A Neumann-féle mérés és az entrópia szerepe kvantum dinamikai rendszerekben

Robert Alicki és Mark Fannes

1. Neumann János kvantummechanikája

1930-ra Heisenberg, Born és Jordan mátrixmechanikája, valamint Schrödinger hullámmechanikája egyesített formát kapott Dirac [12] könyvében. Ebben az elméletben azonban „*selbswidersprechenden Eigenschaften*”, vagyis önellentmondó tulajdonságokkal rendelkező függvények is szerepet játszottak, ami Neumann Jánost arra késztette, hogy matematikailag precíz formalizmust keressen a kvantummechanikának. 1932-ben megjelent [19] könyvében Neumann bemutatta mind a fizikai elmélet konstrukcióját, mind pedig az ehhez szükséges matematikai eszközöket. Bár jelölésmódja mára némiképp elavult, a könyv a mai olvasó számára is tartogat érdekes gondolatokat, és kétségkívül jóval magasabb matematikai színvonalat képvisel, mint korának hasonló könyvei. A következő rövid összefoglalóban modern jelölésmódot használva mutatjuk be Neumann János elméletének alapjait.

Egy fizikai rendszer leírásához szükséges egy szeparábilis $\mathcal{H}$ Hilbert-tér, melynek egységvektorai írják le a rendszer lehetséges állapotait [1]. Az állapotvektorok tartalmaznak minden hozzáférhető információt a rendszerről. Egy mérhető $\mathfrak{X}$ fizikai mennyiségnek önadjungált, nem feltétenül korlátos X operátor felel meg. Ezek az operátorok a spektráltételen keresztül egy-egy értelmű módon megfeleltethetők a számegyenes projektormértékeinek. Annak a valószínűsége, hogy egy φ állapotban az $\mathfrak{X}$ fizikai mennyiség a mérhető $M \subset \mathbb{R}$ halmazba eső értéket vesz fel, egyenlő $\|E(M)\,\varphi\|^2$-el. Az $\mathfrak{X}$ mennnyiség tetszőleges függvényének várható értéke így

$$M(F(\mathfrak{X});\varphi) = \int_{-\infty}^{\infty} F(\lambda)\, d\langle\varphi, E(\lambda)\,\varphi\rangle. \tag{1}$$

Ezután Neumann tárgyalja felcserélhető fizikai mennyiségek együttes várható értékét, a határozatlansági relációkat, projekcióknak igen/nem kérdésként való interpretációját, fotonokat és azok megkülönböztethetetlenségét.

Neumann levezeti az elmélet statisztikai leírását. Ezen a ponton individuális rendszerek helyett sokaságokkal dolgozik. A véletlennek kétfajta forrása van a méréselméletben: Egyrészt a rendszer valódi állapotát illető bizonytalanság, másrészt a mérés kimenetét illető bizonytalanság, amely a kvantummechanika lényegéből fakad. Amellett érvel, hogy

[1] A lineáris analízis itt használt fogalmai, valamint a kvantummechanika Neumann-féle axiómái megtalĺhatók a [23] könyvben is.

nem szükséges rejtett paramétert tartalmazó elméletet használni, és bebizonyítja, hogy egy mérés kimenetelének eloszlása teljesen leírható egy statisztikus operátorral, vagyis egy ρ sűrűségmátrixszal:

$$M(\mathfrak{X}) = \operatorname{Tr} \rho X.$$

A következő pont a statisztikus operátor időfejlődésének kérdése. Kétfajta folyamatot különböztet meg. Az 1-es típus egy fizikai mennyiség mérése során fellépő véletlen változás:

$$\rho \mapsto \Pi_1(\rho) := \sum_j \langle e_j, \rho\, e_j \rangle P_{[e_j]}; \tag{2}$$

a fizikai mennyiseg ebben az esetben nem-elfajuló tiszta pontspektrummal rendelkező önadjungált operátorral írható le, melynek ortonormált bázist alkotó sajátvektorai az $\{e_j\}$ vektorok, a $P_{[e_j]}$ projekciók pedig az általuk kifeszített altérre vetítenek. 2-es típusú folyamatot eredményez a rendszer belső fejlődése, melyet egy önadjungált H Hamilton-operátor ír le:

$$\rho \mapsto \Pi_2(\rho) := e^{-\frac{2\pi \mathrm{i}}{h} tH}\, \rho\, e^{\frac{2\pi i}{h} tH}.$$

Termodinamikai érvelésre alapozva levezeti egy statisztikus operátor Neumann-entrópiájának alapvető formuláját [2]:

$$S(\rho) = -\operatorname{Tr} \rho \log \rho. \tag{3}$$

Bebizonyítja, hogy a 2-es típusú folyamatok nem változtatják az entrópiát, míg az 1-es típusúak általában növelik, és igazolja az entrópia konkavitását.

Az utolsó fejezetben veti fel a mérés problémáját, és a megkülönböztetés szükségességét a fizikai rendszer és a tudattal bíró megfigyelő között. Megvizsgálja annak a következményeit, ha egy összetett rendszernek csak egy része kerül megfigyelésre. Megmutatja, hogy ebben az esetben automatikusan egy sűrűségoperátort kapunk a részrendszeren, amit a teljes rendszer állapotának Schmidt-felbontása segítségével lehet kifejezni. Végezetül megmutatja, hogy ha egy kezdeti tiszta állapot felváltva 1-es és 2-es típusú folyamatokon megy keresztül, az monoton növekvő entrópiájú statisztikus operátorok sorozatát eredményezi

$$\Pi_1 \circ \Pi_2 \circ \cdots \circ \Pi_2(P_{[\varphi]}).$$

A kombinált folyamatok hatására fellépő entrópianövekedés alapvető eszköz a kvantum dinamikai rendszerek tanulmányozásában.

2. Algebrai kvantumelmélet

A kvantumelmélet későbbi fejlődésében a hangsúly áthelyeződik a Hilbert-tér szintjéről a mérhető mennyiségek szintjére. A mérhető mennyiségek algebrai struktúrájának hang-

[2]Neumann gondolatkisérlete, amely a entrópiaformulához vezet, részletesen elemezve van a [22] munkában.

súlyozása nem olyan fontos kis rendszerek, mint például atomok vagy molekulák leírásában, azonban lényegesen áttekinthetőbb tárgyalásmódot tesz lehetővé a térelméletben vagy a kvantum statisztikus fizikában. Átfogó hivatkozás ebben a témakörben a [6] monográfia.

Az első alapkérdés ezen a téren az volt, hogyan lehetne mehghatározni az összes lehetséges realizációját a hely és az impulzus közötti alapvető $[P, Q] = -i\hbar$ felcserélési relációnak. Mivel a reláció fennállásához legalább az egyik operátornak nem korlátosnak kell lennie, ezért a problémát inkább Weyl-operátorokra átfogalmazva tárgyalták, vagyis keresték az összes olyan folytonos egyparaméteres

$$\mathbb{R} \ni q \mapsto u(q)\ (= \mathrm{e}^{iqQ}) \quad \text{és} \quad \mathbb{R} \ni p \mapsto v(p)\ (= \mathrm{e}^{ipP})$$

unitér csoportokat, amelyek kielégítik a

$$u(q)v(p) = e^{i\hbar pq} v(p)u(q)$$

felcserélési relációt. A kérdést Stone és Neumann oldotta meg; minden ilyen tulajdonságú reprezentráció a standard reprezentáció valahányszoros direkt összegeként áll elő, ahol a standard reprezentációt a szokásos, $L^2(\mathbb{R})$-en értelmezett hely- és impulzus operátor határozza meg. Az egyértelműségi tétel azt mutatja, hogy az algebrai megközelítés a kvantummechanika szokásos keretein belül legfeljebb esztétikai jelentőséggel bír.

A helyzet lényegesen megváltozik, ha végtelen sok részecskét tartalmazó rendszerek leírására kerül a sor. Már végtelen sok független részecske leírásához is szükségessé válik a nem teljes tenzorszorzatok bevezetése; a végtelen elemi tenzorok aszerint osztályozódnak, hogy faktoraik hogyan viselkednek a végtelenben. Ez Hilbert-terek sokaságát definiálja, melyek mindegyike globálisan invariáns olyan operátorok hatására nézve, melyek csak véges sok részecskét érintenek, azonban a különböző osztályokhoz tartozó vektorok merőlegesek egymásra.

Néhány rendkívül figyelemre méltó cikkben Murray és Neumann megalkotta az operátorgyűrűk, vagy mai nevükön Neumann-algebrák, elméletét [18]. Ezek korlátos operátorok olyan $\mathfrak{M}$ *-algebrái, melyek tartalmazzák az identitás operátort, és zártak a gyenge operátor topológiára nézve. Az alapvető jelentőségű bikommutáns tétel szerint $\mathfrak{M} = \mathfrak{M}''$, ahol $\mathfrak{M}'$ az $\mathfrak{M}$ algebra kommutánsa, vagyis azon operátorok összessége, amelyek felcsrélhetők $\mathfrak{M}$ minden elemével. Ez az eredmény tehát összekapcsolja egy algebra topológiai és szimmetria tulajdonságait [3].

A '60-as években Segal, Gelfand, Kastler és mások munkája nyomán a végtelen rendszerek kinematikai leírásának még absztraktabb elmélete bontakozott ki: Egy absztrakt $\mathcal{A}$ C*-algebra tartalmazza az összes információt a rendszeren mérhető fizikai mennyiségekről, ilymódon meghatározva az alkotórészek természetét, statisztikáját, a geometriai kényszereket, stb. Az időfejlődést és általánosabban a szimmetriákat az algebra automorfizmusai írják le. A harmadik fontos tényező egy várható érték funkcionál ω, vagy

[3] Neumann operátoralgebrai munkásságát összefoglalja a [24] dolgozat.

más néven egy állapot, ami meghatároz egy kvantum valószínűségi mértéket a mérhető mennyiségeken. Ez a fajta leírás különösen jól használható például a rácson adott spinrendszerek tanulmányozásában.

Az egyik központi jelentőségű eredmény a Gelfand–Naimark–Segal–konstrukció, ami megmutatja, hogy egy $(\mathcal{A}, \omega)$ kvantum valószínűségi modell egyértelműen indukál egy Hilbert-tér modellt, azaz létezik egy kanonikus Hilbert-tér $\mathcal{H}_\omega$, egy kitüntetett Ω_ω egységvektorral, valamint egy $\pi_\omega : \mathcal{A} \to B(\mathcal{H}_\omega)$ reprezentáció, amelyre $\pi_\omega(\mathcal{A})\,\Omega_\omega$ sűrű $\mathcal{H}_\omega$-ban, és

$$\omega(x) = \langle \Omega_\omega, \pi_\omega(x)\,\Omega_\omega \rangle \quad (x \in \mathcal{A})\,. \tag{4}$$

Ha ezenfelül az ω állapot invariáns a Θ időfejlődésre nézve, akkor egyértelműen létezik egy unitér operátor U_ω, melyre

$$\pi_\omega(\Theta(x)) = U_\omega^* \,\pi_\omega(x)\, U_\omega \quad (x \in \mathcal{A}), \qquad \text{és} \qquad U_\omega\,\Omega_\omega = \Omega_\omega. \tag{5}$$

A ’70-es és a ’80-as években számos kutatás koncentrált a kvantum statisztikus mechanika és a térelmélet szempontjából fizikailag releváns állapotok általános tulajdonságainak felderítésére és tanulmányozására. Alapállapotok és egyensúlyi állapotok központi szerepet játszottak ebben a kutatásban. A végtelen rendszerek egyensúlyi állapotának elmélete vezetett a Kubo–Martin–Schwinger peremfeltétel felfedezéséhez. A Tomita–Takesaki elmélettel való összefüggés hamarosan összekapcsolta a KMS-feltételt a Neumann-algebrák elméletének egyik fő kutatási területével.

További fontos előrelépés volt a kvantum mérések és nyílt kvantum rendszerek tanulmányozása, különös tekintettel a teljesen pozitív leképezések jelentőségére disszipatív kvantum rendszerek algebrai tárgyalásában. A teljes pozitivitás a lokalitással összekapcsolva többkomponensű rendszerekben mára a kvantum-információelmélet egyik alapvető fogalma lett [20].

3. Kvantum mérések és nyílt rendszerek

A Neumann által bevezetett 1-es típusú folyamatok, lásd (2), olyan ideális méréseket írnak le, ahol a megfelelő operátorok nem-elfajuló tiszta pontspektrummal rendelkeznek. Ez a fajta leírás azonban nem volt alkalmas a mérési folyamat realisztikusabb vizsgálatára. Különböző szerzők továbbfejlesztették az elméletet [8, 10, 15, 11] , és bevezették a POVM (pozitív-operátor-értékű mérték) fogalmát, ami a projektormérték általánosítása, és alkalmas nem éles kvantummechanikai mennyiségek mérésének leírására. A POVM-ek ugyanazon tulajdonságokkal rendelkeznek, mint a projektormértékek, azzal a különbséggel, hogy egy mérhető halmazhoz rendelt operátornak nem feltétlenül kell projekciónak lennie, elég, ha pozitív operátor.

Egy nem éles valósértékű mérhető mennyiséghez tartozó POVM egy E leképezés a valós számok Borel-halmazairól a $\mathcal{H}$ Hilbert-tér korlátos operátorai halmazába, amelyre

- $E(M) \geq 0$, ha M a számegyenes Borel-mérhető részhalmaza.
- $E(\mathbb{R})$ az identitás,
- $E(\cup_j M_j) = \sum_j E(M_j)$ páronként diszjunkt halmazok minden (M_j) sorozatára.

Egy adott ρ állapotra az E POVM meghatároz egy valószínűségi mértéket $\mathbb{R}$-en,

$$M \mapsto \mathrm{Tr}\,(\rho\, E(M))\,,$$

amely minden statisztikai információt tartalmaz a mérés lehetséges kimeneteleiről.

Egy $A = \int \lambda\, dE_A(\lambda)$ spektrális felbontásával adott önadjungált operátorból, mint éles mérhető mennyiségből tipikusan egy $f(x, y)$ konfidencia mérték bevezetésével konstruálható POVM; itt $f(x, y) \geq 0$ és $\int f(x, y)\, dx = 1$. Ennek segítségével definiálható az A mennyiség „elkent” verziója, ami az alábbi POVM:

$$E(M) := \int_M \left(\int_{\mathbb{R}} f(x, y)\, d(E_A)y \right)\, dx$$

Egy másik példa kapható Neumann gondolatmenetét követve, aki a mérést az S rendszer és egy mérőműszer közötti kölcsönhatási folyamatnak tekintette. Maga mérőműszer szintén egy kvantum rendszer, de rendelkezik egy $A = \int \lambda\, dE_A(\lambda)$ úgynevezett mutató mennyiséggel, ami közvetlenül mérhető. Feltéve, hogy a műszer eredetileg a ϕ állapotban volt, és a rendszerrel való kölcsönhatása egy U unitér operátorral modellezhető, be lehet vezetni egy POVM-et a rendszeren a

$$\mathrm{Tr}\,(\rho E(M)) := \mathrm{Tr}\,\Big(U(\rho \otimes |\phi\rangle\langle\phi|)U^*\, I \otimes E_A(M) \Big) \tag{6}$$

formulával, ahol ρ tetszőleges állapot S-en. Észrevehető, hogy a (6)-ban definiált POVM a következő formájú:

$$E(M) = P_A U^* E_A(M) U P_A\,,$$

ahol P_A a $\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}$ Hilbert-tér $\mathcal{H}_S \otimes \psi$ ($\mathcal{H}_S$-el azonosítható) alterére való ortogonális projekció. Hasonlóan, $I \otimes E_A$ azonosítható E_A-val. Neumark dilatációs tétele szerint bármely POVM megkapható egy nagyobb Hilbert-téren ható projekciómértékből egy megefelelő ortogonális projekció segítségével.

A (6)-os formula kapcsolatot teremt a mérések és a nyílt kvantum rendszerek elmélete között. Az utóbbi témája egy, a környezetével kölcsönható S kvantum rendszer redukált dinamikájának vizsgálata; egy ilyen dinamika az S rendszer redukált sűrűségmátrixain ható irreverzibilis leképezésekkel írható le [5, 7]. A (6) formula segítségével definiálható egy $M \mapsto \Lambda(M)$ mérték $\mathcal{B}(\mathbb{R})$-en, mely értékeit a pozitív nyomoperátorokon ható pozitív affin leképezések halmazából veszi:

$$\mathrm{Tr}\,(B\, \Lambda(M)\rho) := \mathrm{Tr}\,\Big(U(\rho \otimes |\phi_A\rangle\langle\phi_A|)U^*\, B \otimes E_A(M) \Big), \quad B \in B(\mathcal{H}_S). \tag{7}$$

A Λ leképezés egy szuperoperátor-értékű mérték vagy másnéven transzformáció-értékű mérték, amelyre

- $\Lambda(M)\rho \geq 0$, ha $M \in B(\mathbb{R})$ és $\rho \geq 0$.
- $\Lambda(\cup_j M_j) = \sum_j \Lambda(M_j)$ páronként diszjunkt Borel-halmazok sorozataira.

A normálással kapott

$$\rho'(M) := \frac{\Lambda(M)\rho}{\mathrm{Tr}\,(\Lambda(M)\rho)}$$

sűrűségmátrix tekinthető egy mérés utáni feltételes állapotnak, ahol a feltétel az, hogy a mutató mennyiség értéke az M Borel-halmazba esik. Az A mérőműszerre vett parciális nyommal kapott $\Lambda := \Lambda(\mathbb{R})$ operáció, vagyis

$$\Lambda\rho := \mathrm{Tr}\,_A(U(\rho \otimes |\phi_A\rangle\langle\phi_A|)U^*) \tag{8}$$

egy dinamikai leképezést határoz meg a Schrödinger-képben, amely az S rendszer állapotát írja le a mérés után, amennyiben a mutató mennyiség értéke nem kerül leolvasásra.

Gyakran hasznosabb a dinamikai leképezéseket Heisenberg-képben tekinteni; ezt a

$$\mathrm{Tr}\,(B\,\Lambda(M)\rho) = \mathrm{Tr}\,(\rho\,\Lambda^*(M)B), \quad B \in \mathfrak{B}(\mathcal{H}_S),\ \rho \text{ sűrűségmátrix } \mathcal{H}_S\text{-n}$$

összefüggést kielégítő $\Lambda^*(M)$ leképezések határozzák meg. Speciálisan a (7) formulával adott Λ nem éles mennyiség felírható az

$$E(M) = \Lambda^*(M)I$$

formában.

A (8) formula matematikai struktúrája univerzális abban az értelemben, hogy leírja bármely olyan nyílt kvantumrendszer redukált dinamikáját, amely kölcsönhat egy kvantum tárolóval, mely eredetileg a ψ_A állapotban van. Az egyetlen fizikai feltételezés, hogy az összetett rendszer eredetileg szorzat állapotban van; ez gyakorlatilag nem más, mint a gyenge csatolási feltétel. Nem csorbítja az általánosságot, ha a környezet állapotát tisztának tételezzük fel, hisz bármely állapotot lehet „purifikálni” egy extra kvantumrendszer bevezetésével.

A $\Lambda(M)$ leképezések teljesen pozitívak, ami ekvivalens a következő Kraus-felbontással:

$$\Lambda(M)\rho = \sum_j X_j\rho X_j^* \qquad \text{és} \qquad \Lambda^*(M)B = \sum_j X_j^* B X_j\,, \tag{9}$$

ahol az $\{X_j\}$ korlátos operátorok között teljesül az $\sum_j X_j^* X_j \leq I$ összefüggés. Az $\{X_j\}$ operátorok megválasztása messze nem egyértelmű, ezenkívül a j-re vett összegzés helyett állhat integrálás. Egy d-dimenziós Hilbert-térrel leírható rendszer esetén elég legfeljebb d^2 tagot venni a (9) felírásban. Egy dinamikai leképezés nyomtartó volta a következő három ekvivalens feltétellel jellemezhető:

$$\mathrm{Tr}\,(\Lambda\rho) = \mathrm{Tr}\,\rho, \qquad \Lambda^*I = I, \qquad \text{vagy} \qquad \sum_j X_j^* X_j = I. \tag{10}$$

Végezetül pedig Stinespring dilatációs tétele szerint bármely teljesen pozitív dinamikai leképezés felírható redukált dinamika formájában (8).

4. Az entrópia tulajdonságai

Egy véges *abc*-n adott $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_d)$ valószínűségeloszlás információtartalmának klasszikus, Shannon-féle

$$H(\lambda) = \sum_{j=1}^{d} -\lambda_j \log \lambda_j$$

formulája [25] levezethető néhány egszerű feltételből, úgymint folytonosság, az *abc* betűinek permutációjára vett invariancia, valamint a

$$H(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_d) = H(\lambda_1 + \lambda_2, \lambda_3, \ldots, \lambda_d) + (\lambda_1 + \lambda_2)\, H\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_1 + \lambda_2}, \frac{\lambda_2}{\lambda_1 + \lambda_2}\right)$$

kompatibilitási feltétel ([21], második fejezet). Ha úgy értelmezzük a λ mértéket, mint ami az $\{1, 2, \ldots, d\}$ szimbólumok előfordulási gyakoriságát adja meg valamely információforrás által kibocsájtott üzenetben, akkor H méri egy tipikus üzenet átlagos információtartalmát. Egy másik lehetséges értelmezés szerint H az üzenetek előállításának bizonytalanságát méri, és egy fontos Boltzmann-típusú tulajdonsága H-nak, hogy a forrás lényegében csak $\exp(nH)$ darab n hosszúságú üzenetet bocsájt ki.

A kvantummechanikában azonban mindig jelen van bizonytalanság, még akkor is, ha egyébként tökéletesen ismerjük a φ hullámfüggvény által kódolt rendszert. Valóban, az $\mathfrak{X}$ önadjungált mérhető mennyiség függvényeinek várható értékét a $\langle \varphi, E(\lambda)\, \varphi \rangle$ spektrálmérték adja meg, mint az (1) formulában. Természetesen egy ilyen tiszta állapotnak nulla entrópiája kell, hogy legyen. Ezenkívül az sem világos, hogy interpretálható egy sűrűségmátrix, mint tiszta állapotok sokasága. Egy d pontból álló konfigurációs téren adott valószínűségi mérték egyértelműen bontható fel Dirac-mértékek konvex kombinációjára, s így egyértelműen meghatároz egy sokaságot. A kvantummechanikában azonban egy sűrűségmátrix tiszta állapotok konvex kombinációjaként való előállítása messze nem egyértelmű, és így egy sűrűségmátrix egyszerre számtalan sokaságot definiál. Kiderül azonban, hogy a Neumann-entrópia továbbra is rendelkezik a fentinek megfelelő Boltzmann-típusú tulajdonsággal.

Egy sűrűségmátrix $S(\rho)$ entrópiája (3) alapvető matematikai tulajdonságainak tanulmányozásához fontos az entrópiafüggvény viselkedését ismerni összetett rendszerek esetén. Bár sok tulajdonság a klasszikus eset megfelelője, a bizonyítások általában nehezek és kifinomult matematikai eszközöket igényelnek [28, 21]. A továbbiakban az egyszerűség kedvéért feltesszük, hogy minden rendszer véges dimenziós Hilbert-térrel írható le. Általánosabb esetek természetesen szintén kezelhetők, megfelelő technikai feltételek mellett. Ha ρ^{12} jelöli egy kétkomponensű rendszer sűrűségmátrixát, akkor ρ^1 az első komponensre vett megszorítás, vagyis ρ^{12}-nek a második rendszerre vett parciális nyoma.

Egy n-dimenziós rendszer esetén $0 \leq S(\rho) \leq \log n$. A szélső értékek tiszta állapotokon vétetnek fel, melyekre $S = 0$, illetve a normált nyomon, melyre $S = \log n$. Mi több, S

értéke csak ρ sajátértékeitől függ, s így invariáns bármely szimmetria transzformációra nézve. Az entrópia konkáv függvény:

$$\sum_{j=1}^{d} \lambda_j\, S(\rho_j) \leq S\Big(\sum_{j=1}^{d} \lambda_j \rho_j\Big) \leq \sum_{j=1}^{d} \lambda_j\, S(\rho_j) + H(\lambda)$$

(Prop. 1.6 [21]-ben). Speciálisan, kevertebb állapotnak nagyobb az entrópiája. Végül, a $\rho \mapsto S(\rho)$ függvény folytonos, de a folytonosság foka sajnos függ ρ dimenziójától, ami nagy rendszerek tárgyalásában a technikai problémák egyik fő oka [13].

Kétkomponensű rendszerek esetén a legszembetűnőbb különbség a klasszikus esethez képest, hogy az entrópia $S(\rho^1) \leq S(\rho^{12})$ monotonitása nem feltétlenül teljesül. Ami azt illeti, bármely adott ρ^1 sűrűségmátrixnak létezik egy ρ^{12} kiterjesztése egy nagyobb rendszerre, melyre $S(\rho^{12}) = 0$. Ezt a konstrukciót purifikációnak hívják, és valójában nem más, mint a GNS konstrukció (4). A részrendszerek közötti tipikus kvantum korrelációk, melyek ezt lehetővé teszik, szolgáltatják többek között az alapot a kvantum kommunikácós és számítási eszközök kifejlesztéséhez. Mi több, ha ρ^{12} tiszta, akkor ρ^1-nek és ρ^2-nek megegyeszik az entrópiája. A $S(\rho^{12}) - S(\rho^2)$ különbséget kvantum feltételes információnak hívják, bár általában felvehet negatív értékeket is. Megmutatható, hogy ez a mennyiség folytonos, mégpedig a második rendszerre nézve egyenletesen [2]. Ezenkívül az entrópia szubadditív

$$S(\rho^{12}) \leq S(\rho^1) + S(\rho^2)\,,$$

és egyenlőség pontosan akkor áll, ha a két részrendszer független, azaz $\rho^{12} = \rho^1 \otimes \rho^2$. Végezetül

$$|S(\rho^1) - S(\rho^2)| \leq S(\rho^{12}).$$

A legnagyobb jelentőségű eredmény az entrópia erős szubadditivitása:

$$S(\rho^{123}) + S(\rho^2) \leq S(\rho^{12}) + S(\rho^{23}). \tag{11}$$

Ezen egyenlőtlenség bizonyítása hosszú ideig nyitott probléma volt, melyet először Lieb és Ruskai oldott meg [16]. A fenti entrópia egyenlőtlenségek mind levezethetők (11)-ből, mint speciális esetek, esetleg purifikáció használatával. Az egyenlőség teljesülése (11)-ben nagyon erős megszorítást jelent ρ^{123} struktúrájára nézve; lásd [14]. Viszonylag egyszerű bizonyítás adható (11)-re a relatív entrópia

$$S(\rho\,|\,\sigma) := \mathrm{Tr}\,\rho(\log\rho - \log\sigma)$$

fogalmának felhasználásával (lásd Prop. 1.9 [21]-ben). A relatív entrópiának szemléletes interpretáció adható pl. a kvantum statisztikus fizika keretein belül, mint egy tetszőleges és az egyensúlyi állapot szabadenergiájának különbsége. A KMS illetve a Tomita-Takesaki elméleten belül egyszerű formula adható a relatív entrópiára a relatív moduláris operátor segítségével. Megmutatható, hogy az erős szubadditivitás ekvivalens egyrészről a relatív entrópia monotonitásával teljesen pozitív nyomtartó leképezések hatása alatt [17, 26, 21]

$$S(\Lambda\rho\,|\,\Lambda\sigma) \leq S(\rho\,|\,\sigma)\,,$$

másrészről a relatív entrópia mindkét változójában vett együttes konvexitásával

$$S\Big(\sum_{j=1}^{d}\lambda_j\,\rho_j\;\Big|\;\sum_{j=1}^{d}\lambda_j\,\sigma_j\Big)\leq\sum_{j=1}^{d}\lambda_j\,S(\rho_j\,|\,\sigma_j).$$

Eltolásinvariáns rácsrendszerek esetén a véges résztérfogatokra vett entrópiák monotonitása bizonyítható az erős szubadditivitás segítségével.

5. Entrópiatermelés klasszikus rendszerekben

Ebben a fejezetben klasszikus dinamikai rendszereket tekintünk, melyek egy Γ fázistérrel, egy μ valószínűségi mértékkel, valamint egy diszkrét idejű dinamikával adhatók meg. A dinamika itt egy mértéktartó és invertálható leképezés,

$$T:\Gamma\mapsto\Gamma,\qquad \mu(G)=\mu(T(G))=\mu(T^{-1}(G)).$$

Elsőként Koopman és Neumann vették észre, hogy a Hilbert-tér operátorok kvantum formalizmusa rendkívül hasznos lehet ilyen rendszerek tanulmányozásában. A (Γ,μ,T) hármashoz hozzá lehet rendelni egy $(L^2(\Gamma,\mu),U_T)$ párt, ahol $L^2(\Gamma,\mu)$ a négyzetesen integrálható függvények tere Γ-n, U_T pedig a következő unitér operátor:

$$(U_T\psi)(x):=\psi(T(x)),\quad \psi\in L^2(\Gamma,\mu).$$

A T leképezés számos lényeges ergodikus tulajdonsága tárgyalható az U_T operátor spektrális tulajdonságai segítségével. A következőkben megmutatjuk, hogy a Kolmogorov-Sinai-entrópia fogalma bevezethető ilyen típusú kvantummechanikai rendszerekben. Ez természetesen csak egy matematikai általánosítás, közvetlen fizikai értelmezés nélkül.

Bevezetésképp felidézzük a KS-entrópia konstrukciójának alaplépéseit. A Γ tér egy mérhető $C=\{C_1,C_2,\dots,C_k\}$ partíciójához hozzárendelhető egy entrópia mennyiség:

$$H(C):=-\sum_{j=1}^{k}\mu(C_j)\log\mu(C_j).$$

A C és D partíciók közös finomítása az a $C\vee D$ partíció, amely az összes lehetséges $C_j\cap D_i$ metszetekből áll. Egy adott C partíció esetén a dinamika n lépése egy finomított

$$C^{(n)}:=T^{-n+1}C\vee T^{-n+2}C\vee\cdots\vee T^{-1}C\vee C$$

partíciót eredményez, ahol $T^{-m}C:=\{T^{-m}(C_1),T^{-m}(C_2),\dots,T^{-m}(C_k)\}$. Ezekután definiálhatjuk a partíció dinamikai entrópáját

$$h(C,T):=\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}H(C^{(n)}),$$

és a T leképezés KS- (vagy dinamikai) entrópiáját:

$$h(T) := \sup_C h(C,T). \tag{12}$$

A fenti konstrukció megismételhető a Hilbert-tér formalizmusban. Jelölje Ω a konstans 1 függvényt, amely egy 1 normájú vektor az $L^2(\Gamma,\mu)$ Hilbert-térben, és $U_T\Omega = \Omega$. A C partícióhoz hozzárendelhetjük ortogonális projekciók egy $\mathbf{P}_C := (P_{C_1}, P_{C_2}, \ldots, P_{C_k})$ családját, ahol

$$(P_C\phi)(x) := \mathbf{1}_C(x)\,\phi(x)\,,$$

itt $\mathbf{1}_C$ jelöli a C halmaz karakterisztikus függvényét. Ez a projekciócsalád egy diszkrét projekció értékű mértéket, vagy másnéven egy egységfelbontást határoz meg,

$$\sum_{j=1}^k P_{C_j} = I \qquad \text{és} \qquad P_{C_i}\,P_{C_j} = \delta_{ij}P_{C_i}.$$

Ω és $\mathbf{P}_C$ segítségével definiálhatunk egy

$$\rho_C := \sum_{j=1}^k P_{C_j}\,|\Omega\rangle\langle\Omega|\,P_{C_j}$$

sűrűségmátrixot, melynek Neumann-entrópiája

$$S(\rho_C) = -\sum_{j=1}^k \|P_{C_j}\,\Omega\|^2 \log \|P_{C_j}\,\Omega\|^2 = H(C).$$

Felváltva alkalmazva a $\mathbf{P}_C$ által meghatározott mérést és az U_T unitér dinamikát, sűrűségmátrixok egy időfüggő

$$\rho_C(n) := \sum_{j_n=1}^k \cdots \sum_{j_1=1}^k U_T P_{C_{j_n}} \cdots U_T P_{C_{j_1}} |\Omega\rangle\langle\Omega|\, P_{C_{j_1}} U_T^* \cdots P_{C_{j_n}} U_T^*$$

sorozatát nyerjük, mely röviden a

$$\rho_C(n) = [\mathcal{U}_T\Lambda_P]^n|\Omega\rangle\langle\Omega|$$

formában írható, ahol

$$\mathcal{U}_T\rho := U_T\rho\, U_T^* \qquad \text{és} \qquad \Lambda_P\rho := \sum_j P_{c_j}\rho\, P_{C_j}.$$

Kihasználva, hogy $UP_CU^* = P_{T^{-1}(C)}$, könnyen megmutatható az

$$S(\rho_C(n)) = H(C^{(n)})$$

összefüggés. Így mindkét dinamikai entrópia, $h(C, T)$ és $h(T)$, kifejezhető egy olyan képzeletbeli kvantum rendszer entrópiatermelésének segítségével, amelyen méréseket hajtunk végre.

A fenti konstrukció általánosítható egy $F = (f_1, f_2, ..., f_k)$ egységosztás bevezetésével, ahol az f_j-k mérhető komplex értékű függvények Γ-n, melyekre teljesül a

$$\sum_{j=1}^{k} |f(x)|^2 = 1, \quad x \in \Gamma$$

normálási feltétel. Az f_j függvények azonosíthatók a megfelelő szorzásoperátorokkal

$$(f\psi)(x) := f(x)\,\phi(x)\,,$$

melyek segítségével konstruálható egy transzformáció-értékű mérték

$$M \mapsto \Lambda_{\mathbf{F}}(M); \qquad \Lambda_{\mathbf{F}}(M)\rho := \sum_{j \in M} f_j \rho f_j^*\,,$$

valamint egy megfelelő POVM

$$M \mapsto E_{\mathbf{F}}(M); \qquad (E_{\mathbf{F}}(M)\psi)(x) := \sum_{j \in M} |f_j(x)|^2 \psi(x).$$

A KS-entrópia ismét megkapható a nem éles mérés és az unitér dinamika felváltva való hattatásával:

$$h(T) = \sup_F \Big\{ \lim_{n \to \infty} \frac{1}{n} S(\rho_F(n)) \Big\}; \qquad \rho_F(n) = [U_T \Lambda_F]^n |\Omega\rangle\langle\Omega|.$$

A szuprémumot vehetjük az összes $F = (f_1, f_2, ..., f_k)$ partícióra nézve, illetve folytonos (sima) T dinamikai leképezés esetén szorítkozhatunk folytonos (sima) f_j függvényekre. Speciális esetekben a KS-entrópia kiszámítása egyszerűsíthető az eredeti (12) definícióhoz képest, megfelelően választott nem éles felbontások használatával [4].

6. Entrópiatermelés kvantum rendszerekben

Bár a klasszikus dinamikai rendszerek kvantum reprezentációja csupán egy kényelmes matematikai eszköz, a KS-entrópia fentebb bemutatott konstrukciója jó kiindulási alap lehet a megfelelő kvantum mennyiség definíciójához. Vannak azonban más lehetséges megközelítések is, melyek - a klasszikus esettel ellentétben - gyakran lényegesen különböző kvantum dinamikai entrópia fogalmakhoz vezetnek [9, 27].

A következőkben olyan egységes algebrai formalizmust használunk, amely egyaránt alkalmas klasszikus rendszerek, véges dimenziós kvantum rendszerek, kvantum mezők és kvantum rendszerek termodinamikai limeszének leírására. Ugyanakkor a GNS-konstrukció (lásd (4) és (11)) segítségével bármely absztrakt algebrai dinamikai rendszer tárgyalható a Hilbert-tér formalizmusban is. Ebben a reprezentációban az $\mathcal{A}$ C*-algebra absztrakt elemei a $\mathcal{H}_\omega$ Hilbert-tér korlátos operátoraiként jelennek meg, az Ω_ω vektor ciklikus a reprezentációra nézve, és az állapotot az $|\Omega_\omega\rangle\langle\Omega_\omega|$ egydimenziós projekció adja. A Θ dinamika reprezentáltja az U_ω unitér operátor, amely fixen hagyja az Ω_ω vektort.

Ezekután veszünk egy egységosztást, (10)-hez hasonlóan,

$$X = (X_1, X_2, \ldots, X_k) \qquad \text{és} \qquad \sum_{j=1}^{k} X_j^* X_j = I\,,$$

valamint az általa meghatározott teljesen pozitív nyomtartó leképezést $\mathcal{H}_\omega$ sűrűségmátrixain

$$\Lambda_X \rho := \sum_{j=1}^{k} \pi_\omega(X_j)\, \rho\, \pi_\omega(X_j^*).$$

Ismét felváltva hattatjuk az $\mathcal{U}_\Theta(\rho) := U_\omega^* \rho U_\omega$ dinamikát és Λ_X-et az $|\Omega_\omega\rangle\langle\Omega_\omega|$ referenciaállapoton, és megvizsgáljuk a

$$\rho_X(n) := [\mathcal{U}_T \Lambda_{\mathbf{F}}]^n |\Omega\rangle\langle\Omega|$$

sűrűségmátrix viselkedését nagy n időkre. Így kapunk egy partíciófüggő

$$h(\Theta, X) := \limsup_{n\to\infty} \frac{1}{n} S(\rho_X(n))$$

dinamikai entrópiát és magát a dinamikai entrópiát:

$$h(\Theta, \mathcal{A}_0) := \sup_{X \subset \mathcal{A}_0} h(\Theta, X).$$

Az utóbbi formulában $\mathcal{A}_0$ egy (általában sűrű) részalgebráját jelöli $\mathcal{A}$-nak, amely invariáns a dinamikára nézve. A partíciókra tett ezen megszorítás bizonyos regularitási tulajdonságot jelent a megengedett mérhető mennyiségekre nézve. Konkrét példákban általában nehéz feladat eldönteni, hogy ez a feltétel valóban szükséges-e.

A fentebb ismertetett entrópia számos konkrét példában explicite kiszámolható [1]. Mint azt az ötödik fejezetben láttuk, a klasszikus rendszerek speciális esetként jelennek meg az általános konstrukcióban, és ebben az esetben az itt ismertetett kvantum entrópia fogalom megegyezik a KS-invariánssal. A tanulmányozott rendszerek közé tartozik számos eltolás dinamika, mint például az eltolások a kvantum spinláncon, a szabad eltolás valamint a Powers-Price-eltolás, ezenkívül a nemkommutatív tórusz automorfizmusai és a kváziszabad fermion automorfizmusok.

Befejezésül megemlítünk egy kapcsolódási pontot a dinamikai entrópia és nem-egyensúlyi rendszerek között [3]. Tekintsünk egy végtelen kiterjedésű alacsony sűrűségű fermion rendszert, ahol egy effektív egyrészecske dinamika jó közelítést jelent. Feltesszük, hogy a kezdeti eloszlás teljesen homogén. Ezekután bevezetünk egy lokális „csapdát" a rendszerben; a csapdával érintkező részecskék kikerülnek a rendszerből. Felváltva hattatva a csapdát és egy diszkrét idejű dinamikát modellezhetjük a csapdába hulló részecskék folyamát, melynek intenzitását a $J(t)$ áram adja meg t időpillanatban. A J áram aszimptotikus viselkedése nyilván információt szolgáltat a rendszeren belüli részecske transzportról. Megmutatható, hogy ez az áram összekapcsolható a rendszer dinamikai entrópia termelésével:

$$\Delta S(t) \geq cJ(t), \tag{13}$$

ahol c egy megfelelő konstans. Még abban az esetben is, ha az áram aszimptotikusan eltűnik, a (13) egyenlőtlenség hasznos információt szolgáltat az exponensekről, melyek meghatározzák a dinamikai entrópia szublineáris növekedését. Ráadásul a J áram exponensei összefüggenek a dinamika spektrális exponenseivel.

Hivatkozások

[1] Alicki, R. and Fannes, M. (2001). *Quantum Dynamical Systems.* Oxford University Press, Oxford.

[2] Alicki, R. and Fannes, M. (2004). Continuity of quantum conditional information. *J. Phys. A*, **37**, L55–L57.

[3] Alicki, R., Fannes, M., Haegeman, B., and Vanpeteghem, D. (2003). Coherent transport and dynamical entropy for fermionic systems. *J. Stat. Phys.*, **113**, 549–574

[4] Alicki, R., Andries, J., Fannes, M., and Tuyls, P. (1996a). An algebraic approach to the Kolmogorov-Sinai entropy. *Rev. Math. Phys.*, **8**, 167–84.

[5] Alicki, R. and Lendi, K. (1987). *Quantum Dynamical Semigroups and Applications.* Springer, Berlin.

[6] Bratteli, O. and Robinson, D.W. (1979). *Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics 1. C*- and W*-Algebras. Symmetry Groups. Decomposition of States*, Springer, Berlin; *Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics 2. Equilibrium States. Models in Quantum Statistical Mechanics*, Springer, Berlin, Második kiadás 1997.

[7] Breurer, H.P. and Petruccione, F. (2002). *The Theory of Open Quantum Systems.* Oxford University Press, Oxford.

[8] Busch, P., Grabowski, M., and Lahti, P.J. (1995). *Operational Quantum Physics.* Springer-Verlag, Berlin.

[9] Connes, A., Narnhofer, H., and Thirring, W. (1987). Dynamical entropy of C*-algebras and von Neumann algebras. *Commun. Math. Phys*, **112**, 691–719.

[10] Davies, E.B. (1976). *Quantum Theory of Open Systems.* Academic Press, London.

[11] Davies, E.B. and Lewis, J.T. (1970). An operational approach to quantum probability. *Commun. Math. Phys.*, **17**, 239–59.

[12] Dirac, P.A.M. (1930). *The Principles of Quantum Mechanics.*

[13] Fannes, M. (1973). A continuity property of the entropy density for spin lattice systems. *Commun. Math. Phys.*, **31**, 291–294.

[14] Hayden, P., Jozsa, R., Petz, D. and Winter, A. (2004). Structure of states which satisfy strong subadditivity of quantum entropy with equality. *Commun. Math. Phys.*, **246**, 359–374.

[15] Kraus, K. (1983). *States, Effects, and Operations*, *Lecture Notes in Physics*, **190**, Springer, Berlin.

[16] Lieb, E.H. and Ruskai, M.B. (1973). Proof of the strong subadditivity of quantum mechanical entropy. *J. Math. Phys.*, **14**, 1938–41.

[17] Lindblad, G. (1975). Completely positive maps and entropy inequalities. *Commun. Math. Phys.*, **40**, 147–51.

[18] Murray, F.J. and von Neumann, J. (1936). On rings of operators, *Annals of Mathematics*, **37**, 116–229; (1937). On rings of operators II, *Transactions of the American Mathematical Society*, **41**, 208–248; (1943). On rings of operators IV, *Annals of Mathematics*, **44**, 716–808

[19] von Neumann, J. (1932). *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik.* Springer, Berlin. *Foundations of Quantum Mechanics, 1955.* Princeton University Press, Princeton

[20] Nielsen, M.A. and Chuang, I.L. (2000). *Quantum Computation and Quantum Information.* Cambridge University Press, Cambridge.

[21] Ohya, M. and Petz, D. (1993). *Quantum Entropy and Its Use.*Springer, Berlin. Második kiadás 2004.

[22] Petz, D. (2001). Entropy, von Neumann and the von Neumann entropy, *John von Neumann and the Foundations of Quantum Physics*, szerk. M. Rédei and M. Stöltzner, Kluwer.

[23] Petz D. (2002). Lineáris analízis, Akadémiai Kiadó.

[24] Petz, D. and Rédei, M. (1995). John von Neumann and the theory of operator algebras, *The Neumann Compendum*, 163–185, szerk. F. Bródi, T. Vámos, World Scientific Series in 20th Century Math. vol. 1, World Scientific, Singapore.

[25] Shannon, C. (1948). *Bell Systems Technical Journal*, Reprinted in Shannon, C.E. and Weaver, W. (1949). *The Mathematical Theory of Communication*, University of Illinois Press, Urbana

[26] Uhlmann, A. (1977). Relative entropy and the Wigner-Yanase-Dyson concavity in an interpolation theory. *Commun. Math. Phys.*, **54**, 21–32.

[27] Voiculescu, D. V. (1992). Dynamical approximation entropies and topological entropy in operator algebras. *Commun. Math. Phys.*, **144**, 443–90.

[28] Wehrl, A. (1978). General properties of entropy. *Rev. Mod. Phys.*, **50**, 221–60.

Robert Alicki
Institute of Theoretical Physics and Astrophysics,
University of Gdańsk, Poland.
Elektronikus cím: fizra@univ.gda.pl

Mark Fannes
Instituut voor Theoretische Fysica,
K.U. Leuven, Belgium.
Elektronikus cím: mark.fannes@fys.kuleuven.ac.be

(Fordította Mosonyi Milán)