrm{tr}(E_1\rho_1) + (1-p)(1 - \mathrm{tr}(E_1\rho_2)) \\
&= (1-p) + \max_{0 \leq E_1 \leq I} p\mathrm{tr}(E_1\rho_1) - (1-p)\mathrm{tr}(E_1\rho_2) \\
&= (1-p) + \max_{0 \leq E_1 \leq I} \mathrm{tr}(E_1 M),
\end{aligned}$$

که در آن $M = p\rho_1 - (1-p)\rho_2$. از آنجا که M هرمیتی است در یک پایه‌ی متعامد یکه قطری می‌شود:

$$M = \begin{pmatrix}
\lambda_1 & & & & & \\
& \ddots & & & 0 & \\
& & \lambda_r & & & \\
& & & -\mu_1 & & \\
& 0 & & & \ddots & \\
& & & & & -\mu_s
\end{pmatrix},$$

که در آن $\lambda_i, \mu_j \geq 0$. یعنی مقادیر ویژه‌ی مثبت و منفی را جدا کرده‌ایم. در این صورت اگر عناصر روی قطر E_1 برابر باشند با

$$M = \begin{pmatrix} e_1 & & & \\ & e_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & e_{r+s} \end{pmatrix},$$

آنگاه از $0 \leq E_1 \leq I$ نتیجه می‌شود که $0 \leq e_i \leq 1$ و داریم

$$\max_{0\leq E_1\leq I} \mathrm{tr}(E_1 M) = \max_{0\leq e_i\leq 1} \sum_i e_i\lambda_i - \sum_j e_{r+j}\mu_j = \sum_i \lambda_i.$$

بنابراین

$$\Pr(\text{حدس درست}) = (1-p) + \lambda_1 + \cdots + \lambda_r.$$

مثال:

فرض کنیم $\rho_1 = |\psi\rangle\langle\psi|$ و $\rho_2 = |\phi\rangle\langle\phi|$ و با قطعیت بتوانیم آنها را از هم تشخیص دهیم، یعنی احتمال حدس درست برابر 1 است. پس E_1, E_2 وجود دارند که

$$\mathrm{tr}(\rho_1 E_1) = 1, \quad \mathrm{tr}(\rho_2 E_2) = 1.$$

از $E_1 + E_2 = I$ نتیجه می‌شود که $\mathrm{tr}(\rho_1 E_2) = \mathrm{tr}(\rho_2 E_1) = 0$. بنابراین

$$\langle\phi|E_1|\phi\rangle = 0 \Rightarrow E_1|\phi\rangle = 0 \Rightarrow E_1\rho_2 = 0.$$

چون اگر $E_1 = M_1^\dagger M_1$

$$0 = \langle\phi|E_1|\phi\rangle = \langle\phi|M_1^\dagger M_1|\phi\rangle = \|M_1|\phi\rangle\|^2 \Rightarrow M_1|\phi\rangle = 0 \Rightarrow M_1^\dagger M_1|\phi\rangle = 0.$$

به طور کلی اگر $X, Y \geq 0$ و $\mathrm{tr}(XY) = 0$ آنگاه $XY = 0$.

حال داریم:

$$E_1 + E_2 = I \Rightarrow E_1\rho_2 + E_2\rho_2 = \rho_2 \Rightarrow E_2\rho_2 = \rho_2$$

$$\Rightarrow \rho_1 E_2 \rho_2 = \rho_1\rho_2 \Rightarrow \rho_1\rho_2 = 0 \Rightarrow |\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle\langle\phi| = 0 \Rightarrow \langle\psi|\phi\rangle = 0.$$

در نتیجه دو حالت قابل تمایز هستند اگر بر هم عمود باشند.

۳ Ensemble of Quantum States

فرض کنید با احتمال p_i حالت یک سیستم برابر $|\psi_i\rangle$، $i = 1, \ldots, m$، باشد و اندازه‌گیری $\{M_1, \ldots, M_k\}$ را روی سیستم اعمال می‌کنیم. در این صورت احتمال این که حاصل اندازه‌گیری j باشد برابر است با

$$\begin{aligned} \Pr(\text{ حاصل اندازه‌گیری } j \text{ باشد }) &= \sum_{i=1}^{m} p_i \langle\psi_i|M_j^\dagger M_j|\psi_i\rangle \\ &= \sum_{i=1}^{m} p_i \mathrm{tr}(M_j^\dagger M_j|\psi_i\rangle\langle\psi_i|) \\ &= \mathrm{tr}(M_j^\dagger M_j \rho), \end{aligned}$$

که در آن

$$\rho = \sum_{i=1}^{m} p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|.$$

از آنجا که p_iها مثبت هستند $\rho \geq 0$ و داریم

$$\mathrm{tr}\rho = \sum_{i=1}^{m} p_i \mathrm{tr}(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|) = \sum_{i=1}^{m} p_i = 1.$$

پس ρ یک ماتریس چگالی است و به آن ماتریس چگالی متناظر با انسامبل $\{p_i, |\psi_i\rangle\}_{i=1}^m$ گویند. با ماتریس چگالی می‌توانیم تغییر حالت سیستم را نیز بازنویسی کنیم.

اگر سیستم در حالت $|\psi_i\rangle$ باشد و حاصل اندازه‌گیری j، آنگاه تغییر سیستم به صورت زیر خواهد بود

$$|\psi_i\rangle \to \frac{1}{\sqrt{\langle\psi_i|M_j^\dagger M_j|\psi_i\rangle}} M_j|\psi_i\rangle.$$

توجه کنید که این تغییر با احتمال $p_i\langle\psi_i|M_j^\dagger M_j|\psi_i\rangle/q_j$ اتفاق می‌افتد که در آن $q_j = \mathrm{tr}(M_j^\dagger M_j\rho)$ احتمال این است که حاصل اندازه‌گیری j باشد. پس انسامبل $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$ پس از اندازه‌گیری، اگر حاصل آن j باشد، به

$$\left\{ p_i\langle\psi_i|M_j^\dagger M_j|\psi_i\rangle/q_j, \quad \frac{1}{\sqrt{\langle\psi_i|M_j^\dagger M_j|\psi_i\rangle}} M_j|\psi_i\rangle \right\}$$

تغییر پیدا می‌کند که طبق تعریف ماتریس چگالی متناظر آن برابر است با:

$$\sigma_j = \frac{1}{q_j}\sum_i p_i M_j|\psi_i\rangle\langle\psi_i|M_j^\dagger = \frac{1}{\mathrm{tr}(M_j^\dagger M_j\rho)} M_j\rho M_j^\dagger.$$

بنابراین ماتریس چگالی با احتمال q_j به σ_j تغییر پیدا می‌کند که متوسط آن برابر است با

$$\sum_j q_j\sigma_j = \sum_j M_j\rho M_j^\dagger.$$

نتیجه این که با استفاده از ماتریس چگالی متناظر یک انسامبل می‌توانیم حاصل اندازه‌گیری و تغییر حالت سیستم را بنویسیم و لزومی ندارد $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$ را دقیقاً بدانیم.

به طور مشابه برای تحول یکانی انسامبل $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$ به $\{p_i, U|\psi_i\rangle\}$ تغییر می‌کند و لذا ماتریس چگالی متناظر از $\rho = \sum_i p_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ به $U\rho U^\dagger$ تغییر پیدا می‌کند.

توجه کنید که تناظر بین انسامبل‌ها و ماتریس‌های چگالی یک به یک نیست. یعنی دو انسامبل مختلف ممکن است ماتریس چگالی یکسان داشته باشند که در این صورت طبق محاسبات بالا این دو از هم تمیزپذیر نیستند. ولی برای هر ماتریس چگالی ρ حداقل یک انسامبل متناظر وجود دارد. چون $\rho \geq 0$ و $\mathrm{tr}\rho = 1$، پایه‌ی متعامد یکه‌ی $\{|\psi_i\rangle\}$ و اعداد نامنفی λ_i وجود دارند که

$$\rho = \sum_i \lambda_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i|, \quad \sum_i \lambda_i = 1.$$

پس ماتریس چگالی متناظر با انسامبل $\{\lambda_i, |\psi_i\rangle\}$ همان ρ است.

اگر $\mathrm{rank}\rho = 1$ آنگاه ϕ وجود دارد که $\rho = |\phi\rangle\langle\phi|$ و در این صورت به ρ خالص (pure) می‌گویند.

مثال:

فرض کنید که یک کیوبیت با احتمال $3/4$ در حالت $|0\rangle$ و با احتمال $1/4$ در حالت $|1\rangle$ باشد. ماتریس چگالی متناظر برابر است با

$$\rho = \frac{3}{4}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{4}|1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 3/4 & 0 \\ 0 & 1/4 \end{pmatrix}.$$

حال یک انسامبل دیگر در نظر بگیرید که با احتمال مساوی در یکی از دو حالت زیر باشد:

$$|a\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2}|0\rangle + \frac{1}{2}|1\rangle, \quad |b\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2}|0\rangle - \frac{1}{2}|1\rangle.$$

ماتریس چگالی متناظر به صورت زیر است:

$$\sigma = \frac{1}{2}|a\rangle\langle a| + \frac{1}{2}|b\rangle\langle b| = \frac{3}{4}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{4}|1\rangle\langle 1| = \rho.$$

یعنی ماتریس‌های چگالی متناظر با دو انسامبل $\{3/4, |0\rangle; \ \ 1/4, |1\rangle\}$ و $\{1/2, |a\rangle; \ \ 1/2, |b\rangle\}$ برابرند و لذا این دو انسامبل را نمی‌توان از هم تمیز داد.

۴ اثر جزئی

فرض کنیم حالت سیستم ترکیبی AB را داشته باشیم. حالت سیستم B به تنهایی چیست؟

اگر حالت سیستم ترکیبی ضربی[۳] باشد: $|v\rangle_A \otimes |w\rangle_B$ در این صورت سیستم B به تنهایی در حالت $|w\rangle$ است. ولی اگر درهم تنیدگی داشته باشیم چه؟

فرض کنید $\{|0\rangle_A, \ldots, |d-1\rangle_A\}$ یک پایه‌ی متعامد یکه برای $\mathcal{H}_A$ باشد. نگاشت اثر جزئی[۴] را به صورت زیر

[۳] Product state
[۴] Partial trace

تعریف می‌کنیم.

$$\mathrm{tr}_A : \mathbf{L}(\mathcal{H}_A) \otimes \mathbf{L}(\mathcal{H}_B) \to \mathbf{L}(\mathcal{H}_B)$$

$$\mathrm{tr}_A M_{AB} = \sum_{i=0}^{d-1} \left(\langle i|_A \otimes I_B\right) M_{AB} \left(|i\rangle_A \otimes I_B\right).$$

در حالت خاص اگر $M_{AB} = X_A \otimes Y_B$ باشد داریم

$$\mathrm{tr}_A(X_A \otimes Y_B) = \sum_{i=0}^{d-1} \langle i|X|i\rangle Y_B = \mathrm{tr}(X) Y_B.$$

توجه کنید که هر M_{AB} را نمی‌توان به صورت $X_A \otimes Y_B$ نیست ولی می‌توان آن را به صورت «ترکیب خطی» این گونه عملگرها نوشت و با استفاده از خطی بودن اثر جزئی و رابطه‌ی بالا $\mathrm{tr}_A M_{AB}$ را حساب کرد.

مثال:

قرار دهید $|\psi\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$. ماتریس چگالی متناظر با $|\psi\rangle$ برابر است با

$$\begin{aligned}\rho_{AB} = |\psi\rangle\langle\psi| &= \frac{1}{2}(|00\rangle\langle 00| + |00\rangle\langle 11| + |11\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 11|) \\ &= \frac{1}{2}(|0\rangle\langle 0|_A \otimes |0\rangle\langle 0|_B + |0\rangle\langle 1|_A \otimes |0\rangle\langle 1|_B + |1\rangle\langle 0|_A \otimes |1\rangle\langle 0|_B + |1\rangle\langle 1|_A \otimes |1\rangle\langle 1|_B).\end{aligned}$$

پس ماتریس چگالی متناظر با سیستم B برابر است با

$$\mathrm{tr}_A\, \rho_{AB} = \frac{1}{2}(|0\rangle\langle 0|_B + |1\rangle\langle 1|_B) = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}.$$