



INTERNAL REPORT

HIP – 2011 – 02

On the fundamentals of coherence theory

Koherenssiteorian perusteista

Alia Dannenberg

Helsinki Institute of Physics

HELSINKI INSTITUTE OF PHYSICS

P.O.Box 9 • FIN-00014 UNIVERSITY OF HELSINKI • FINLAND

On the fundamentals of coherence theory
Koherenssiteorian perusteista

Alia Dannenberg

Helsinki Institute of Physics
University of Helsinki
Helsinki, Finland

Academic dissertation

To be presented, with the permission of Faculty of Science of the University of Helsinki, for public criticism in the Auditorium E209 of Physicum on August 29, 2011, at 12 o'clock a.m.

ISBN 978-952-10-5327-6 (printed version)
ISSN 1455-0563
Helsinki 2011
Yliopistopaino

ISBN 978-952-10-5328-3 (pdf version)
<http://ethesis.helsinki.fi>
Helsinki 2011
Helsingin yliopiston verkkojulkaisut

"Deep in the human unconscious is a pervasive need for a logical universe that makes sense. But the real universe is always one step beyond logic."

Frank Herbert,
Dune.

In English: On the fundamentals of coherence theory 1

In the printed version, accompanying articles are on pages 133-180. In the pdf version, accompanying articles are omitted but page numbering follows the printed version, and thus there is a gap between pages 133 and 180. The bibliographic information of the accompanying articles is on page 8.

Painetussa versiossa väitöskirjan liiteartikkelit ovat sivuilla 133-180. Pdf-versiosta liiteartikkelit on poistettu mutta sivunumerointi on muuten identtinen painetun version kanssa, joten pdf-versiosta puuttuvat sivut 133-180. Liiteartikkeleiden julkaisutiedot löytyvät sivulta 188.

Suomeksi: Koherenssiteorian perusteista 181

In English:
**On the fundamentals of
coherence theory**

Contents

Acknowledgments	4
Abstract	7
List of accompanying articles	8
Abstracts of the articles of the thesis	9
Author's contribution to articles	10
1 Introductory remarks	11
2 Introduction to the key concepts and the metatheory of quantum physics	15
2.1 About the metatheory of quantum physics	16
2.2 About the definition of concepts and terminology	19
2.3 The definitions and explanations of the key concepts	20
3 About known and observed coherence phenomena	35
3.1 General theory of Bose condensates	36
3.2 About atomic and molecular condensates, Rabi oscillations and photoassociation	40
3.3 A macroscopic superposition between atomic and molecular condensate states	44
3.4 About the collective behaviour of degenerate fermion systems	47
4 Decoherence	53
4.1 Many histories interpretation and its problems	55
4.2 A self-induced decoherence scheme	59
4.3 Decoherence in an open system: the effect of "rogue decoherence" in the formation of a macroscopic superposition between atomic and molecular condensate states	60
5 General coherence theory	75
5.1 About coherence dynamics	78
5.2 Entropy	82
5.2.1 A brief introduction to the nature of entropy	82

5.2.2	A brief history of the problems with entropy . . .	83
5.2.3	Entropy and coherence	85
5.3	Idealistic and realistic standpoints	87
5.4	Axioms and assumptions	90
5.5	Applying coherence theory in practice	92
6	About decoherence in a closed system	95
6.1	Spin 1/2 model	95
6.2	Simulations and results	98
6.2.1	The structure of simulations	98
6.2.2	About the general results	100
6.2.3	About interactions and decoherence in different ba- sis sets	101
6.2.4	Poincaré recurrence	103
6.2.5	The dependence of coherence decay on system pa- rameters	104
6.3	Decoherence, the environment and the observer	107
7	Conclusions	113
	References	116
	Accompanying articles	133

Acknowledgments

I have reasons to be thankful that my dissertation research has advanced to its final stage. Professor Kalle-Antti Suominen as my supervisor and as the leader of the Quantum Optics and Laser Physics Group in Helsinki Institute of Physics has influenced many practical matters of the thesis research as well as the theoretical research problems. I have had the joy to research with Matt Mackie PhD many fields formerly strange to me concerning photoassociation and condensates. Maybe the most important thing that I have learned from Matt is how to apply scientific method in practice. We often disagreed on questions concerning decoherence and degenerate quantum systems. Those questions were solved by debating for hours and hours. The most probable truth was found if we agreed about the corollary. It helped to avoid potential logical pitfalls in research, when both of us because of perfectionism and logicity could not accept any conclusion before both were convinced that they understood the matter. I really miss these debates. Another matter I learned from Matt was how the scientific community works; especially that the truth itself is mute – it requires a loud but polite messenger to speak for it.

Riina Kosunen MA and Anna Dannenberg MA have taught me that some contradictions in theories are caused by ill-defined (or undefined) terms. It has been rewarding to try to fix and find consistent forms for some key definitions of quantum physics with them. Professor Keijo Kajantie, Professor Gabriel Sandu, Professor Christofer Cronström, Professor Ilkka Niiniluoto, Professor Dennis Bamford, Dos. Jouni Niskanen, Dos. Lauri Jetsu and Dos. Markus Lammenranta have taught me various sides of science and discussions with them have had a positive impact on my intention to understand quantum physical reality.

The practical work would have been impossible to perform without the infrastructure and over a year long period of employment provided by the Quantum Optics and Laser Physics Group in Helsinki Institute of Physics, a three-and a half year scholarship by the Magnus Ehrnrooth foundation, almost half a year employment by the University of Turku, and a scholarship by the Science Foundation of University of Helsinki. Moreover, the Helsinki Institute of Physics has supported the printing of the thesis.

Without the support of my wife Anna Dannenberg, I would have been more clueless than I was during the thesis process. Special thanks to our children, Leo (born in November 2005), Timo (born in December 2007) and Sofia (born in April 2010) whose existence has enabled me to make the unconventional choices that I have wanted, but without them it would

have been very hard. I am grateful to my good friend Anna Lassila for support and suitable pressure – finishing my manuscript was initiated because of a tongue-in-cheek competition of who would complete their left-over thesis faster. I am also indebted to my parents-in-law Leila and Juha Hurmalainen for fruitful conversations and comments and the "refuge" in the final phase of working that hastened the writing process. Moreover, thanks to my brothers Heikki and Lauri, whose expertise in computer technology has assisted my work and reduced the time consumed by simulations and data-analysis to a fraction.

In addition, many of my other friends have had to listen to my joys and despairs of practicing science. I am still in quite good psychophysical shape – thanks to at least Aleksi Honka, Heli Kokkonen, Terhi Kokkonen, Vesa Kokkonen, Hanna Multanen, Janne Nuutinen, Sari Salonen, Vesajoonna Salonen, Visajaani Salonen, Laura Sutinen and Helena Zimmerman. Unquestionable thanks to the Karelian Nation of University of Helsinki, whose curator I was in 2006–2007. The Nation has taught me a lot, and most of my friends are connected to it in some way or another. Moreover, warm thanks to my secondary school Finnish teacher Eija Rytönen for supporting creative and critical thinking and my development in a socially too challenging environment, and thanks to my high school Physics teacher Ilkka Koivistoinen who tried to teach me how to understand physics, told beautiful stories about physical problems like Schrödinger's cat, and also thought that I should study theoretical physics. Which I did, after all.

I am very grateful to my distant relative Julius Krohn for being able to write my thesis in Finnish. Julius Krohn was the first to write a Master's thesis in Finnish in 1857. He thought that a language, in order to be viable, should be usable in academic research and teaching of any field of science. Nowadays in Finland, PhD. theses and even Master's dissertations are mostly written in English because of the internationalisation pressure. Thus, between these covers, my thesis is also in English. I am sorry for repeating in the text the same issues that have already analysed in the accompanying articles of my thesis, but it is done in order to have a readable (stand-alone) Finnish part, whose translation the English part is. I am afraid that this may be the last thesis in theoretical physics written in Finnish. I sincerely hope that I am proven wrong in this matter.

Last I want to mention that one anagram from the name of my first-born son Leo Dannenberg is *endanger Nobel*. I admit that naturally his and his siblings' existence has affected my goings, becomings, wishes and also my possible future outlooks as a scientist. Pondering on how much

the name is an omen is left to the reader, and I should add that the possible ominousness of the name does not move me in any way.

Joensuu March 14, 2011

Alia Dannenberg

Abstract

In the thesis I study various quantum coherence phenomena and create some of the foundations for a systematic coherence theory. So far, the approach to quantum coherence in science has been purely phenomenological. In my thesis I try to answer the question what quantum coherence is and how it should be approached within the framework of physics, the metatheory of physics and the terminology related to them. It is worth noticing that quantum coherence is a conserved quantity that can be exactly defined. I propose a way to define quantum coherence mathematically from the density matrix of the system.

Degenerate quantum gases, i.e., Bose condensates and ultracold Fermi systems, form a good laboratory to study coherence, since their entropy is small and coherence is large, and thus they possess strong coherence phenomena. Concerning coherence phenomena in degenerate quantum gases, I concentrate in my thesis mainly on collective association from atoms to molecules, Rabi oscillations and decoherence. It appears that collective association and oscillations do not depend on the spin-statistics of particles.

Moreover, I study the logical features of decoherence in closed systems via a simple spin-model. I argue that decoherence is a valid concept also in systems with a possibility to experience recoherence, i.e., Poincaré recurrences. Metatheoretically this is a remarkable result, since it justifies quantum cosmology: to study the whole universe (i.e., physical reality) purely quantum physically is meaningful and valid science, in which decoherence explains why the quantum physical universe appears to cosmologists and other scientists very classical-like.

The study of the logical structure of closed systems also reveals that complex enough closed (physical) systems obey a principle that is similar to Gödel's incompleteness theorem of logic. According to the theorem it is impossible to describe completely a closed system within the system, and the inside and outside descriptions of the system can be remarkably different. Via understanding this feature it may be possible to comprehend coarse-graining better and to define uniquely the mutual entanglement of quantum systems.

List of accompanying articles

My thesis consists of an introductory part and the following four articles published in scientific peer-reviewed publications.

- I *Shortcut to a Fermi-degenerate gas of molecules via cooperative association*
O. Dannenberg, M. Mackie, and K.-A. Suominen.
Physical Review Letters **91**, 210404 (2003).
- II *Raman photoassociation of Bose-Fermi mixtures and the subsequent prospects for atom-molecule Cooper pairing*
M. Mackie, O. Dannenberg, J. Piilo, K.-A. Suominen, and J. Javanainen.
Physical Review A **69**, 053614 (2004).
- III *Rogue decoherence in the formation of a macroscopic atom-molecule superposition*
O. Dannenberg, and M. Mackie.
Physical Review A **74**, 053601 (2006).
- IV *Coherence theory and coherence phenomena in a closed spin-1/2 system*
O. Dannenberg.
Annalen der Physik (Berlin) **17**, 355-373 (2008).

Abstracts of the articles of the thesis

- I We theoretically examine the creation of a Fermi-degenerate gas of molecules by considering a photoassociation or Feshbach resonance applied to a degenerate Bose-Fermi mixture of atoms. This problem raises interest because, unlike bosons, fermions in general do not behave cooperatively, so that the collective conversion of a degenerate gas atoms into a macroscopic number of diatomic molecules is not to be expected. Nevertheless, we find that the coupled Fermi system displays collective Rabi-like oscillations and a rapid adiabatic passage between atoms and molecules, thereby mimicking Bose-Einstein statistics. Cooperative association of a degenerate mixture of Bose and Fermi gases could therefore serve as a shortcut to a degenerate gas of Fermi molecules.
- II We theoretically investigate Raman photoassociation of a degenerate Bose-Fermi mixture of atoms and the subsequent prospect for anomalous (Cooper) pairing between atoms and molecules. Stable fermionic molecules are created via free-bound-bound stimulated Raman adiabatic passage which, in contrast to purely bosonic systems, can occur in spite of collisions. With the leftover atomic condensate to enhance intrafermion interactions, the superfluid transition to atom-molecule Cooper pairs occurs at a temperature that is roughly an order of magnitude below what is currently feasible.
- III We theoretically examine two-color photoassociation of a Bose-Einstein condensate, focusing on the role of rogue decoherence in the formation of macroscopic atom-molecule superpositions. Rogue dissociation occurs when two zero-momentum condensate atoms are photoassociated into a molecule, which then dissociates into a pair of atoms of equal-and-opposite momentum, instead of dissociating back to the zero-momentum condensate. As a source of decoherence that may damp quantum correlations in the condensates, rogue dissociation is an obstacle to the formation of a macroscopic atom-molecule superposition. We study rogue decoherence in a setup which, without decoherence, would yield a macroscopic atom-molecule superposition, and find that the most favorable conditions for said superpositions are a density $\rho \sim 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ and temperature $T \sim 0.1 \text{ nK}$.
- IV A simplified Heisenberg spin model is studied in order to examine the idea of decoherence in closed quantum systems. For this purpose, we present a quantifiable definition to quantum coherence Ξ , and discuss

in some detail a general coherence theory and its elementary results. As expected, decoherence is understood as a statistical process that is caused by the dynamics of the system, similar to the growth of entropy. It appears that coherence is an important measure that helps to understand quantum properties of a system, e.g., the decoherence time can be derived from the coherence function $\Xi(t)$, but not from the entropy dynamics. Moreover, the concept of decoherence time is applicable in closed and finite systems. However, in most cases, the decay of off-diagonal elements differs from the usual $\exp(-t/\tau_d)$ behaviour. For concreteness, we report the form of decoherence time τ_d in a finite Heisenberg model with respect to the number of particles N , density n_ρ , spatial dimension D and ϵ in a η/r^ϵ -type of potential.

Author's contribution to articles

- I It was Matt Mackie's PhD idea. My responsibilities were to develop and use the computer simulation model for cooperative association, and also a bit of the theoretical studies to link cooperative association with the fundamentals of quantum physics.
- II As in Article I.
- III It was Matt Mackie's PhD idea to combine our expertise in different fields. In practice, this study is a continuation of a previous article by Calsamiglia, Mackie, and Suominen [88]. The writing process and theoretical calculations were mostly done by me, and I took care of all of simulator programming and maintenance, data analysis, as well as all theoretical and practical decoherence-related issues.
- IV All my own, from the idea to the final realisation.

Chapter 1

Introductory remarks

Quantum physical reality seems to be full of interesting enigmas and wonderful paradoxes. On the other hand, it is quite clear that these paradoxes are only products of a defective understanding mind, since the physical reality is consistent. One of the first "paradoxes" of quantum physics was related with the demarcation between quantum and classical physics. Erwin Schrödinger almost concretely took a cat out of the hat by a thought experiment that tested the fundamentals of quantum physical understanding. A cat is sealed into a steel chamber with a diabolic machine that consists of a small amount of radioactive material in a Geiger tube that is connected with a hammer device [1]. As soon as one radioactive nucleus decays, the hammer device would activate and scrap a bottle of Prussic acid resulting in the death of the cat. The decay of a nucleus is a quantum physical event. In modelling the system with quantum mechanics outside the steel chamber one notices that after a moment the wave function of the system seems to give such a picture that it contains a superposition of a living and a dead cat states. No real observed cat is a superposition of living and dead cat. A paradox? And thus the legendary *Schrödinger's cat* was born as a quantum physical paradox.

Of course, the superposition of a living and a dead cat was a misunderstanding, but it took almost half a century of active research in the fundamentals of quantum physics to uncover. The practical solution was obvious: the cat is not a pointlike cat in a vacuum but a considerably sizeable object with a lot of degrees of freedom, and these degrees of freedom are coupled with even more degrees of freedom of the environment. These interactions cause a dynamical phenomenon known as decoherence. It quickly reduces the quantum correlations of the cat, thus resulting in the cat not being able to reach a superposition state, and even if it does, the superposition vanishes very rapidly via decoherence.

However, in theory, solving the problem of Schrödinger’s cat is not so simple. It was stated in the problem setup given by Schrödinger that the state of the *whole system* is such that it appears to contain a superposition of a living and a dead cat. The whole system can be chosen, e.g., in such a way that it is the largest possible system, so it has no environment that can be coarse-grained away, i.e., the universe (in my opinion a more precise term is *physical reality*, that contains everything that is physical). Necessarily the state of physical reality contains such entangled superposition states that can be interpreted as superpositions of a living and a dead cat. Decoherence does not solve this problem *in principle*; decoherence *only* explains why observers who are correlated with the physical reality (who are an integral part of the physical reality) never ever observe anything that even remotely resembles a superposition of a living and a dead cat. The solution to the problem in principle is familiar from logic: according to Gödel’s incompleteness theorem it is logically impossible to completely describe a complex enough closed system within the system. Thus, there is no contradiction between two seemingly contradictory descriptions of the same system. According to one description (outside the system), the state of the system contains an entangled superposition of a living and a dead cat, while the other description (inside the system) explains that the states of a living and a dead cat are a statistical mixture because their quantum correlations have very rapidly vanished because of decoherence. I will cover the subject in more detail in Section 5.3.

Despite the practical solution to Schrödinger’s cat paradox, fundamental research into coherence and defining the concepts is at the starting point only. Thus, the title of this thesis is ”On the fundamentals of coherence theory” – I intend to study theoretically the fundamentals of coherence theory. Coherence studies so far have indeed had theoretical-like concepts, such as *coherence length* or *decoherence time*, but after all, they are only phenomenological concepts. Whether they can be derived uniquely from a more general principle or what is the coherence they refer to, is not clear at all. As far as I know, it is unclear whether or not coherence is a quantity. I am not ambitious enough to present an almost complete coherence theory in my thesis, but the basics is enough, and I intend to give the first step towards more extensive theoretical studies.

In decoherence studies there are many problems that are believed to be physical problems, but are, in fact, results of logically inconsistent systems based on loosely defined concepts. This motivated me to start defining the key concepts of coherence studies and wondering about the metatheory of physics (presented briefly in Chapter 2). A more detailed extensive study is in preparation [2]. There have been wake-up calls to

define concepts in other fields of the natural sciences too: e.g. planets have been concepts of astronomy for many centuries, but only lately, 14–25 August 2006 has the General Assembly of IAU has defined a planet¹.

Chapter 3 is based on Articles I and II of my thesis, and partially on Refs. [4, 5]. The purpose is to explore on a practical level a few exotic coherence phenomena, like the collective behaviour of fermions. Decoherence is studied in Chapter 4 by presenting previous research and the practical example of Article III. Then, the main issue, i.e., coherence theory is presented in Chapter 5. In its sections, the definition of coherence, the role of an observer in the physical reality, recoherence, and relation between entropy and coherence are studied. The results are based on Articles IV and [2]. In Chapter 6, decoherence of a closed system is explored by using the mathematical definition of coherence given in Article IV, and also the relation between decoherence and the environment and the observer is considered. Finally, in Chapter 7 the evident conclusions are given and possible future research topics are considered.

¹A planet is such an object that is not a star but it orbits a star, and it is so massive that its shape is spherical. Moreover a planet must dominate its orbit. [3] Without the orbit domination, there would be three more planets in our Solar system: Ceres (previously known as an asteroid), Kharon (Pluto's "moon", which fulfills the definition of planet but not the definition of a moon, since an object is a moon if its and the central planet's mutual centre of gravity is inside the planet), and a rather new discovery known informally as Xena. The condition of orbital domination drops Pluto along with the three candidates out of the category of planets, since Pluto's orbit is partially within the orbit of Neptune. However, most likely this will cause problems with other star systems, since an "orbit" and conditions for its stability are a troubled issue. It will be easy to generate a model of a star system that, by definition, has no planets but around the central star will revolve objects of the size of Jupiter that are called asteroids (or comets if their orbits are very eccentric). This example shows that defining an apparently trivial concept is not necessarily trivial at all.

Chapter 2

Introduction to the key concepts and the metatheory of quantum physics

Before starting research in any field of science it is helpful to know what one is actually researching, since there may appear extra problems if the research target is not well defined, or even if the key concepts and definitions are ill-defined. Ill-defined concepts are understandable in coherence theory, since it is quite a young branch of quantum physics, but it is not a good excuse for leaving the key concepts undefined, especially because a well accomplished definition process itself may solve problems that were previously thought to be physical ones.

An exactly defined and consistent concept system is evidently important in constructing the (physical) world-view because such concept system of physical reality itself is a model of physical reality¹.

In this chapter I give a brief introduction to the metatheory of quantum physics and explain the definitions of some key concepts. The definition of concepts is done within the terminological framework. The task is to find as consistent definitions to terms as possible, that converge with the common use of terms if possible, and reflect the structure of physical reality as accurately as possible. Broader and more detailed analysis about terms and their relations, including concept diagrams will be published in [2].

¹The concept of "model" can be defined as "a simplified representation (of the reality)".

2.1 About the metatheory of quantum physics

My research is done within the framework of *physics*. Physics is an empirical and exact natural science. Science and empiricism set the method of acquiring valid knowledge, and "nature", i.e., the structure and "laws" of physical reality (all that is physical) is the object of research [6]. Scientific method [7] sets limits to valid reasoning [8]. The result of reasoning should only depend on premises. Generally, Occam's principle² is a part of scientific method. Empiricism sets the method for proving propositions concerning physical reality [11]. Measurements should be repeatable. Measurement outcomes should be true and objective [7, 11]. This leads to the following ontology³: there exists an independent (independent of the "human" mind or illusions) and objective physical reality, and measurement outcomes reflect its behaviour. This means that I assume *physicalism* [12] to be valid. On the other hand, theories about the physical reality are *only* epistemological⁴ models in the brain. Only in a few cases can one *prove* a theory valid – in most cases theories can only be proven wrong. Measurement outcomes that theory predicts are not necessary proofs, but only *corroborations* to the theory [13]. Exactness of physics means that the observed regularities are intended to be presented as laws in mathematical form [14].

So, there are two layers in physical reality: the objective ontological one and the epistemological one that contains the knowledge and theories about the ontological layer. Naturally, the contents of the epistemological layer are a part of the ontological layer (that contains all that exists), e.g., information exists (ontologically), and propositions of the epistemological layer are information (they are coded on some degrees of freedom of physical reality). But, there is no (logical or whatsoever) need for the propositions of the epistemological layer to be exact and accurate descriptions of the ontological layer.

The simple picture gets flurry after one starts to think about the question "What is true?" Of course, the objects of physical reality do exist and propositions describing an existing state of physical reality accurately

²Two important ideals of modern science were dear to the medieval philosopher William of Occam: The existence of any entity should be assumed only if there is valid proof for its existence, i.e., *the one who claims existence has the burden of proof*. Another is also known as *Occam's razor*, stating that there is no reason to make more assumptions than are needed. [9]: p. 198-199, [10].

³Ontology: study of what exists.

⁴Epistemology: study of what can be known about what exists.

are true, i.e., *the correspondence theory of truth* is assumed [15]. The truth value of any proposition is checked by comparing the proposition with the physical reality. Ontology with the correspondence theory of truth is easy, but the main epistemological question "What is *known* to be true" is the complicated one. Naturally, the epistemological model of physical reality should be as close as possible to the ontological physical reality. Because physical reality is consistent, the epistemological model of physical reality should also be consistent. Therefore, the epistemological model should fulfill at least *the coherence theory of truth* [16], i.e., the model should contain no inconsistent propositions. Also, the correspondence theory of truth should be used whenever possible. The impossibility of verifying (most) theories makes this challenging.

An easy way to do science is to assume that in both epistemological and ontological models⁵ only measurement outcomes are true and there are no "deeper structures" in physical reality than measurement outcomes. This idea could be called an *epistemological approach to reality*. It is a refined version of logical positivism (or logical empiricism), or general anti-realism [11, 17, 18]. According to the epistemological approach, e.g., such an entity as an electron does not truly exist. The true description is that, with a certain experimental setup, one observes such and such measurement outcomes. If one makes such a conclusion that the target of the measurement (in this case, an electron) truly exists, the conclusion and underlying assumptions are too bold. An electron is only a theoretical entity that does not truly exist but which, as a name, is associated with certain measurement outcomes of a certain measurement apparatus. This basic idea of philosophical anti-realism appears also in the Copenhagen interpretation of quantum mechanics (see, e.g., [19]: p. 85). The best possible description of reality ever is to reveal with repeated measurements the distribution of measurement outcomes of a certain measurement setup. One still cannot make any conclusions about the reality at the moments when measurements are not made – (reality and) existent entities exist only within a certain (measurement) framework. However, it would be peculiar if the validity of sciences was limited only to measurement processes; it is logical to think that the reality exists even if no measurement is made, and the task of sciences is also to reach this aspect

⁵The ontological model of physical reality is a set of true propositions (in the sense of correspondence theory of truth) that describe physical reality completely. Physics as a science is based on the assumption that the ontological model exists, i.e., it is possible to accurately describe physical reality with propositions. The basic problem in physics is to establish correspondences between the propositions of epistemological model and propositions of the ontological model.

of reality [22].

Another approach is based on *scientific realism*. Supporters of scientific realism see it as the sciences' own philosophy of science. To successfully defend scientific realism against philosophical challenges one must adopt a (meta)philosophical viewpoint compatible with science, like a version of philosophical naturalism (e.g. physicalism). [17] In short: it is reasonable to assume that there exists an ontological deep structure in physical reality and epistemological problems (e.g., what is measurement, and is there anything if it is not measured at the particular moment) are related to a limited understanding of physical reality.

In the *ontological approach to physical reality* it is assumed that measurement outcomes are only reflections of the physical reality and thus measurement outcomes, while they are true and objective, underdetermine the physical reality. There can be different epistemological models of physical reality (scientific theories) that explain the same measurement outcomes [17]. In the ontological approach it is reasonable to assume that the theoretical entities (such as electrons, abstract wave functions / quantum states etc.) do really exist in the physical reality⁶. However, if one assumes theoretical entities to exist in physical reality, the theoretical entity should be well defined, because corroboration of existence can be, at best, very indirect. Let us consider again the theoretical entity labeled an electron. The definition of an "electron" contains at least the properties: rest mass is $9.1093897 \times 10^{-31}$ kg, electric charge $1.6021773 \times 10^{-19}$ C, and spin 1/2.

If physicists encounter an object and measures these properties and finds them matching with the definition of "electron", they have strong reasons to think that they have encountered an electron, and thus the electron exists in physical reality. The "state (vector) of physical reality" is more abstract than the "electron", but it has certain properties that could be observed indirectly. One cannot even imagine that it would be possible to measure the whole state (vector) of physical reality (since we, observers and measurement apparatuses are part of it), but physicalism and present day knowledge of theoretical physics (especially quantum physics) strongly suggest its existence.

The ontological approach is stronger than the epistemological one,

⁶Otherwise it would be hard to talk about physical entities while they are not observed and thus this would lead to subjectivism or Berkeley-type solutions where supernatural entities are assumed to observe everything because existence of uncontinuously observed objects could cease. Berkeley did not want to lose the tree in his yard or the altar of his church. For more details about Berkeley's problems, see e.g., [20, 21].

and because of previous reasoning, I assume that it is a possible angle in modern (post-Copenhagen interpretation) quantum physics. Logically, the assumption of causality (unique time evolution of the state in quantum physics) needs an ontological approach.

2.2 About the definition of concepts and terminology

In this section I give definitions with explanations only for a small set of concepts, because defining concepts accurately is time-consuming work, and not reasonably proportional to the finite time available to do the thesis. About the background of my terminological work: in the summer 2005 discussions with Riina Kosunen MA (terminologist) and Anna Dannenberg MA (linguist) we concluded that defining key concepts of (coherence theory of) quantum physics accurately and consistently would help the studies of fundamental quantum physics. As a hobby we started to write an article about the topic [2], but the work appeared to be more challenging than we thought. In the article we analyse in detail over 60 key concepts.

About terminology: it is a branch of science that studies concepts, terms and terminology of special languages. Thoughts of the Vienna circle [18, 23] in 1920s about the proper roles of science and philosophy were the origin of terminology. Philosophers of the Vienna circle were previously mentioned logical positivists/empiricists, much scolded in philosophy, so I must admit that despite the problematic depleted ontological thinking the logical positivists also achieved something reasonable. From the viewpoint of logical positivism, the reductionist physicalism is the ideal of science⁷, and meaningful philosophical problems are only related to language – and the important part of it consists of defining concepts. A good definition (1) describes the concept well, (2) is not circular, (3) does not include negative expressions if positive ones are possible, and (4) does not contain vague or colourful language [23]: p. 164, [24]: p. 238. In addition, (5) the concept and/or definition is consistent with the concept system. The greatest challenges to terminological work arise from (1) and (5). One should pay attention to (1), since if the intension of a concept is either too tight or too loose, it leads to obvious problems. The standardisation of concepts and definitions was put forward by Eugen Wüster, who had a more pragmatic approach than the Vienna circle, and thus Wüster

⁷With this background, the anti-realistic thinking of the majority of logical positivists in ontology seems peculiar.

is dubbed as the founding father of terminology. Additional information about terminology developed by Wüster can be found e.g., from Ref. [25], and in Ref. [26] the terminological work with standards is explained⁸.

2.3 The definitions and explanations of the key concepts

In the explanations of concepts (below) some questions of philosophy of quantum physics are briefly addressed.

1. physicalism: philosophical theory according to which everything is physical

The definition is exact and presented in Ref. [12]. The main idea of physicalism is that everything in our physical reality can be, in principle, explained within the physical framework. There is no room for any supernatural processes or entities. Observed peculiarities are due to limited knowledge of physics. However, while the given definition for physicalism is accurate, the logical structure of the definition is more easily analysed if one adds a bit of redundancy to it and thus the definition states "... everything that exists is physical". The analysis is then divided into three separate parts: what is meant by a) *everything*, b) *exists* and c) *physical*.

There are four well-known problems linked to physicalism, but only one is relevant here: the problem of epiphenomenal ectoplasm [12, 27, 28] since, the other three problems are consequences of the ill-solved epiphenomenal ectoplasm problem.

Let us assume that there is a physical reality A in which physicalism is true. Then, let us assume another physical reality B that is an exact copy of the other, except that there *exists* something called epiphenomenal ectoplasm that does not interact with the rest of the physical reality. Philosophers (e.g. [12, 27, 28]) see a problem here, since the often used definition of physicalism, the so-called supervenience physicalism⁹, states that "Physicalism is true in a possible world w iff any world which is a physical duplicate of w is a duplicate

⁸General information about terminology with references can be found from terminology forum of the University of Vaasa: URL: <http://lipas.uwasa.fi/termino/> (20/9 2009).

⁹The idea of supervenience is the following: "A dot-matrix picture has global properties – it is symmetrical, it is cluttered, and whatnot – and yet all there is to the picture is dots and non-dots at each point of the matrix. The global properties are

of *w simpliciter*” [12], thus ruling out B from being physical. However, I do not see any problems in ruling out B , since the problem of setting the problem comes from the meaning of the term *exists*¹⁰. Since existence is generally related to interaction, reference to an object that exists but does not interact is a meaningless and baseless exercise of playing with words. If the idea of physicalism were changed so that it included B as a physical setup, then it would lead to other problems.

The logical structure of the proposition ”everything is physical” will get clearer by using predicate logic. In predicate logic, existence is not a predicate but expressed with quantification. Thus, the logical structure of the proposition is $\forall xP(x)$, where $P(x) \equiv$ ” x is physical”. A part of the problem of epiphenomenal ectoplasm is that from the proposition $\forall xP(x)$ one can, without thinking and study of validity boundaries of the proposition, make the conclusion $P(\epsilon)$, where $\epsilon \equiv$ ”epiphenomenal ectoplasm” – i.e., to make the erroneous conclusion that the epiphenomenal ectoplasm is physical. With the same procedure one could argue for all the gods of the world, demons that live in pocket watches or even the present bald king of France to be physical. In a natural language the validity

nothing but patterns in the dots. They supervene: no two pictures could differ in their global properties without differing, somewhere, in whether there is or there isn’t a dot” [29]: (p. 14). Thus, the mental properties in physical world are as the global patterns in dot-matrix picture. There are also other examples and clarifying discussion in Ref. [29].

¹⁰Descartes proved the existence of his god by assuming existence to be a property. About the other flaws of his reasoning and other peculiarities concerning ”existence” in natural languages an interested reader should study, e.g., Ref. [30]: item 239. Existence is not a property in anything within a physical framework, which is easily proved by the following thought experiment. Let us think about an existing object that has properties, e.g., an electron. Then, we start to ”undress” the electron by removing its properties by one by one: rest mass, electric charge, spin etc. At last we ”have” something that has no properties. In philosophy this ”leftover” is dubbed as a substance. But does this substance exist? To be a substance is not permanent, and the amount of substances is not a ”constant of motion of metaphysics” or cannot be derived from anywhere. Has someone ever ”measured” substance – even by using indirect methods? Does substance have something in common with the demon living in my pocket watch? According to Occam’s principle, if I claim that there is a demon in my pocket watch, I have the burden of proof; I must give a valid enough proof for the existence of the demon. How could someone, even in a thought experiment, give any proof to the existence of substance? Any other proof than a proposition of type ”Substance exists because substance exists”? And even if existence is a property, then the existence of something that has no properties is a logical contradiction. In Ref. [31]: VI, the problem of substance is analysed in great detail.

boundaries of proposition $\forall xP(x)$ are more easily seen by using an equivalent proposition (that is obtained using quantification identity): $\forall xP(x) \equiv \neg\exists x\neg P(x)$, that states "it is not so that there exists x so that x is non-physical". It prohibits the existence of the non-physical! While using universal quantification, one often forgets that the exact translation of logical expression $\forall x$ to natural language is "for all existent x " – i.e., universal quantification quantifies only such entities that exist.

The definition of physicalism in natural language, "philosophical theory according to which the non-physical does not exist", is more accurate than the definition I have given above, but since the logical contents of both definitions are identical, and if possible, the definition should contain positive terms, I tend to think that the "positive" definition is adequate – if my analysis is taken into account. Thus, the existence problem of epiphenomenal ectoplasm lies in the question "what is physical".

In physics and physicalism, two lemmas are implicitly assumed: (1) physical reality can be described with propositions accurately, and (2) physical reality is consistent. Without assuming both, it is impossible to do physics.

Physicalism is the base of my study – if one within the framework of physics assumes physicalism to be a wrong approach to understanding the physical reality, one should rather study astrology or yoga flying, not physics.

2. physical: interacting

This is perhaps the most critical point of physicalism. The epiphenomenal ectoplasm problem emerged from the loose use of word *exist*. Is it reasonable to assume existence without a way to verify it? Even in a thought experiment? Thought experiments are often handy in studying logical or fundamental features of physical reality, but they should at least be bounded by logical boundaries of physical reality or otherwise the results may be peculiar. Thus, I define "physical" to be such a condition whose existence can be verified somehow by physical reality. That means, a physical "object" has to interact with some other physical objects. The basic idea is quite similar to the previously mentioned one by Berkeley, who thought that existence is to be perceived [20, 21].

If physical is defined as interacting, then what is physical? Space-time, everything that has energy, since energy folds space-time ("grav-

itation” of general relativity), interactions – ephiphenomenal ectoplasm is not, since it does not interact with anything. Then, there is one minor problem: how about a setup in which there ”exist” N of particles a_i and M of b_i . Particles a_i interact via an interaction A with each other and particles b_i via B with each other. Not even one particle a_i interacts with any particle b_i via any interaction. What is physical in this setup? The answer is that viewed from the ”metalevel” there exists two separate physical realities, one for the a_i ’s and A , and another for the b_i ’s and B . They have separate spacetimes. If one studies the setup inside a physical reality, say, the one with particles a_i , physical is what is inside that physical reality. The particles of b_i do not belong to science since their ”existence” does not affect anything within the realm of particles a_i .

The previous analysis also answers the question about what is ”everything”. Everything is a network of interacting entities.

From physicalism and the definition of physical one can deduct that there exist physical reality, physical state, interactions and time evolution.

3. consistency: absence of contradiction

A logical system is consistent if it does not contain contradictions, i.e., for no proposition ϕ_i , both ϕ_i and $\neg\phi_i$ can be proven simultaneously¹¹. Consistency is quite a strong principle which has a logical cost (or consequence) in the form of Gödel’s incompleteness theorem [8, 32, 33], which roughly states that in a richer logical system than a first order predicate logic one that has propositions concerning its own consistency there exist propositions φ_i of the form of ” φ_i cannot be proven true”. To prove φ_i requires a higher

¹¹In this context I do not use the common formulation that states that ”in a consistent system for all propositions ϕ_i only either ϕ_i or $\neg\phi_i$ are provable”, for an evident reason: for example, from a proposition describing superposition $(\phi_i \vee \neg\phi_i) = t$ in quantum logic one cannot deduce that $\phi_i = t \vee \neg\phi_i = t$. The logical formulation is revealed in the double-slit experiment: $\phi_i = t$ means that ”the particle went through slit A”, and $\neg\phi_i = t$ that ”the particle went through slit B, i.e., it did not go through slit A”. The particle has traveled through slits even when an interference pattern is formed, but as a wave-like entity, not like a well-defined particle through a certain slit.

Therefore, the definition I am using for absence of contradiction is applicable also in quantum logic, not only in classical logic. Though, it is weaker than the usual definition in classical logic that implicitly contains *the law of the excluded third*, i.e., all propositions must have a certain truth value. My given definition does not have this requirement, but if a proposition is true, its negation cannot be true simultaneously. This formulation matches the requirements of quantum physics.

order metatheory. Thus, a consistent system cannot be completely described inside the system.

The inability to prove a proposition does not mean that the proposition must be false or somehow peculiar. Within the particular proposition system the proposition φ_i is true (since the proposition system is consistent), and this is the only possibility since the proposition φ_i has the form of "this proposition cannot be proven true". There is no paradox or contradiction, since one should keep in mind that to prove φ_i requires a higher order metatheory – which means that the consistency of a complex proposition system that results in the perfect description of the system is logically impossible within the system. For concreteness, one should try to imagine whether it is possible for a physical reality to contain such an apparatus that contains the perfect description of the physical reality (including the description of the apparatus itself). The apparatus must have at least as many degrees of freedom as the physical reality!

Physical reality is assumed to be consistent because in an inconsistent physical reality there may be exceptions to physical "rules". In a sense, those exceptions are unphysical (no physical explanation for exception) and thus consistency may be thought to be in-built into physicalism (more about the subject in Definition 11). However, here its separation from physicalism helps to see logical consequences. Consistency is needed to obtain *causality* (Definition 11) and *Noether's principle* (Definition 13). As stated in the analysis of physicalism (Definition 1), it is assumed in physics that the logical structure of the physical reality (the universe) is such that it can be accurately described with propositions. Moreover, the logical structure of physical reality most likely is richer than the first order predicate logic, since e.g., interactions are logically considered as relations and simple relations at least need second order predicate logic.

4. physical reality: entity consisting of everything that is physical

The dimensions of physical reality may be finite or infinite, but one logical restriction comes from the definition of physical reality and physicalism: physical reality is a closed system. Proof: consider an open physical reality (physical reality and an environment that can interact with the physical reality). A particle that is outside the physical reality but inside the environment interacts with particles inside the physical reality. The particle is not a part of physical

reality since it belongs to the environment but, because it interacts with a particle inside the physical reality, it also belongs to the physical reality. Thus, an open physical reality is a contradictory definition.

In a common language physical reality is often titled as "the universe".

5. state: form of existence

A state is such a form of existence of something physical that it includes all its physical aspects, including highly nontrivial correlations. This means that a state is a more abstract form of existence than the existence of common physical objects we encounter in everyday life. In quantum physics, a *state vector* or a *wave function* are mathematical abstractions of the state. States and their mathematical abstractions are wave-like entities (see, e.g., Article IV); they obey superposition principle (Definition 17) and the time evolution of mathematical abstractions of the state of something is given by a wave equation.

6. state of the physical reality¹²

The state of physical reality is a collection of forms of existence of all interacting entities, i.e., all that exists. Its mathematical abstraction in quantum physics is often titled *the wave function of the universe* or *the state vector of the universe*.

7. space-time: entity consisting of space and time

According to current physical understanding, space-time is folded and has one time coordinate and three space coordinates. The folding of space-time is an observed phenomenon (e.g. Ref. [34]), that was predicted by Einstein's theory of general relativity. In general relativity, energy folds space-time, and the folding of space-time affects the flow of energy (e.g. the dynamics of objects with mass). However, it is uncertain whether space-time should be considered as an individual physical entity or should some of its aspects belong to the state of physical reality (consider the ground state of physical reality; does space-time exist if that state is annihilated) and other aspects to interaction (folding of space-time is gravitational interaction between entities with energy). I hope that this

¹²The definition of this concept is not written, since it can be uniquely derived from preceding concepts. This practice can be applied for all concepts of similar type.

question will be answered in the future; maybe a successful theory of quantum gravity with experimental setups will do the work. Before that I consider space-time as a partially independent physical entity which is separated from the state of physical reality and interactions for clarification. An interested reader should check Ref. [35] for detailed discussion about philosophical questions concerning space and time.

8. symmetry: invariance under a group of transformations

The definition is mathematically exact and is given in Refs. [36]: p. 427, [37].

The transformation group can be, e.g., the Lorentz group, the spatial symmetry group, the Poincaré group and the unitary group [e.g. $U(1)$, $SU(2)$, $SU(3)$, $SU(4)$]. External symmetries are associated with space-time and internal symmetries with the state of physical reality. With Noether's principle, any symmetry of the physical reality can be connected with a conserved quantity. More details in Refs. [36, 37].

9. interaction: a process in which two or more bodies exert mutual forces on each other

This definition is found in a scientific dictionary [38]: Interaction. An interaction is a physical cause that couples particles using their true properties¹³. The coupling causes a force that affects two coupled particles at equal strength to opposite directions. The role of interaction may also be understood as something that couples possible states with each other.

10. time evolution: process in which a state evolves in time

In nature, the type of time evolution is trivial – it is the way things evolve in the physical reality – but in modelling physical reality there are many mutually incompatible possibilities to choose *the time evolution equation*. In physical models, from time evolution

¹³True properties of objects are conserved quantities (e.g., spin). "Untrue" properties are not conserved (e.g., redness). The distinction between true and untrue properties is similar to the distinction between Lockean primary and secondary qualities [39]: Chapter VIII. The term "true property" is more exact and better grasps the phenomenon than the term "primary quality". The other (untrue) properties of objects can be derived from true properties, system configuration, correlations and time evolution.

equation (the type of time evolution), interactions and the properties of space-time one derives a time evolution operator that is a set of rules (mathematical mapping) that maps an arbitrary state at an arbitrary moment of time to a (final) state at another moment of time.

11. causal time evolution: unique time evolution

Causality is a result of the consistency of the physical reality. Unique time evolution states that there is only one final state into which the initial state is mapped. This idea is built into (most of) fundamental physics, but it is seldom explicitly stated along with its consequences. In modelling quantum physics, causality means that the time evolution operator is a unitary operator.

Unique time evolution means that the rules of time evolution in the time evolution operator is the same for everything in all cases, without any (initial state related) exceptions. For example, let us consider a simplified problem of gravitation. All particles with masses interact with each other, and the given interaction states that between two (or more) masses there is an attractive force. In unique time evolution, these masses attract each other no matter what is the size of the mass, date or time or spacing between them. But, in a non-unique time evolution there may exist exceptions. If it happens to be Thursday 14th of July and there is one particle with the mass of one kilogram and another with two kilograms in certain places, it would happen that the Earth and the two kilogram mass will have repulsive forces. The repulsive force happens only in this case – if the one kilogram mass is absent or the two kilogram mass is replaced with the one kilogram mass, then the normal attractive force will apply everywhere. In quantum physics, a well-known example of non-unique time evolution is the "Everett phone" [40].

Moreover, most of non-unique time evolution scenarios violate Noether's principle, and clearly they violate physicalism: exceptions are highly unphysical causes among physical rules. According to this analysis, causality can be derived from physicalism. Theories with non-unique time evolution may be useful effective theory descriptions but one should keep in mind that they cannot be used as fundamental physical theories that describe the fundamental features of physical reality.

12. conserved quantity: quantity whose total amount in the physical reality remains constant in time

The total amount of a particular conserved quantity remains constant in physical processes (in interactions), i.e., the amount does not change in time. Therefore, conserved quantities are often entitled constants of motion. Often they are said to obey conservation laws (e.g., conservation of energy, spin, electric charge etc.). The reference to time in the definition is redundant, since time is a part of physical reality, but it is explicitly stated for clarification.

13. Noether's principle: principle according to which there is one-to-one correspondence between certain symmetries of physical reality and certain conserved quantities

Noether's theorem states that invariance of the Lagrangian under a group of continuous transformations implies the conservation of some quantity [41]. The expression is almost equivalent to my definition but in a more technical language. The validity of the Lagrangian formalism in physical reality implicitly assumes causality, which in turn assumes consistency. Thus, Noether's principle is valid only in consistent systems.

14. conservation law: law concerning conserved quantity according to which a particular quantity is conserved

Noether's theorem (or principle) links some conserved quantities with some symmetries of physical reality. If a symmetry is found, a conservation law of corresponding quantity is valid in the physical reality.

15. indeterministic time evolution: causal time evolution with the possibility of true random processes

From the experimental setup and data of Refs. [42, 43, 44] one can conclude that, within the experimental accuracy, there do exist true random processes¹⁴ in physical reality. That means, determinism is falsified (determinism prohibits the existence of true random processes) and hence, physical reality is indeterministic.

The experiment is a clever refinement of the double-slit experiment: to shoot two photons towards the double-slit along crossing paths. Deterministic theories (e.g., Bohm's pilot wave theory which was the target of refuting) imply that no coincidence is expected when two detectors are in the same semiplane respect to the median symmetry

¹⁴Sklar [45]: p. 123 expresses the same with the words "pure chance without hidden variables".

axis of the double-slit. However, a coincidence pattern predicted by standard quantum physics (where true random processes are in-built) was observed.

16. physical law: objective regularity present in the physical reality

The term "law" is problematic in physics: Are there "laws" that physical reality obeys, or are the assumed "laws" only the way how physical reality is? Or are the "laws" and observed correlations only manifestations of how the existence of physical reality is observed? The word "law" is ambiguous, and in physics it could refer to four different concepts: (1) objective pattern (or natural regularity), (2) formula purporting to represent an objective pattern, (3) law-based rule (or uniform procedure), and (4) principle concerning any of the preceding [14]. Only the first one is ontological, the others are of epistemological nature, and thus the first one is the only adequate candidate for the definition of "law" in the (ontological) model of physical reality. The physical law does not have an essential role in a model of physical reality since, even if these laws are objective and physical reality "obeys" them without exceptions, the behaviour of physical reality is not caused by these laws, but by interactions and time evolution. The physical "law" is only a human way to try to find regularities and correlations of physical reality – to try to comprehend interactions and the time evolution.

17. superposition principle: principle according to which there exist superposition states

According to the superposition principle, a linear combination of the solutions of the equation is also a solution of the equation. The superposition principle is valid for all linear differential equations (e.g., Schrödinger equation). The equations of elementary physical theories are linear, which suggests that there exist superposition states in physical reality. Practically, it states that, e.g., for a wave equation if A is a wave (solution of the wave equation) and B is a wave (solution of the wave equation), then also $A + B$ is a wave (solution of the wave equation). For more details, see, e.g., [46].

18. physical object: well-defined collection of elementary particles and/or correlations between elementary particles

A physical object is something familiar from everyday life. A physical object consisting of particles can be a chair, a house, a particle accelerator, a galaxy or a photon field produced by 60 W bulb.

Immaterial "objects" consist only of correlations between particles., e.g., money in one's bank account, objects in a computer game, or a fireball in a role playing game. Their "objectness" may be questioned, but they are physical – one will get different service in a Ferrari shop depending on the balance of one's bank account, and live role players will fall and whine in pain if someone throws a "fireball" at them. There are two reasons to define physical objects via particles: first, the second quantisation treats all fields as particle fields, and second, while the definition can be given by using states, humans tend to comprehend particles easier, since they have no means to see states directly, e.g., the state of a chair. However, the way humans comprehend objects opens doors and windows to many philosophical problems. The most important is known as *the problem of conventional (intensional) objects* [31]: VI.7, [47]. Partially it concerns the identity of the object and partially the borders of the object. Maybe the best known example is "the ship of Theseus" that is repaired and repaired so that after a long time not a single part of the original ship is left. Is this repaired version the same ship of Theseus? What about if someone fetches from a scrap yard all the original parts of the ship and builds a ship of the same model from them? Or, what happens when a chinchilla eats a flower? Where is the boundary of flower and where is the boundary of chinchilla? Especially when some particles forming the flower will later be particles forming the chinchilla. In my definition, the demarcation problem is met by the idea of "well-defined". Well-defining is not unique – it is only as good as humans can do. Only seldom does physical reality define sharp boundaries for us. Still, physical objects do exist and they are objective but in a sense very fuzzy.

19. state of a physical object

The form of existence of, e.g., a chair is not as trivial as one could think when looking at the chair. The chair is a collection of particles (most accurate and valid particle description suggests quarks and so on) and correlations between particles. However, while the reasoning concerning *physical objects* resulted in that the borders of a chair are somewhat fuzzy, now it appears that they are very fuzzy and in fact, the whole chair is fuzzy. The particles of a chair are correlated with many particles of the Earth and the Solar system. In fact, the chair is even (quantum) correlated with another probable "options" of the form of existence of the chair – in some unrealised

reality the particles of chair would be solid rock, or even a part of a photon field in the universe. The state of the chair is in principle an entangled superposition of all possible forms of existence of the chair. Since physical reality is quite old (compared to us humans), there exist a lot of nontrivial quantum correlations. While the state of a physical object is very abstract and far away from common life experiences, it is needed in quantum physics – especially if one is studying fundamental aspects of physical reality. In modelling physical reality, the state of a chair has mathematical abstraction of *the wave function of the chair* or *the state vector of the chair*.

20. coarse-graining: phenomenon which defines the composition of physical object

Coarse-graining is a common term from quantum physical modelling, where it refers to the process that produces an effective theory description from a more fundamental theory by discarding irrelevant degrees of freedom. Practically, it defines borders of systems or subsystems, or the means that produce those borders. Similar processes appear to happen also in physical reality. In physical reality, state-like behaviour is seldom observed, but object-like behaviour seems to rule. There are quite sharp boundaries (e.g., the pages of a closed book remain separate) despite the quantum fuzziness. This coarse-graining that happens in physical reality is unique and objective. I assume that it is a result of quantum correlations and decoherence. Theoretical research into coherence with a realistic model for quantum physical reality could shed light on questions concerning coarse-graining.

21. possible state of physical reality

The state of physical reality is a sum (superposition) of all possible states of physical reality. The Bekenstein bound [48, 49, 50] implies that there can exist only a finite amount of possible states in a (closed) physical reality. Finiteness is analysed in more detail in section 5.1.

22. correlation: coexistence of two or more phenomena

Let us illustrate correlations by a classical example. While leaving to work in the morning, you accidentally take only one glove and put that into your pocket. If you find a left hand glove in your pocket, then the one that is at home is the right hand glove. The gloves are correlated. Interactions and time evolution can create

correlations between objects (and between possible states within the state description). Perfect correlation occurs when two possibilities have the probability of 1 to coincide. Next, let us consider 10^9 longcase pendulum clocks that show random time and whose unit of time is random but very close to "standardised time". Then, two clocks are randomly chosen and the correlations between them are calculated from the times the clocks show and from the period and phase of their pendulums. It is possible that we have chosen from the random sample two clocks that show exactly the same time and pendulums have the same period and phase. They are perfectly correlated but have no relation whatsoever between each other (except that they are longcase pendulum clocks with random time and pendulum parameters). Coexistence does not necessarily require any relation between phenomena, but the probability that the phenomena are related increases as the measure of correlation increases.

23. quantum correlation: correlation related to quantum physical superposition states

Quantum correlations cannot be explained within the framework of classical correlations. Generally, entangled quantum states are considered to be quantum correlated and superpositions of different outcomes are often considered to be in the same category. I consider next a spin 1/2 particle in order to clarify the nature of quantum correlations. Let the spin 1/2 particle be in a superposition state

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_z\rangle + |\downarrow_z\rangle). \quad (2.1)$$

The density matrix of the state is

$$\rho_q = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}_z. \quad (2.2)$$

The density matrix of a statistical mixture of spin up and down particle (like classical coin-tossing if the tossing of a coin is a true random process) is

$$\rho_c = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}_z. \quad (2.3)$$

Now, if a measurement is performed in the spin- x basis one obtains a result \uparrow_x with probability of 1 if the measured system is ρ_q , and if the measured system is ρ_c , then the result is \uparrow_x with probability of

0.5 and \downarrow_x with probability of 0.5. Thus, it is reasonable to assume a superposition state to possess some kind of (quantum) correlations that cause visible effects in some cases.

24. entanglement: quantum correlation between two or more particles

Let us again consider the case of gloves presented with Definition 22. One glove was in the pocket and another one was left home. There were classical correlations between the gloves, but what if the gloves could possess quantum correlations? In that case, they could be prepared in a superposition state in which one glove is at home and another is in the pocket. The form of the state would be

$$|\psi_g\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|l_p r_h\rangle + |r_p l_h\rangle), \quad (2.4)$$

where l (r) refers to the left (right) hand glove and index p (h) to pocket (home). Two mutually uncorrelated superposition states of gloves is

$$|\psi_G\rangle = \frac{1}{2}(|l_p\rangle + |r_p\rangle) \otimes (|l_h\rangle + |r_h\rangle). \quad (2.5)$$

The corresponding density matrices are

$$\rho_g = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

and

$$\rho_G = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

The reduced density matrix of the entangled system for, say, the left hand glove is

$$\rho_l = \text{Tr}_r \rho_g = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.8)$$

which appears to be coin-tossing, while for ρ_G the reduced density matrix is a density matrix of a superposition state. The entropies of different density matrices (see Sections 5.2.1 and 5.3) are:

$$S_{id,G} = 0, \quad (2.9)$$

$$S_{id,g} = 0, \quad (2.10)$$

$$S_{re,G} = 0, \quad (2.11)$$

$$S_{re,g} = S_l + S_r = 2\ln 2. \quad (2.12)$$

The difference between the entropies of the whole system and the combined entropy of subsystems in the case of ρ_g is explained by the information that lies in the correlations between the gloves. In case of ρ_G the information content of the correlations between the gloves is 0 (which is a natural result since the gloves are uncorrelated). A quantum system that is correlated like ρ_g is said to be an entangled system. Correlations between entangled objects are experimentally observed (see e.g., [51]), and they cannot be explained with classical correlations. Entanglement is a very important concept in quantum information theory. For more details, see e.g., Refs. [40, 52].

25. coherence: correlation of wave-like entities

The subject is covered in Chapter 5.

26. quantum coherence: measure of the strength of quantum correlations

Quantum coherence is a conserved quantity. According to Noether's principle, there exists correspondence between symmetries and conserved quantities in the physical reality. Mathematically, the symmetry corresponding to coherence is the invariance of the density matrix under the change of the basis vector set. At the conceptual level, the formulation of the corresponding symmetry is the invariance of the state under the change of the basis vector set.

I define the quantum coherence of the density matrix ρ to be $\Xi = \frac{N}{N-1} (\lambda_{max} - N^{-1})$, where $N = \text{Dim}(\rho)$ and λ_{max} the greatest eigenvalue of the density matrix ρ . Quantum coherence is an intensive measure. The subject is covered in Chapter 5 and its Sections.

27. decoherence: decrease of coherence

The subject along with the related problems is covered in Chapter 5 and its sections.

28. recoherence: increase of coherence

The subject is covered in Section 5.1.

29. entropy: extensive measure of the number of possible states and corresponding probabilities

Entropy is a conserved quantity. The subject is covered in Section 5.2.

Chapter 3

About known and observed coherence phenomena

I will take the liberty to proceed chronologically here along the scientific progress, and thus not yet consider in detail what coherence is. The definitions presented in the previous chapter are analysed in more detail in Chapters 4 and 5. In this chapter, I concentrate more on experimental coherence studies, its history and recent results.

Even though quantum physical coherence phenomena are a very general type of phenomenon in the physical reality, especially the observation of pure coherence phenomena is hard since most of physical reality is most times in a very incoherent state. Decoherence (which is also a coherence phenomenon) tends to diminish coherence of any subsystem. Thus, degenerate quantum gases (Bose condensates and ultracold fermion systems) form a suitable "laboratory" framework for studying coherence phenomena in theory and in practice.

The reader should keep in mind that the word "coherence" has dual use in this thesis. One is according to the so-called normal paradigm of physics. My another use of word "coherence" is based on the coherence theory presented in this thesis. I have chosen this practice since the subjects that the word "coherence" normally refers to are somehow related to my exact definition of coherence, and thus I have not found it necessary to invent new terms. The practice may seem contradictory and confusing, but it should be clear from the context what the word "coherence" refers to. The purpose of my definition for coherence is to increase the understanding of phenomena known as coherence phenomena, to conclude preceding knowledge of those phenomena and to serve the general theoretical principles behind the phenomena.

The words "coherence phenomenon" refers mostly to phenomena that

occur in systems with large coherence or to phenomena in which coherence is transferred between subsystems or between a system and its environment. Characteristic of the first type of coherence phenomena is that the system has very low entropy.

3.1 General theory of Bose condensates

The particles of physical reality can be divided into two categories by their spin: to bosons (particles with an integer spin) and to fermions (particles with a half-integer spin). Bosons and fermions differ from each other in that respect that bosons obey Bose-Einstein statistics and fermions Fermi-Dirac statistics¹. The difference is due to the Pauli exclusion principle that restricts quantum states for particles of Fermi-Dirac statistics: two fermions cannot have identical quantum states². Bosons do not have this restriction, and hence they can be accumulated into the same quantum state.

Bosons and fermions seem to have different roles in physical reality. Elementary particles (with this word I refer to quarks and leptons) are fermions, and all the common "hard" matter consists of them. In second quantised theories (quantum field theories) "fundamental interactions" function in such a way that fermions, real and virtual bosons exchange virtual bosons with each other. Forces are the result of conserved quantities in these interactions and mediated by virtual bosons. For any particle, its spin defines whether it is a boson or a fermion, and thus for a particle that is a collection of elementary particles, their joint

¹Let us consider a system of identical particles. For the system, the probability density of the wave function $\Psi(r_1, r_2 \dots r_i \dots r_j \dots r_N)$ is $|\Psi(r_1, r_2 \dots r_i \dots r_j \dots r_N)|^2$. Since "you cannot mark an electron, you cannot paint it red" [53], i.e., the probability density is unchanged if any of the identical particles change places with each other, and thus $|\Psi(r_1, r_2 \dots r_i \dots r_j \dots r_N)|^2 = |\Psi(r_1, r_2 \dots r_j \dots r_i \dots r_N)|^2$. The result can be obtained in two ways: in a symmetrical case, $\Psi(r_1, r_2 \dots r_i \dots r_j \dots r_N) = \Psi(r_1, r_2 \dots r_j \dots r_i \dots r_N)$, and in an antisymmetrical case $\Psi(r_1, r_2 \dots r_i \dots r_j \dots r_N) = -\Psi(r_1, r_2 \dots r_j \dots r_i \dots r_N)$. It appears that particles with a symmetrical wave function have an integer spin, and particles with an antisymmetrical wave function have a half-integer spin.

²This is a natural result of the antisymmetry of the wave function. There are two possibilities to write the wave function of two uncorrelated identical particles: $\Psi_1(r_1, r_2) = \psi_a(r_1)\psi_b(r_2)$ and $\Psi_2(r_1, r_2) = \psi_a(r_2)\psi_b(r_1)$. Because the physical reality does not notice any difference between the descriptions, it is equivalent with that the description of the system is a superposition of the two possibilities, i.e., $\Psi(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) - \psi_a(r_2)\psi_b(r_1))$ [minus is a result of antisymmetry]. If $a = b$, then $\Psi = 0$.

spin defines its statistics. A proton or a neutron is a fermion, they consist of three quarks. A ${}^3\text{He}$ atom consists of two protons, two electrons (a lepton which is a fermion) and one neutron, so it is a fermion, but a ${}^4\text{He}$ atom, or even a ${}^{87}\text{Rb}$ atom, is a boson, since it consists of an even number of fermions. These bosons consisting of many fermions do not generally end up into the same quantum state, since it would require that their wave functions are overlapping. It means that their spatial probability distributions should be overlapping, i.e., particles should be localised within their thermal de Broglie wavelength $\lambda_T = h/\sqrt{2\pi m_{87\text{Rb}}kT}$. For an average ${}^{87}\text{Rb}$ atom at a "normal temperature of $T \sim 300$ K, the de Broglie wavelength is $\lambda_T \sim 1.1 \times 10^{-11}$ m, compared with the atomic radius $r_{87\text{Rb}} \sim 2 \times 10^{-10}$ m, and thus the matter wave is very localised. Therefore, two nearby atoms would "see" each other as a bunch of mutually interacting fermions, not as a single boson. But according to our reasoning one could assume that in theory ${}^{87}\text{Rb}$ atoms could be accumulated into the same quantum state if the temperature was low enough and thus the thermal de Broglie wavelength would be long enough to allow overlapping matter waves.

Before studying how bosonic atoms are accumulated into the same quantum state, I will give a brief introduction to boson and fermion statistics. Let us assume that there exists an unbounded amount of interactionless identical particles in a potential with energy levels ϵ_l , where $0 \leq l \leq L$, so that ϵ_L is the highest possible energy level of the problem. Thus, the representation of the many-particle Hamilton operator in a Fock space is

$$H = \sum_l \epsilon_l n_l, \quad (3.1)$$

where $n_l = a_l^\dagger a_l$ is the number operator of the state l . Bosons obey commutation rules

$$[a_l, a_{l'}] = [a_l^\dagger, a_{l'}^\dagger] = 0, \quad (3.2)$$

$$[a_l, a_{l'}^\dagger] = \delta(l, l') \quad (3.3)$$

and fermions anticommuation rules

$$[a_l, a_{l'}]_+ = [a_l^\dagger, a_{l'}^\dagger]_+ = 0, \quad (3.4)$$

$$[a_l, a_{l'}^\dagger]_+ = \delta(l, l'). \quad (3.5)$$

Let us use the basis vector set of a Fock space $\{|\{n_l\}\rangle\}$, where the set of numbers $\{n_l\}$ describes the occupation of possible energy states. On that

basis, the eigenenergy is $E = \sum_l \epsilon_l n_l$ and the eigennumber is $N = \sum_l n_l$. Thus, the grand-canonical partition function for bosons is

$$\begin{aligned} Z_{G,BE} &= \sum_{\{n_l\}} \exp(-\beta \sum_l n_l (\epsilon_l - \mu)) \\ &= \prod_l \left(\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n (\epsilon_l - \mu)} \right) = \prod_l \frac{1}{1 - e^{-\beta (\epsilon_l - \mu)}} \end{aligned} \quad (3.6)$$

and for fermions

$$Z_{G,FD} = \prod_l \left(\sum_{n=0}^1 e^{-\beta n (\epsilon_l - \mu)} \right) = \prod_l (1 + e^{-\beta (\epsilon_l - \mu)}), \quad (3.7)$$

where μ is the chemical potential and $\beta = \frac{1}{kT}$. The probability of a many particle state $|\{n_l\}\rangle$ for bosons and fermions is

$$P(|\{n_l\}\rangle) = \frac{1}{Z_G} \exp\left(-\beta \sum_l n_l (\epsilon_l - \mu)\right). \quad (3.8)$$

Now the expectation value of occupation number is

$$\langle n_l \rangle = \frac{1}{Z_G} \sum_{\{n_k\}} n_l \exp\left(-\beta \sum_l n_l (\epsilon_l - \mu)\right) = \frac{1}{e^{\beta (\epsilon_l - \mu)} \mp 1}, \quad (3.9)$$

where minus is for Bose-Einstein statistics and plus for Fermi-Dirac statistics. The distribution of occupation numbers depends on the chemical potential μ . One notices from Eq. (3.9) that for an ideal bosonic system $\mu \leq 0$, because one can always choose $\epsilon_0 = 0$. This constraint does not apply for fermions, but if $\mu \gg kT$, then the fermion system is deeply degenerated, and applying quantum physics is mandatory for reasonable results.

The number of particles in a bosonic system is

$$N = \sum_l \frac{1}{e^{\beta (\epsilon_l - \mu)} - 1}. \quad (3.10)$$

Let us estimate the properties of the system by changing the sum into an integral by assuming free particles, i.e., $\epsilon = \frac{p^2}{2m}$:

$$\sum \rightarrow \frac{V}{h^3} \int_{\Omega} d\Omega \int p^2 dp = \frac{V 2\pi (2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^{\infty} \sqrt{\epsilon} d\epsilon. \quad (3.11)$$

Now,

$$\rho = \frac{N}{V} = \frac{2\pi (2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\epsilon}}{e^{\beta (\epsilon - \mu)} - 1} d\epsilon. \quad (3.12)$$

It is impossible to keep the density as a constant while decreasing the temperature. By setting $\mu \rightarrow 0$ in Eq. (3.12) the critical temperature is solved:

$$T_c = \frac{h^2}{2\pi mk} \left(\frac{\rho}{\zeta(\frac{3}{2})} \right)^{2/3}, \quad (3.13)$$

where ζ is the Riemann Zeta function³ and $\zeta(\frac{3}{2}) \sim 2.612$. Below the critical temperature T_c bosons begin to accumulate onto the lowest energy state $\epsilon_0 = 0$, $\mathbf{p} = 0$. This is known as Bose condensation. The critical temperature sets the limit for how low the temperature must be in order for the wave functions of single bosons to considerably overlap. Naturally, if $T < T_c$, Eq. (3.12) is not a valid description of the bosonic system, but the state ϵ_0 must be counted separately.

I will not cover in more detail the theory of Bose condensates, but concentrate briefly on why I find these condensates interesting. First, overlapping wave functions of microscopic particles forming a macroscopic wave function gives a possibility to study quantum phenomena on a macroscopic scale. Second, Bose condensates have been successfully made since 1995 from various elements (⁷Li [54], ⁸⁷Rb [55], ²³Na [56], spin-polarised hydrogen [57], metastable ⁴He gas [58, 59], ⁴¹K [60], ⁸⁵Rb [61], ¹³³Cs [62], ¹⁷⁴Yb [63] and dipolar ⁵²Cr [64]). Third, the entropy of condensed atoms is very low, and thus there may occur various interesting coherence phenomena in Bose condensates, like interference between condensates [65], collective oscillations (e.g., Rabi oscillations) between different condensate states [66, 67, 68], vortices [69, 70, 71] and solitons [72, 73] – to mention a few of theoretical and experimental setups.

A very interesting family of coherence phenomena are such phenomena that happen between two condensate states. Of those, I concentrate mostly on phenomena between atomic and molecular condensate states, since a molecular Bose condensate itself is interesting. Almost a decade ago there was a debate within the scientific community whether or not a molecular condensate is possible in practice, and if it is possible, how one could detect it [74]. Afterwards, collaboration between theorists and experimentalists led to successful verification of the existence of molecular condensates [4, 66, 67, 68, 72, 75, 76, 77, 78]. There are two methodologically different approaches to create a molecular condensate: photoassociation in which atomic and molecular condensate states are coupled with each other via laser(s) [66, 67, 68, 72, 75] and magnetoassociation, in which adiabatically changing the magnetic field the equilibrium state

³ $\int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{e^x - 1} dx = \int_0^\infty dx \sqrt{x} (e^{-x} + e^{-2x} + e^{-3x} + \dots) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} (1 + 2^{-3/2} + 3^{-3/2} + \dots) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \zeta(\frac{3}{2})$

of the system is transferred via Feshbach resonance from an atomic state into a molecular state [4, 76, 77, 78]. Despite the fact that these methods are practically quite different, in theory (and by looking at the equations) they have the same working mechanism (article I).

A degenerate fermion system is mainly concentrated within the Fermi energy (or Fermi momentum) in the phase space, i.e., the energy levels below Fermi energy are, with few exceptions, occupied. What is the outcome if photoassociation or magnetoassociation is applied onto a degenerate fermion system? If the initial state is two degenerate fermion systems, the result is a molecular condensate [4, 76, 77, 78], and if a degenerate fermion system is coupled with an atomic condensate, the result is a degenerate fermion molecule system (articles I and II). Between these states there occur similar collective coherence phenomena as between atomic and molecular condensate states, despite the fact that the coupled particles obey different statistics.

Next I present a more detailed analysis about a couple of interesting coherence phenomena.

3.2 About atomic and molecular condensates, Rabi oscillations and photoassociation

Let us consider a bosonic system with N particles that have two possible states $|A\rangle$ and $|B\rangle$, which have the energy difference, i.e., detuning $\hbar\delta$. If the Hamiltonian of the system is

$$\frac{H}{\hbar} = \delta b^\dagger b - \frac{\kappa}{2}(b^\dagger a + a^\dagger b), \quad (3.14)$$

where a and b are annihilation operators onto states $|A\rangle$ and $|B\rangle$, the coupling between states is $\hbar\kappa$, and $N = a^\dagger a + b^\dagger b = n_a + n_b$, the particles are oscillating between the two states. Due to the particle number conservation, an arbitrary initial state $|\Psi\rangle = |n_a\rangle \otimes |n_b\rangle$ can be written as

$$|\Psi\rangle = |n_b\rangle \otimes |N - n_b\rangle = |N_b\rangle, \quad (3.15)$$

and thus the Schrödinger equation

$$i\hbar\partial_t\Psi(t) = H\Psi(t) \quad (3.16)$$

yields coupled differential equations (in $\{|N_b\rangle\}$ basis):

$$i|\dot{0}\rangle = -\frac{\kappa}{2}\sqrt{N}|1\rangle$$

$$\begin{aligned}
& \vdots \\
i|\dot{n}\rangle &= \delta n|n\rangle - \frac{\kappa}{2}\sqrt{(n+1)(N-n)}|n+1\rangle - \frac{\kappa}{2}\sqrt{n(N-n+1)}|n-1\rangle \\
& \vdots \\
i|\dot{N}\rangle &= \delta N|N\rangle - \frac{\kappa}{2}\sqrt{N}|N-1\rangle.
\end{aligned}$$

For concreteness, I present the time evolution of the state $|N_b = 0\rangle$ with $N = 1$:

$$|0(t)\rangle = e^{-i\delta t/2}(Ae^{i\sqrt{\delta^2+\kappa^2}t/2} + Be^{-i\sqrt{\delta^2+\kappa^2}t/2})|0(t_0)\rangle. \quad (3.17)$$

This solution oscillates along with the detuning with the frequency $\chi = \sqrt{\delta^2 + \kappa^2}$, which is known as the generalised Rabi frequency [79]. If the detuning δ is set to zero, the system is in resonance. The form of solution with respect to Rabi frequency remains the same also with greater N values. This is illustrated in Fig. 3.1(a).

If the case under consideration is such that atoms are converted into molecules (and vice versa), the major features of phenomena remain the same, but there is more structure in oscillations. In photoassociation, atoms are associated into molecules in a suitable photon field. If the energy difference between the ground state of free atoms and a bounded molecular state matches with the energy of a photon in the photon field, atoms absorb the photon and form a bounded molecule [66, 67, 68, 75, 80, 81, 82, 83, 84, 85]. A Hamiltonian describing photoassociation interaction is in its most simple form like the one in Eq. (3.14):

$$\frac{H_{A-M}}{\hbar} = \delta g^\dagger g - \frac{\kappa}{2}(g^\dagger a a + a^\dagger a^\dagger g), \quad (3.18)$$

where g is the molecular annihilation operator. Particle conservation is given by $N = 2g^\dagger g + a^\dagger a$, and an arbitrary initial state $\Psi = |n_a\rangle \otimes |n_g\rangle$ can be expressed using only the molecular number by $\Psi = |N - 2n_g\rangle \otimes |n_g\rangle$. The Hamiltonian (3.18) yields the Heisenberg equations of motion

$$i\dot{a} = -\kappa a^\dagger g \quad (3.19)$$

$$i\dot{g} = \delta g - \frac{\kappa}{2} a a \quad (3.20)$$

from which it is easily seen that the frequency

$$\Omega = \sqrt{N}\kappa \quad (3.21)$$

is a characteristic frequency of the system [66]. Now the generalised Rabi frequency that takes into account the detuning δ is $\chi = \sqrt{\delta^2 + \Omega^2} =$

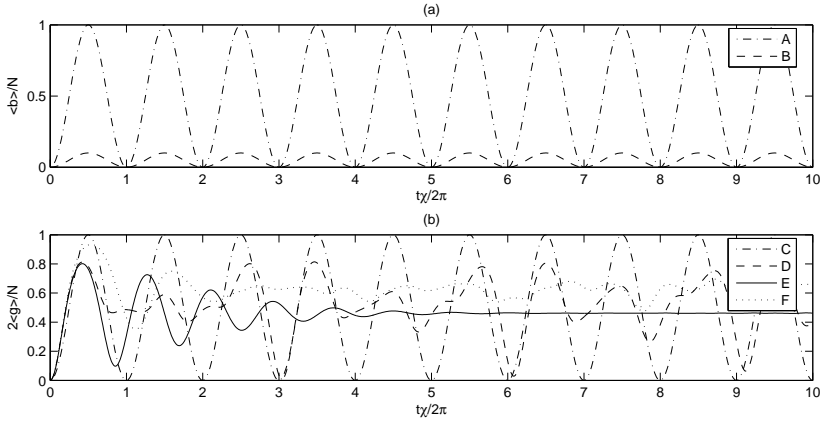


Figure 3.1: Rabi oscillations (a) between two atomic condensates and (b) between an atomic and a molecular condensate. Parameter values are (A): $N = 1$, $\delta = 0$ and $\kappa = 10$, (B): $N = 10$, $\delta = 30$ and $\kappa = 10$, (C): $N = 2$, $\delta = 0$ and $\kappa = 10$, (D): $N = 10$, $\delta = 0$ and $\kappa = 10$, (E): $N = 100$, $\delta = 30$ and $\kappa = 10$ and (F): $N = 100$, $\delta = 0$ and $\kappa = 10$. Time is scaled with the generalised Rabi frequency (a) $\chi = \sqrt{\delta^2 + \kappa^2}$ and (b) $\chi = \sqrt{\delta^2 + N\kappa^2}$. In the interaction between two atomic condensates (a) the oscillation frequency is independent of the particle number N . The detuning δ affects the amplitude and frequency of oscillations. In the interaction between an atomic and a molecular condensate, the situation is altered a bit (b): the particle number N affects frequency and the structure of oscillations. The structure is most simple if $N = 2$ (maximum one molecule in the molecular state), while the form of oscillations and relation to the generalised Rabi frequency is the same as in the interaction between atomic condensates (graphs (A) and (C)).

$\sqrt{\delta^2 + N\kappa^2}$. Oscillations between atomic condensates and atom-molecule condensates related to the generalised Rabi frequency are compared in Fig. 3.1. More detailed results can be found, e.g., in Ref. [68]. The atom-molecule case converges with the atom-atom case only if the particle number in atom-molecule case is $N = 2$. In the atom-atom case all particle numbers behave identically, but in the atom-molecule case there is more structure in oscillations as the particle number increases. This is a result of asymmetry in the interaction between atoms and molecules: two atoms are needed to form one molecule. The nonlinearity causes eigenvalues to be unequally spaced which results in collapses and revivals in molecule (and atom) number.

As mentioned before, it is desirable to produce a molecular condensate. Of course, a (at least fractional) molecular condensate can be produced by setting the system on resonance (i.e., $\delta = 0$) and cutting off

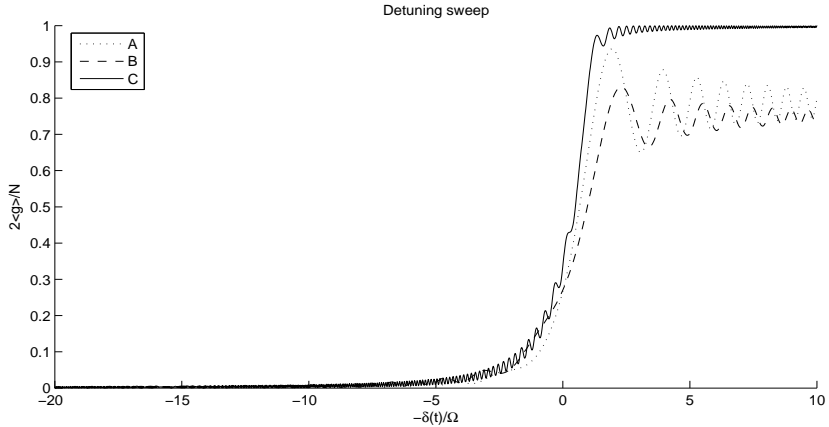


Figure 3.2: Molecular fraction of the total particle population when the detuning between an atomic and a molecular state is changed linearly and adiabatically as a function of time $\delta(t) = -\xi\Omega^2 t$. (A): $N = 2$, $\xi = 1$, (B): $N = 10$, $\xi = 1$ and (C): $N = 10$, $\xi = 0.1$. The unit of time is a dimensionless ratio of the detuning and the characteristic frequency $-\delta(t)/\Omega$. If the adiabatic sweep is done slowly enough, almost the entire atomic population is converted to molecules (C).

photoassociation at a certain moment of time, but it is hard to keep the system in resonance, since the energy of joint condensate system depends on the number of atoms and molecules (because of the atom-atom and molecule-molecule interactions) [66]. A simpler method to produce a molecular condensate is to change adiabatically the detuning between atomic and molecular condensate states⁴, like (expressed with the characteristic frequency):

$$\delta(t) = -\xi\Omega^2 t, \quad (3.22)$$

where ξ is the "adiabaticity factor", i.e., the change of detuning is adiabatic if $\xi \ll 1$ [66].

Fig. 3.2 shows that the adiabatic sweep of detuning can transfer almost all atoms into molecules if the adiabaticity factor is small enough. Despite the fact that in producing Fig. 3.2 only a small particle number has been used, the phenomenon occurs with greater particle numbers like [66].

⁴Known as adiabatic following/transfer [66, 86, 87]. The process is often referred to with an acronym STIRAP, which stands for "stimulated Raman adiabatic passage". "Stimulated" because of using coherent photon sources (lasers), "Raman" because of inelastic photon scattering, "adiabatic" because the process is slow enough for the state of the system to remain the eigenstate of the slowly changing Hamiltonian, and "passage" because the system is transferred through resonance.

3.3 A macroscopic superposition between atomic and molecular condensate states

The scheme presented in this Section is like the physicist's answer to the question about the winning horse in a gallop race: "That is easy. Let us first assume a point-like horse and that the gallop race occurs in a vacuum..." That is, let us see what happens with unitary dynamics when all undesirable effects are set to zero, i.e., is the phenomenon even possible within the theory? The meritorious research of Ref. [88] claims that a macroscopic superposition between atomic and molecular condensate states is possible at least at the idealised theoretical level. Thus, the next question is whether it is possible within a less idealised theoretical setup, and if it is, is it possible to observe in practice and what kind of constraints does the reality set to the experiment (Article III)?

The initial state is an atomic condensate. Atoms are associated to molecules by photoassociation (Section 3.2). The nonlinear photoassociation interaction between atoms and molecules has an identical form with an extensively researched second harmonic generation interaction Hamiltonian $V = \hbar\epsilon (b^\dagger aa + a^\dagger a^\dagger b)$ [89]. The s-wave scattering between atoms and molecules corresponds to the amplitude dispersion of nonlinear optics [90, 91], and thus the starting point is formally well-known. The nonlinearity entangles particles and thus potentially creates macroscopic superpositions.

In the setup, a Bose condensate of suitable atoms is created, and a photoassociation laser (coherent source of photons) is applied to it. Two atoms absorb a photon, resulting in a bounded molecule. Because the absorption of a photon brings more energy into the system of two atoms, the resulting molecular state is a rotationally and/or vibrationally excited molecular state that has tendency to decay. The decay channel is not necessarily back to the atomic condensate, but it is possible that atoms possess kinetic energy and leave the system. This feature is analysed in more detail in Section 4.3 – now it is enough to know that this is a problem that needs a solution. A general solution is that the excited molecular state is coupled with a more stable, lower energy state via a second laser. The energy level illustration of Fig. 3.3 clarifies the scheme. About the basic notation: let us denote the annihilation operators operating on the atomic condensate $|0\rangle$, the excited molecular condensate $|1\rangle$ and the stable molecular condensate $|2\rangle$ with a , b and g , and the interactions causing atom-molecule and molecule-molecule transitions with respective Rabi frequencies Ω_1 and Ω_2 . One- and two-photon detunings are Δ_0 and $\delta = \delta_0 - i\frac{1}{2}\Gamma$, where Γ is the decay factor of the excited molecular state. If

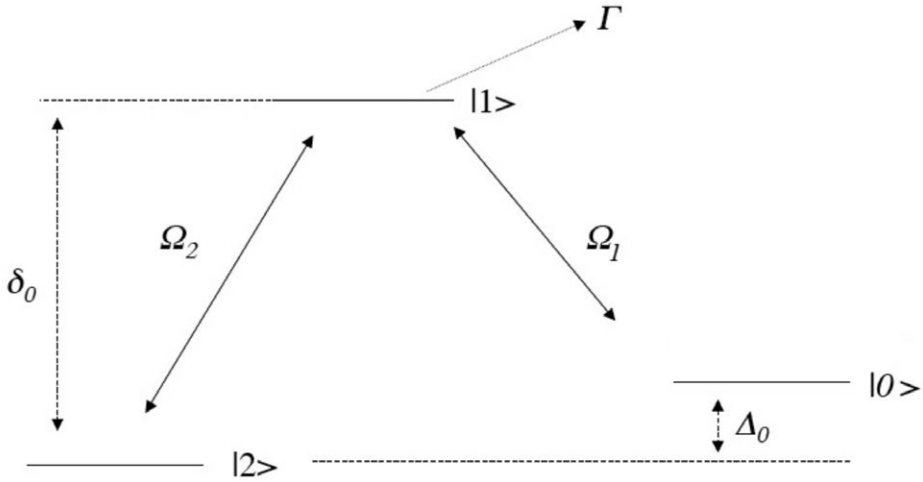


Figure 3.3: Energy level illustration of two-colour photoassociation. Initially N atoms are Bose-condensed into state $|0\rangle$. The first laser annihilates two atoms from the initial state and creates a molecule into an electronically excited state $|1\rangle$. Then, a laser that couples two bounded molecular states annihilates a molecule from the excited state and creates an electronically stable molecule in state $|2\rangle$. Free-bound, and bound-bound Rabi frequencies are Ω_1 and Ω_2 . The spontaneous decay factor of the electronically excited state is Γ , and two-photon detunings between states are δ_0 and Δ_0 .

$\delta_0 \gg \Gamma$, the time scale of population loss is slow compared with the time scale of population conversion, and while the population in the excited molecular state is as small as possible, in these suitable conditions the population loss can be neglected. Moreover, collisions between excited molecules and other particles can also be neglected for the same reason. Let us denote the remaining collision interactions by λ_{aa} (atom-atom), λ_{gg} (molecule-molecule) and λ_{ag} (atom-molecule). With this information, the Hamiltonian of the system in a rotating wave approximation can be written:

$$\begin{aligned} \frac{H_3}{\hbar} &= -\Delta_0 g^\dagger g + \delta b^\dagger b - \frac{1}{2} \left(\Omega_1 b^\dagger a a + h.c. \right) - \left(\Omega_2^* g^\dagger b + h.c. \right) \\ &+ 2\lambda_{ag} a^\dagger a g^\dagger g + \lambda_{gg} g^\dagger g^\dagger g g + \lambda_{aa} a^\dagger a^\dagger a a. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Because δ is assumed to be the greatest frequency, one can adiabatically eliminate the excited molecular state from the Heisenberg equations of motion

$$i\dot{a} = -|\Omega_1| e^{-i\phi_1} a^\dagger b + 2\lambda_{ag} a g^\dagger g + 2\lambda_{aa} a^\dagger a a, \quad (3.24)$$

$$i\dot{b} = \delta b - \frac{1}{2}|\Omega_1|e^{i\phi_1}aa - |\Omega_2|e^{i\phi_2}g, \quad (3.25)$$

$$i\dot{g} = -\Delta_0g - |\Omega_2|e^{-i\phi_2}b + 2\lambda_{ag}a^\dagger ag + 2\lambda_{gg}g^\dagger gg, \quad (3.26)$$

where $\Omega_j = |\Omega_j|e^{i\phi_j}$. Now, $\dot{b}/\delta \sim 0$, and thus $b = \frac{1}{2\delta}|\Omega_1|e^{i\phi_1}aa + |\Omega_2|e^{i\phi_2}g/\delta$. By denoting the relative phase of lasers with $\phi = \phi_2 - \phi_1$, and by writing $\chi = |\Omega_1||\Omega_2|/\delta$, and $\lambda'_{aa} = \lambda_{aa} - |\Omega_1|^2/4\delta$, and $\Delta = \Delta_0 + |\Omega_2|^2/\delta - 2\lambda'_{aa} + \lambda_{gg}$ and $\lambda = 2\lambda'_{aa} - \lambda_{ag}$, and by adding a term $\lambda'_{aa}(N - N^2)$ to the resulting equation and by setting $\lambda_{gg} - 4\lambda'_{aa} = 0$, one gets the two level Hamiltonian:

$$H_2 = -\Delta g^\dagger g - \frac{1}{2}\chi \left(e^{-i\phi} a^\dagger a^\dagger g + h.c. \right) - 2\lambda a^\dagger a g^\dagger g. \quad (3.27)$$

Here I do not find it necessary to present the derivation in detail, since the same model with a little more complicated add-on is presented later in Section 4.3.

Let us choose a pure atomic condensate as the initial state and divide the time evolution of the system into two phases so that at first the system is driven by strong photoassociation and weak collisions with parameter values

$$\Delta = 0, \quad (3.28)$$

$$\chi = 10\sqrt{N}\lambda, \quad (3.29)$$

$$\phi = \pi/2, \quad (3.30)$$

and after the moment t_1 the system is dominated by collisions instead of strong photoassociation:

$$\Delta = \sqrt{N}\chi = 0.1N\lambda, \quad (3.31)$$

$$\chi = 0.1\sqrt{N}\lambda, \quad (3.32)$$

$$\phi = 0. \quad (3.33)$$

It appears that the system is transferred into a macroscopic superposition of an atomic and a molecular condensate [88]. The moment t_1 is given by $N/4 = (N/2) \tanh^2(\sqrt{N}\chi t_1)$, that is familiar in the second harmonic generation of photons [92]. The time evolution of the density matrix is illustrated in Fig. 3.4. Interesting, I say, and I will study the phenomenon later with a more realistic first approximation model. A macroscopic superposition is a very sensitive coherence phenomenon. For how it behaves when it has an *environment*, see Section 4.3.

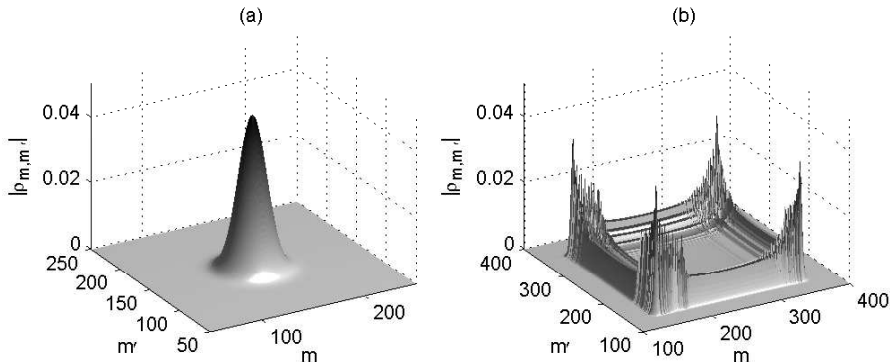


Figure 3.4: Time evolution of a density matrix (in a molecular basis) at instants (a) $\lambda t_1 = 8.6 \times 10^{-5}$, when the phase I ends, and (b) $\lambda t_2 = 1.0486 \times 10^{-2}$, when the superposition is formed. The number of particles in the simulation is $N = 1000$.

3.4 About the collective behaviour of degenerate fermion systems

It is generally thought that the collective phenomena presented in Section 3.2 (Rabi oscillations, adiabatic sweep of an atomic state into a molecular state) are results of Bose-Einstein statistics – so, more vividly, that bosons behave collectively and fermions are individualists. These phenomena are also referred to as coherent behaviour, i.e., it hints that they are coherence phenomena. But if they are coherence phenomena, then the issue behind the phenomena is not particle statistics (see e.g., Definition 25 and Chapter 5). Next, I consider the possibility for a degenerate fermion system to behave collectively. The introduction with bosons in Section 3.2 provides simple examples of collective behaviour and a good reference point to the results of fermion studies (in fact, for this reason I have used the particular parameter values e.g. in figures).

There has been experimental success in creating joint degenerate systems of bosons and fermions (e.g., [93, 94, 95]), and thus it is natural to consider whether or not it is possible (in theory) to produce degenerate fermion molecules by coupling an atomic state with a molecular state either via Feshbach resonance or via photoassociation resonance (Articles I and II, and Ref. [5]). Next I present a simple scheme to produce fermionic molecules. For simplicity, I use the rotating wave approximation in the momentum space. Because the time scale of collective association is much shorter than the kinetic time scale, in the theoretical study of first approximation, motion of particles in the trap (kinetic terms in Hamiltonian)

can be neglected. Moreover, for the boson system, only the condensate (state with $\mathbf{k} = 0$) is needed to take into account since, because of Bose stimulation⁵, the coupling with the condensate state is stronger than with bosonic states outside the condensate ($\mathbf{k} \neq 0$). Also, the Fermi energy of the system is assumed to be within the Wigner threshold, and thus the coupling between atomic and molecular states κ can be assumed to be the same for all modes \mathbf{k} .⁶ Now, like the two-level Hamiltonian of Eq. (3.18), the Hamiltonian for a Bose condensate and a degenerate fermion system is

$$\frac{H}{\hbar} = \sum_{\mathbf{k}} \left[\delta b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}} - \frac{1}{2} \kappa (b_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} c + c^{\dagger} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}}) \right], \quad (3.34)$$

where δ is the detuning between atomic and molecular states, κ is the coupling (for photo- and magnetoassociation the form of equation is the same), and annihilation operators are c that annihilates an atom of Bose condensate, and $a_{\mathbf{k}}$ ($b_{\mathbf{k}}$) that annihilates a fermionic atom (a fermionic molecule) with the wave vector \mathbf{k} .

The time scale of the model is seen from the Heisenberg equations of motion:

$$i\dot{c} = -\frac{1}{2}\kappa \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}}, \quad (3.35)$$

$$i\dot{b}_{\mathbf{k}} = -\delta b_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2}\kappa a_{\mathbf{k}}^{\dagger} c, \quad (3.36)$$

$$i\dot{a}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2}\kappa b_{\mathbf{k}} c. \quad (3.37)$$

Comparing the Heisenberg equations of motion (3.35–3.37) with the case of atomic and molecular condensate of Eqs. (3.19–3.20), one notices that the signs of fermionic terms have changed. This is a natural result of Fermi-Dirac statistics, i.e., there can only be one fermion in a single quantum state. Otherwise the equations are similar. The characteristic size of operator c operating on the condensate is $\sqrt{N_B}$. The initial amount of fermions N_F is seen in Eqs. (3.35–3.37) as the sum over fermionic states in the momentum space. If $N = N_F = N_B$, the characteristic frequency of (photo- or magneto-) association of the Bose condensate and degenerate fermionic atoms is $\Omega = \sqrt{N}\kappa$.

⁵Bose/Bosonic stimulation is coherent matter-wave amplification [96].

⁶Wigner threshold law states that the cross section depends only on the energy above the threshold [81, 97, 98], and thus here the threshold function for all cross sections of the final state is a step function. That means, when all energies are within the threshold energy, all states are in practice equally probable. The energy dependence of cross section begins to dominate above the threshold.

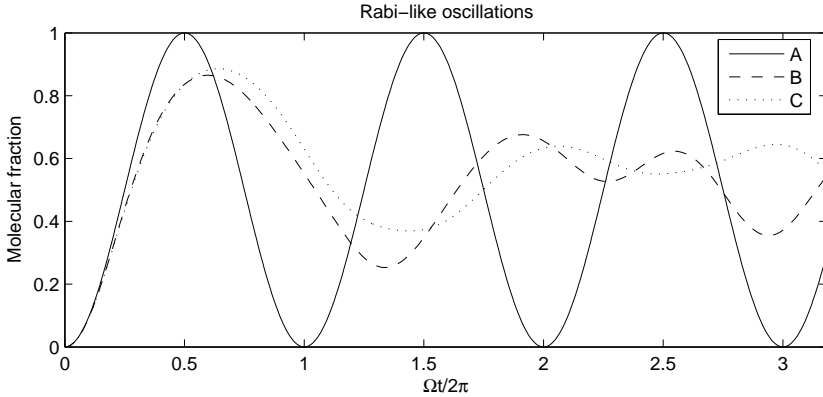


Figure 3.5: Rabi oscillations between a Bose condensate, degenerate fermion atoms and molecules. Initially the number of bosons and fermions is the same $N = N_F = N_B$. The detuning between molecular and atomic states is $\delta = 0$, and the coupling between the states is $\kappa = 1$. The unit of simulation time is expressed by the characteristic frequency $\Omega = \sqrt{N}\kappa$. (A): $N = 1$, (B): $N = 5$, and (C): $N = 10$. Note that oscillations are similar to the oscillations between atomic and molecular condensate states.

In the resonance case $\delta = 0$, the interaction between degenerate fermionic molecules, atoms and Bose condensate (Fig. 3.5) results in figures similar to the interaction between atomic and molecular condensates (Fig. 3.1). Compare also with more extensive results given in Ref. [68]. It appears that there exist Rabi-like oscillations even with degenerate fermions⁷. This demonstrates well that the collective behaviour of the system, generally associated with Bose-Einstein statistics, is not related to the statistics but degenerate systems generally do behave collectively. The only issue of Bose statistics here is that the degenerate bosonic system happens to be a condensate. Fermions cannot condense, but they can behave collectively.

Since there exist Rabi oscillations in the system of my example, it is natural to assume that the system can be transferred via adiabatic detuning sweep from atoms of the initial state into degenerate fermionic molecules. Fig. 3.6 indicates that it is possible (note the appearance of a similar pattern as in the adiabatic detuning sweep Figure 3.2 of Bose condensate). Collective association also works if the initial state is degenerate fermionic atoms and the final state bosonic molecules. This has been observed in practice (via magnetoassociation, e.g., [76, 77, 78,

⁷I will call them Rabi oscillations as well, since as far as I know, in the fundamental level, the definition of Rabi oscillations does not set requirements for the contents of oscillating system.

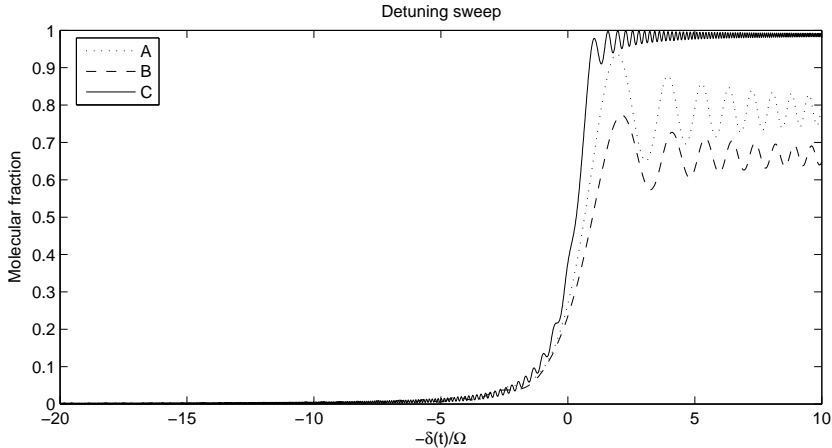


Figure 3.6: Molecular fraction of the total particle number while the detuning of atomic and molecular states is changed linearly and adiabatically in time $\delta(t) = -\xi\Omega^2t$. The number of bosonic and fermionic atoms is $N = N_F = N_B$. (A): $N = 1$, $\xi = 1$, (B): $N = 5$, $\xi = 1$ and (C): $N = 5$, $\xi = 0.1$. The unit of time is dimensionless change of detuning related to characteristic frequency, i.e., $-\delta(t)/\Omega$. If the adiabatic sweep is done slowly enough, almost all of atom population is transferred into molecules (C) despite the fact that the other part forming molecules is fermionic atoms.

99, 100]), and studied theoretically (e.g., [4]).

It is also possible to fine-tune the amount of atom-molecule conversion. This may enable a superconducting system in which there are Cooper pairs of different chemical entities (of fermionic atoms and molecules). Usually Cooper pairs are formed by similar entities. With current technical know-how it is possible to have the temperature of $T \sim 0.05T_F$ for the degenerate fermionic system [99, 100], but it is almost an order of magnitude too great for a superfluidity state (Article II). However, the experimental realisation of the superfluidity state may be more possible via a tight anharmonic trap or by as long a scattering length between fermionic atoms and molecules as possible (Article II). In any case, theoretical study is free from present experimental constraints, and (if the previously mentioned pointlike horse and the gallop race in the vacuum are assumed) the obligatory condition for creating the superfluidity state between fermionic atoms and molecules is that there is a suitable amount of fermionic atoms and molecules in the joint system. The idea is that fermionic atoms and molecules have the same wave number. The amount depends on system parameters, but it can be shown that by using fractional STIRAP [101, 102] one can get the desired amount of atoms con-

verted into fermionic molecules. I will present the model next, since it is a bit more complicated than previous models (Article II).

It is necessary to use two-colour photoassociation in modelling, i.e., the first laser (respective Rabi frequency Ω_+) couples the atomic state with the excited molecular state and the second laser (Ω_-) couples the excited molecular state with the stable molecular state. The detuning of the stable (excited) molecular state is Δ (δ) with respect to photoassociation threshold. It is also assumed that the kinetic time scale is long compared with the time scale of the phenomenon. Thus, the simplified Hamiltonian is

$$\begin{aligned} \frac{H_0}{\hbar} &= -\Delta \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}-}^\dagger a_{\mathbf{k}-} + (\delta - \Delta) \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}e}^\dagger a_{\mathbf{k}e} \\ &+ \lambda_{+-} \sum_{\{\mathbf{k}_i\}} a_{\mathbf{k}_1+}^\dagger a_{\mathbf{k}_2-}^\dagger a_{\mathbf{k}_3-} a_{\mathbf{k}_4+} \\ &+ \sum_{\sigma, \mathbf{k}} \lambda_{0,\sigma} a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger a_0^\dagger a_0 a_{\mathbf{k},\sigma} \end{aligned} \quad (3.38)$$

$$\frac{H_I}{\hbar} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left[(\Omega_+ a_{\mathbf{k}e}^\dagger a_{\mathbf{k}+} + \Omega_- a_{\mathbf{k}e}^\dagger a_{\mathbf{k}-}) + \text{h.c.} \right], \quad (3.39)$$

where the annihilation operator operating on the stable (excited) molecular state is $a_{\mathbf{k}-}$ ($a_{\mathbf{k}e}$), the annihilation operator of fermionic (bosonic) atom is $a_{\mathbf{k}+}$ (a_0), and the summation index is $\sigma = +, -, e, 0$. As the excited molecular state never has a significant population, it can be forgotten in collisions. Assuming intermediate resonance, the population loss via excited molecular state is modelled by setting $\delta = -\frac{1}{2}i\Gamma$. Without loss of generality, also $\Delta = 0$ can be chosen. Due to computational reasons, only simple collisions can be modelled, i.e., $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4$ so that $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_3$ and $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_4$. The coupling between states is changed by laser pulse profiles [102]:

$$\Omega_+(t) = \Omega_0 \sin \alpha \exp[-(t - \tau)^2/T^2], \quad (3.40)$$

$$\begin{aligned} \Omega_-(t) &= \Omega_0 \exp[-(t - \tau)^2/T^2] \\ &+ \Omega_0 \cos \alpha \exp[-(t - \tau)^2/T^2]. \end{aligned} \quad (3.41)$$

If there are, e.g., $N_B = 1.3 \times 10^6$ ^{87}Rb atoms in a trap, whose radial and axial angular frequencies are $\omega_r = 100 \times 2\pi$ Hz and $\omega_a = 10 \times 2\pi$ Hz (with density of $\rho_B = 5 \times 10^{20}$ m $^{-3}$), the peak value of atom-molecule coupling would be $\Omega_+ \sim \Omega_0 = 2\pi$ MHz, and the typical decay parameter of the excited molecular state is $\Gamma = 10 \times 2\pi$ MHz. There would be $N_F = 5 \times 10^3$ degenerate ^{40}K fermions in the same trap (with density

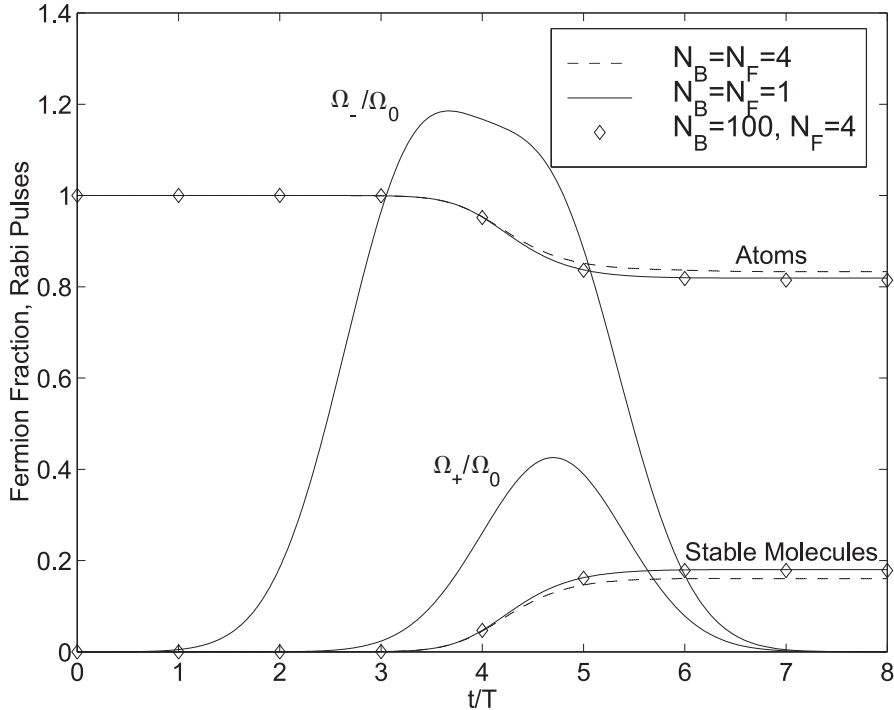


Figure 3.7: Creation of a desired atom-molecule fraction via fractional STIRAP. The unit of frequency is $\Omega_0 = 2\pi$ MHz = 1, and parameters of Raman pulses are $\alpha = 0.14\pi$, $T = 5 \times 10^3$ and $\tau = 0.7T$. There is no observed differences between cases $N_B = N_F = 1$, and $N_F = 4$ and $N_B = 100$, while the case $N_F = N_B = 4$ differs from the preceding and demonstrates that the few body effects limit the conversion efficiency.

of $1.1 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$), and thus the collision interaction between fermionic atoms and molecules would be $\lambda_{+-} = 5.81 \times 2\pi$ MHz (Article II).

As the simulation time scales as $\tau_{sim} \sim 16^{N_F}$, I am satisfied with fermion number $N_F = 4$, but the number of bosons does not affect the simulation time. Atom-molecule collisions do not contribute significantly to the results unless $\lambda_{+-}/\Omega_0 > 10^{-5}$, and thus the fractional STIRAP results in the desired atom-molecule fraction despite the collisions. The elementary results are shown in Fig. 3.7. In the case $N_F = N_B = 4$, the many body interactions dampen the molecular conversion (related to the desired conversion). This is not a result of Fermi-Dirac statistics, but it is a known phenomenon of one-colour photoassociation in Bose condensates [66, 68]. As for a mostly undepleted boson field, the system with particle numbers $N_F = 4$ and $N_B = 100$ reproduces the same result as the single particle case $N_F = N_B = 1$.

Chapter 4

Decoherence

In Section 2.3 I defined decoherence as a phenomenon that decreases quantum coherence. The definition is adequate and valid. But what is quantum coherence? In this chapter there is no need to analyse it in detail, since the focus is on the early steps of decoherence studies – questions and problems about the nature of quantum coherence are analysed in detail in Chapter 5, whose topic is coherence theory.

At first, the interest in decoherence studies was on open and infinite quantum systems in density matrix formalism, see e.g. Refs. [103, 104, 105, 106, 107], and references therein. The *whole system* is divided into the interesting *system* and less interesting *environment*, and then the time evolution equation for the system is calculated by reducing environmental degrees of freedom out of equations by calculating a partial trace over the environment. The resulting equation is known as the the master equation. Reducing environmental degrees of freedom out of equations is called *coarse-graining*, and it results in ununitary time evolution for the (interesting) subsystem.

The density matrix formalism is a friendly way to study quantum physics, because probabilities are on the diagonal of the density matrix, and off-diagonal elements describe how strongly quantum phenomena affect the dynamics of the system. If all nonzero elements of the density matrix are on the diagonal, then the system can be described with a version of classical mechanics in which true random processes are enabled. Generally, the decay of off-diagonal elements is called decoherence, and decoherence is the answer to the question why quantum dynamics (almost) produces a world that can be described with classical physics.

In early decoherence studies it was noticed that decoherence and the growth of entropy are dynamic phenomena that resemble each other very much (e.g. [104], Article IV). Thus it is understandable that problems

related to entropy a century ago arise again to haunt decoherence. This is studied in detail in Section 5.2. Often the decay of off-diagonal elements is monotonic and exponential, but these two features depend on the model. Monotonic decay is a result of openness and the infiniteness of the system. It was admitted quite early that, in principle, the universe is a closed system (e.g., [104, 105, 108, 109], article IV), and thus while the universe is studied as a whole, the dynamics is unitary and there is no decoherence. However, decoherence is an observed phenomenon in our universe [110, 111]. How do we study quantum cosmology? How should decoherence of closed systems be modelled?

The main lines in studying decoherence of closed systems are based on the decoherent histories approach [112, 113, 114, 115, 116] and the self-induced decoherence scheme [117, 118, 119, 120, 121]. In my decoherence study, I will apply neither of them but instead I will use density matrices as the base of my coherence theory. It is worth noticing that the concept of decoherence related to this approach is not equivalent with the decoherence of decoherent histories approach [113]. My choice is based on the facts that in quantum physics, the description founded on density matrices is a natural and fundamental form of description, and unlike the other approaches, it does not lead to contradictions. Thus, it is somewhat astonishing that so far it has not been a focus of studies of closed systems. I assume that extensively studied coherence theory within the density matrix formalism will clarify the concept of decoherence in closed systems.

The decoherent histories approach along with its problems is studied in Section 4.1, and the self-induced decoherence scheme in Section 4.2. In Section 4.3 the idealised strong coherence phenomenon presented in 3.3 is analysed in density matrix formalism with a simple realistic decoherent environment (an open and infinite system). Here (as in Articles III and IV, and later in Section 4.3) I stress that while open and infinite systems are not accurate descriptions of anything in physical reality (see Definition 4 and Section 5.1), they may be useful models if one keeps in mind their limits and weaknesses.

4.1 Many histories interpretation and its problems

The birth of many histories interpretation was initiated by discussions about the quantum physical measurement problem¹. The collapse of wave function was postulated in the Copenhagen interpretation of quantum physics (the collapse of wave function cannot be modelled by unitary dynamics), but it was reasonable to assume that the validity of quantum physics also holds for measurement apparatuses and humans interpreting the results given by measurement apparatuses, not only for the measured systems. The main idea of many worlds interpretation of quantum physics [128, 129, 130, 131, 132] is that "the formal theory is objectively continuous and causal, while subjectively discontinuous and probabilistic" [129]: p. 9. This formulation by Everett has been interpreted and modified in many different ways. One popular way is that reality consists of many parallel deterministic universes that do not interact with each other and in which all quantum possibilities exist as real [130, 131].

Despite the fact that the many worlds interpretation solves satisfactorily the measurement problem, it contains many problems related to the philosophy of science and even physics. The worst philosophical problem is that the many worlds interpretation does not seem to fulfill the requirements for a scientific theory – "theory" claims that there exist many parallel universes but they do not interact with each other. Applying Occam's principles results in the following: the burden of proof is on the one that claims existence – a supporter of many worlds interpretation should thus be able to prove their existence. As parallel universes cannot be observed (they do not interact with each other), Occam's razor suggests that

¹The measurement problem [1, 19, 22, 122, 123, 124, 125, 126] itself is an interesting and problematic research topic under quantum physics alone that I cannot cover in detail here. It is reasonable to think that measurement apparatuses and observers also obey the laws of quantum physics. Roughly, the measurement problem consists of three different questions that should be answered when everything (including measurement apparatuses and observers) are quantum physically modelled: (1) Why is it so that the measurement outcome of a superposition state is not a superposition of measurement outcomes [1, 122, 125], (2) Why does a measurement yield one definite measurement outcome [122, 123, 125], and (3) Why does a system behave differently with measurement than without it [22, 123, 124, 125]. Question (3) is related to the reduction postulate of a wave function, that is crystallised by the expression "Physics should also deal with what there *is* in situations in which no measurement is made" [22]. Schrödinger himself expressed a strong opinion against quantum leaps, saying that if they are to stay he is very sorry about being involved with quantum theory [127]: p. 57.

a scientific theory is much better and simpler without assuming them². I also mention the following physical problems: According to many worlds interpretation, every parallel universe is deterministic, but as shown before, there do exist true random processes in physical reality [42, 43, 44]. There is also interference, and interference is observed even in the behaviour of a single particle. Thus, David Deutsch, a staunch supporter of the many worlds theory, has added an extra assumption to his theory that claims that while parallel universes do not interact with each other, they can interfere with each other [131], and observed interference effects are explained by that when a particle is approaching a double-slit (or anything involving interference is occurring), in the vicinity of the double-slit there is a rush of particles because particles of all possible universes are approaching the slit, and they collide with each other and block paths and so on, thus resulting in the observed interference pattern. If this is the right description of the double-slit experiment, why on earth do we always happen to live in the universe where the interference pattern looks "right" – never ever in a universe where these blocking particles that enable the familiar interference pattern hit the film at places which traditionally are empty? Logically, the number of this type of universes is very large if the many worlds interpretation is valid. The third problem is related to decoherence: within many worlds interpretation, how is it possible to explain that a quantum physical system that initially behaves coherently slips little by little towards the statistical mixture. Problems related to interference and decoherence are due to the *preferred-basis problem* [108, 132], i.e., the (time) evolution of reality depends on which basis it is studied. This remarkable problem is studied in detail later with the problems of many histories interpretation.

Many histories interpretation of quantum physics is based on Everett theory. Feynman path integral formalism, in which every path can be interpreted as a history³, has also contributed to its development. According to the interpretation, there exists only one reality that has many histories. There are different versions of many histories interpretation, and the most significant can be categorised by (1) Griffiths [133], (2) Omnès [19, 134], and (3) Gell-Mann and Hartle [113, 135]. The first version was by Griffiths, Omnès used a logical approach according to which

²Deutsch's view that "The fruitfulness of the multiverse theory in contributing to the solution of long-standing philosophical problems is so great that it would be worth adopting even if there were no physical evidence for it at all" [131]: (p. 339) appears to be rather a religious than scientific view.

³Related to this, I have heard a joke where an electron replies to the question how it entered the room: "By the easiest way – from both door and window".

consistent histories produce a situation that can be described by classical logics, and the version by Gell-Mann and Hartle is a refined version of them.

The search for decoherence (and discovering it) was initiated because of the need to explain why the laws of quantum physics result in very classical-like observed reality. The idea of many histories interpretation is that the physical reality must be able to be described as a whole, including measurement apparatuses and observers. The *decoherent histories approach*⁴ was born as a symbiosis of them. It has acquired much fame in studying decoherence of closed quantum systems [112, 113, 114, 115, 116, 135]. Simply speaking, in the decoherent histories approach projections along histories produce effective coarse-graining, and thus decoherence.

Let α and α' be two possible histories. A possible history can be described with projection operators S by:

$$C_\alpha = S_{\alpha_n}^n(t_n) \otimes \dots \otimes S_{\alpha_2}^2(t_2) \otimes S_{\alpha_1}^1(t_1) \quad ; \quad S_{\alpha_i}^i(t_i) = |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| \delta_{t_i, t}, \quad (4.1)$$

where t_i is the time of measurement and α_i is a measurement outcome. At a certain fixed moment of time, propositions can be described by a set of projection operators $\{S_\alpha\}$. The propositions are mutually exclusive, and $\sum_\alpha S_\alpha = 1$. A projection operator is said to be *fine-grained*, if the set of states $\{|\alpha\rangle\}$ forms a complete set. Otherwise the projection operator is coarse-grained.

The decoherence functional D of a density matrix ρ is defined as:

$$D(\alpha, \alpha') = \text{Tr}(C_\alpha \rho C_{\alpha'}^\dagger). \quad (4.2)$$

The probability of a certain history is acquired from $P(\alpha) = D(\alpha, \alpha)$. Two histories are correlated if $D(\alpha, \alpha') \neq 0$. If histories α and α' are uncorrelated, the joint probability of histories is a sum of separated histories $P(\alpha \vee \alpha') \equiv \text{Tr}((C_\alpha + C_{\alpha'})\rho(C_\alpha + C_{\alpha'})^\dagger) = P(\alpha) + P(\alpha') = D(\alpha, \alpha) + D(\alpha', \alpha')$, where $C_{\{\alpha\}} = C_\alpha + C_{\alpha'}$ is a coarse-grained history. Despite the fact that the coarse-grained history $C_{\{\alpha\}}$ is a sum of projection chains, it is not necessarily a projection chain itself. Generally, a coarse-grained history $C_{\{\alpha\}}$ is a sum of histories. Vanishing of the real part of the decoherence functional of two histories is understood as weak decoherence, i.e.,

$$\text{Re}D(\{\alpha\}, \{\alpha'\})|_{\{\alpha\} \neq \{\alpha'\}} = 0. \quad (4.3)$$

It is a necessary and satisfactory condition for classically adding probabilities of histories. Medium decoherence is defined as

$$D(\{\alpha\}, \{\alpha'\})|_{\{\alpha\} \neq \{\alpha'\}} = 0. \quad (4.4)$$

⁴Griffiths denotes it as "consistent histories approach" [133].

In the many histories interpretation, decoherence is understood as a dynamical process that as an outcome produces the decay of the decoherence functional (or its real part) and its approach to zero. The conditions above are consistency conditions for histories. The reader who is more interested in many histories interpretation is encouraged to study Refs. [19, 112, 113, 114, 116] (with caution).

The well-known problems of decoherent histories approach are:

1. The concept of decoherence in the decoherent histories approach is not equivalent to (or derivable from) decoherence in the density matrix formalism [113].

This is a great problem (at least in my opinion) in the decoherent histories approach, because in the density matrix formalism, generally one does not need to make wild assumptions (or interpretations) of the metatheory of quantum physics before one can calculate what happens in the system. The many histories interpretation itself is an assumption that is made before performing the first calculations.

2. The decoherent histories approach violates one of the fundamental principles of quantum physics, according to which *in principle, the wave function (more precisely: the state vector) is the fundamental (complete) description of the physical system* (e.g., [22, 126]).

In the many-histories interpretation histories are not histories of wave functions, but histories of observables. The role of the wave function is to be a theoretical tool in constructing time evolution laws for observables with the help of probabilities of histories, and thus philosophically thinking, histories have the role of a more perfect and more fundamental description than the wave function. [126]

3. Preferred basis problem

In the decoherent histories approach, the effect of decoherence on the system depends on the chosen set of histories [136, 137]. The choice of set of histories is arbitrary, and it leads to contrary propositions [138]. Thus, in predicting or retrodicting something funny may happen: Let us consider a quantum physical system known as Earth (including the relevant part of cosmos that has had a significant effect on how the Earth has evolved in time). In the decoherent histories approach, e.g., starting with a state of the Earth at a moment of time of 100 million years ago, one may be lucky enough to choose the "right" set of consistent histories and thus produce the present state of the Earth. However, it is more probable that there

is not so much luck in choosing the set of histories, and thus in the present state of Earth there are pink carnivorous whales flying in the stratosphere at the top of food chain...

In Ref. [139] a peculiar feature of decoherent histories is presented: Let us assume a physical reality in which decoherent histories are valid. The objective properties of that physical reality are not objective at all, but depend on the chosen set (family) of histories!

In the real world physical phenomena do not depend on (human made) choice of sets of histories.

4.2 A self-induced decoherence scheme

In the self-induced decoherence scheme [117, 118, 119, 120, 121], decoherence is created within the undivided system – there is no need for an environment as the source of decoherence. The decoherence mechanism is based on the fact that in the continuous energy spectrum quantum correlations of expectation value $\langle M \rangle$ are proportional to an integral

$$\langle M \rangle \sim \int dE \int dE' M(E, E') \exp(-i(E - E')t/\hbar), \quad (4.5)$$

which, according to Riemann-Lebesgue theorem [140] vanishes if the integrand is L^1 integrable and $t \rightarrow \infty$ – thus resulting in the diagonalisation of expectation value. There are three crucial premises behind the reasoning [109]:

1. A continuous energy spectrum.

A continuous energy spectrum means that the system is assumed to be infinite.

2. The coefficients of the operator M in energy eigenbasis are integrable functions of energy.

For finite systems (discrete energy spectrum) this condition naturally fails.

3. The time scale is infinite.

As analysed in Ref. [109], for finite systems in long (but finite) time the diagonalisation does not occur. However, the criticism against the self-induced decoherence scheme presented in [109] partially misses the target, since it is based on an open and finite system analysis that differs fundamentally from a closed and infinite system, as demonstrated in

Section 5.1. Still, the initial stage of definition of coherence in the self-induced decoherence scheme lacks generality since it is applicable only to infinite systems.

4.3 Decoherence in an open system: the effect of "rogue decoherence" in the formation of a macroscopic superposition between atomic and molecular condensate states

The possibility of macroscopic pure coherence phenomena in a decoherent environment is interesting. At least some kind of many-body coherence phenomena are possible in physical reality since they have been observed – examples are given in Section 3. But how about a macroscopic, entangled superposition state? Assumably, it is more sensitive to the effects of the environment than an almost coherently oscillating condensate. In Section 3.3 I shortly introduced a theoretical possibility for creating a macroscopic superposition between atomic and molecular condensates. In this section "rogue decoherence"⁵ caused by a realistic environment is added to the previous idealistic model. The example is based on Article III. The questions are: what kind of effects and with what kind of conditions does decoherence have on the macroscopic superposition of the example? And, what is the environment?⁶ This case-study is performed by using ⁸⁷Rb atoms as an example, like in Ref. [88] and in Article III.

In photoassociation, a laser associates two zero-momentum ($\mathbf{k} = 0$) condensate atoms of the state $|0\rangle$ into a molecule of an excited molecular state $|1\rangle$. A second laser couples the excited molecular condensate state with a stable molecular condensate state $|2\rangle$. The annihilation operators of the atomic condensate, the excited molecular condensate and the stable molecular condensate are denoted by $a_0 \equiv a$, b and g . It is not necessary for a molecule in the state $|1\rangle$ to dissociate back to the atomic condensate $|0\rangle$ – it may also dissociate into two atoms which have the opposite momentum $\pm\mathbf{k}$, i.e., to dissociate into state $|\mathbf{K}\rangle \equiv |\mathbf{k}, -\mathbf{k}\rangle$.

⁵Named after rogue photodissociation [75, 83, 88, 141, 142]. Population losses of atom-molecule condensate system have also been studied in Refs. [84, 85, 142].

⁶In Ref. [143] a similar kind of research is introduced, except that the molecular condensate is produced by magnetoassociation via Feshbach resonance, and decoherence is caused by interactions between an electromagnetic vacuum and atomic states.

These states are the environment of the study – let the annihilation operators acting on environmental states be denoted with $a_{\mathbf{k}}$ ($a_0 \equiv a$ is the atomic condensate). The interactions that cause atom-molecule and molecule-molecule transitions are characterised by their respective Rabi frequencies $\Omega_{\mathbf{k}} = \Omega_1 f_{\mathbf{k}}$ and Ω_2 , where $f_{\mathbf{k}}$ express the dependence of the atom-molecule coupling on the wave-vector \mathbf{k} . The one- and two-photon detunings are Δ_0 and $\delta = \delta_0 - i\frac{1}{2}\Gamma$, where Γ is the spontaneous decay rate of the excited molecular state. The scheme is illustrated in Fig. 4.1. Collisions between particles are assumed to be s-wave scattering. The number of particles on the excited molecular state is small if large detunings between states are assumed. Thus, collisions with particles on the excited molecular state can be neglected, and the same holds for collisions with noncondensate particles. The remaining collision interactions are denoted with λ_{aa} , λ_{gg} , and λ_{ag} . The Hamilton operator of the system in the rotating wave approximation is

$$\begin{aligned} \frac{H_3}{\hbar} &= -\Delta_0 g^\dagger g + \delta b^\dagger b + \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_k a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left(\Omega_1 f_{\mathbf{k}} b^\dagger a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} + h.c. \right) - \left(\Omega_2^* g^\dagger b + h.c. \right) \\ &\quad + 2\lambda_{ag} a^\dagger a g^\dagger g + \lambda_{gg} g^\dagger g^\dagger g g + \lambda_{aa} a^\dagger a^\dagger a a. \end{aligned} \quad (4.6)$$

For simplicity, let us write $f_0 = f_0^* = 1$, $\Omega_j = |\Omega_j| e^{i\phi_j}$ and $f_{\mathbf{k}} = f_{\mathbf{k}}^*$. Also, particles are assumed to be free, so that $\epsilon_k = \hbar k^2/m$, where m is the mass of atom. For simplicity, the atomic condensate modes $a_0 \equiv a$ are written explicitly.

By applying Heisenberg equations of motion

$$i\dot{a} = -|\Omega_1| e^{-i\phi_1} a^\dagger b + 2\lambda_{ag} a g^\dagger g + 2\lambda_{aa} a^\dagger a a, \quad (4.7)$$

$$i\dot{a}_{\mathbf{k}} = \epsilon_k a_{\mathbf{k}} - \frac{1}{2} |\Omega_1| e^{-i\phi_1} f_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^\dagger b, \quad (4.8)$$

$$i\dot{b} = \delta b - \frac{1}{2} |\Omega_1| e^{i\phi_1} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} - |\Omega_2| e^{i\phi_2} g, \quad (4.9)$$

$$i\dot{g} = -\Delta_0 g - |\Omega_2| e^{-i\phi_2} b + 2\lambda_{ag} a^\dagger a g + 2\lambda_{gg} g^\dagger g g \quad (4.10)$$

given by the Hamiltonian of Eq. (4.6) one can develop an effective description and reduce the number of degrees of freedom of the system by adiabatically eliminating the excited molecular state from Eq. (4.6). This happens by assuming that δ is the largest frequency in the problem, and therefore $\dot{b}/\delta \sim 0$. Thus,

$$b = \frac{|\Omega_1| e^{i\phi_1}}{2\delta} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} + \frac{|\Omega_2| e^{i\phi_2}}{\delta} g. \quad (4.11)$$

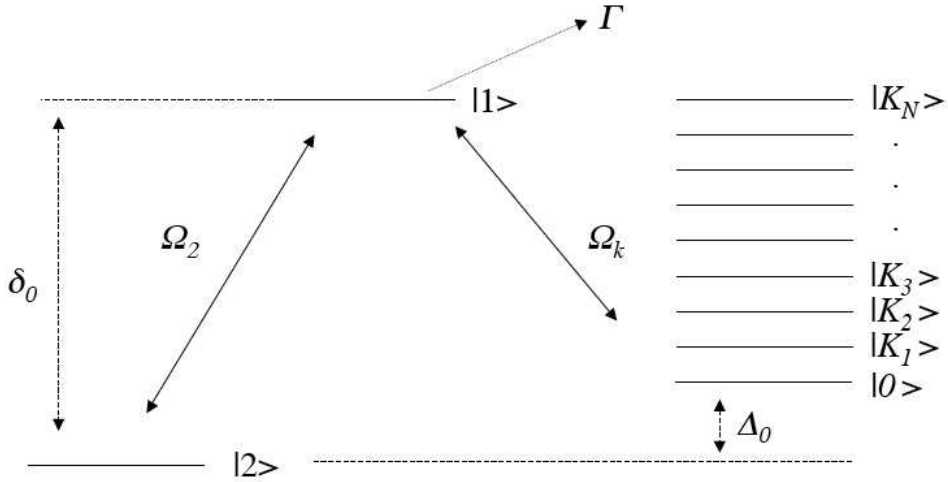


Figure 4.1: Energy-level illustration of two colour photoassociation. Initially, N atoms are in the Bose-condensed state $|0\rangle$. The first laser then removes two atoms from this state and creates an electronically excited molecule in the state $|1\rangle$. The laser that couples two bound molecular states removes an excited molecule from the state $|1\rangle$, and creates an electronically stable molecule in state $|2\rangle$. The quasicontinuum of N_{qc} noncondensate dissociation modes is also shown, where a pair of atoms with momentum $\pm\hbar\mathbf{k}$ and energy $\hbar\epsilon_k = \hbar^2k^2/2m$ are occupying the state $|\mathbf{K}\rangle \equiv |\mathbf{k}, -\mathbf{k}\rangle$. The free-bound and bound-bound Rabi frequencies are $\Omega_k = \Omega_1 f_{\mathbf{k}}$ and Ω_2 , where f_k is the energy dependence of the free-bound coupling. The spontaneous decay rate of the electronically excited molecular state is Γ and detunings between states are δ_0 and Δ_0 .

Inserting this into the three-level Hamiltonian of Eq. (4.6) produces an effectively two-level Hamiltonian. The equations can be further simplified by denoting the relative phase of the lasers with $\phi = \phi_2 - \phi_1$ and by writing $\chi = |\Omega_1| |\Omega_2| / \delta$. This yields

$$\begin{aligned}
\frac{H_2}{\hbar} &= -\Delta' g^\dagger g + \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{2} \Delta_0 + \epsilon_k \right) a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \\
&\quad - \frac{\chi}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left(e^{i\phi} g^\dagger f_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} + \text{h.c.} \right) \\
&\quad + 2\lambda_{ag} a^\dagger a g^\dagger g + \lambda'_{aa} a^\dagger a^\dagger a a + \lambda_{gg} g^\dagger g^\dagger g g, \quad (4.12)
\end{aligned}$$

where $\Delta' = \Delta_0 + |\Omega_2|^2 / \delta$ and $\lambda'_{aa} = \lambda_{aa} - |\Omega_1|^2 / 4\delta$. The result is a Hamiltonian of exactly the same form as for one-colour transitions, but the two-photon Rabi frequency has replaced the one-photon Rabi frequency Ω_1 .

Next, I derive the master equation [144, 145, 146, 147] for the stable molecular condensate, applying the same ideas as in Ref. [141]. Using the interaction picture, the problem is solved to the second order in perturbation theory. Taking the atom-molecule condensate as the system and the noncondensate modes as the environment, the Hamiltonian of Eq. (4.12) can be written as

$$\frac{H_2}{\hbar} = \frac{H_S}{\hbar} + \frac{H_R}{\hbar} - \left(\frac{\chi}{2} e^{i\phi} g^\dagger \sum_{\mathbf{k} \neq 0} f_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} + h.c. \right). \quad (4.13)$$

The dynamics is not altered if, for calculational reasons, the constant of motion $\lambda'_{aa}(N - N^2)$ is added to H_2 . Thus (while $H_S = H_0 + H_I$),

$$\frac{H_0}{\hbar} = -\Delta g^\dagger g, \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned} \frac{H_I}{\hbar} = & -\frac{1}{2}\chi \left(e^{-i\phi} a^\dagger a^\dagger g + e^{i\phi} g^\dagger a a \right) \\ & -2\lambda g^\dagger a^\dagger g a + (\lambda_{gg} - 4\lambda'_{aa}) g^\dagger g g^\dagger g, \end{aligned} \quad (4.15)$$

$$\frac{H_R}{\hbar} = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \epsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}, \quad (4.16)$$

where $\Delta = \Delta' - 2\lambda'_{aa} + \lambda_{gg}$, and $\lambda = 2\lambda'_{aa} - \lambda_{ag}$. Then the Born approximation is applied and the master equation of the system is calculated in the interaction picture. Initially the system $|n_m\rangle|n_a\rangle$ and the environment $\prod_{\mathbf{k} \neq 0} |l_a\rangle_{\mathbf{k}}$ are not correlated, so $\rho_{tot} = \rho_s \otimes \rho_e$. The equation of motion of the complete description density matrix in the interaction picture is

$$\dot{\rho}_{tot} = -\frac{i}{\hbar} [H_{int}, \rho_{tot}]. \quad (4.17)$$

Integration, performing the trace over environment and neglecting terms higher than second order results in

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_s &= -\frac{i}{\hbar} \text{Tr}_e [H_{int}(t), \rho_s(0) \otimes \rho_e] \\ &- \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt_1 \text{Tr}_e [H_{int}(t), [H_{int}(t_1), \rho_s(0) \otimes \rho_e]] \\ &= \dot{U}_1(t) + \dot{U}_2(t). \end{aligned} \quad (4.18)$$

In the interaction picture, Hamiltonian of Eq. (4.13) is

$$H_{int} = -\hbar (A^\dagger \Gamma + \Gamma^\dagger A), \quad (4.19)$$

where the shorthand notations

$$\Gamma = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} f_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} e^{-i(\epsilon_{\mathbf{k}} - \Delta)t}, \quad (4.20)$$

$$A = \frac{\chi}{2} e^{-i\phi} g \quad (4.21)$$

are used. Tracing of Eq. (4.18) results in

$$\dot{U}_1(t) = i \left(\langle \Gamma(t) \rangle [A^\dagger, \rho_s(0)] + \langle \Gamma^\dagger(t) \rangle [A, \rho_s(0)] \right) \quad (4.22)$$

as the first order term, and the second order term is

$$\begin{aligned} \dot{U}_2(t) = & - \int_0^t dt_1 \left(\langle \Gamma(t) \Gamma(t_1) \rangle [A^\dagger, [A^\dagger, \rho_s(0)]] + \langle \Gamma^\dagger(t) \Gamma(t_1) \rangle [A, [A^\dagger, \rho_s(0)]] \right) \\ & + \langle \Gamma(t) \Gamma^\dagger(t_1) \rangle [A^\dagger, [A, \rho_s(0)]] + \langle \Gamma^\dagger(t) \Gamma^\dagger(t_1) \rangle [A, [A, \rho_s(0)]] \right). \quad (4.23) \end{aligned}$$

The following six integrals should be calculated:

$$I_1 = \langle \Gamma(t) \rangle, \quad (4.24)$$

$$I_2 = \langle \Gamma^\dagger(t) \rangle = I_1^*, \quad (4.25)$$

$$I_3 = \int_0^t dt_1 \langle \Gamma(t) \Gamma(t_1) \rangle, \quad (4.26)$$

$$I_4 = \int_0^t dt_1 \langle \Gamma^\dagger(t) \Gamma^\dagger(t_1) \rangle, \quad (4.27)$$

$$I_5 = \int_0^t dt_1 \langle \Gamma^\dagger(t) \Gamma(t_1) \rangle, \quad (4.28)$$

$$I_6 = \int_0^t dt_1 \langle \Gamma(t) \Gamma^\dagger(t_1) \rangle. \quad (4.29)$$

The integrals

$$I_1 = I_2 = I_3 = I_4 = 0, \quad (4.30)$$

because for a normal thermalised uncorrelated heat bath the correlation function $\langle a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} \rangle$ is zero. Correlated environments have been studied elsewhere, e.g., in Ref. [141]. In the first approximation, it is reasonable to assume the environment to be an uncorrelated heat bath, since it is the thermal cloud around condensates. However, real thermal clouds around the condensates most likely possess nontrivial correlations. The energy and the number of particles in the thermal cloud are assumed to be at least nearly constants in time, as well as the number of particles in the condensates. Therefore, the nonzero correlations have the form of

$$\langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} a_{-\mathbf{k}'} \rangle = 4\pi n_k^2 \delta_{k,k'}. \quad (4.31)$$

Let us calculate, say, I_5 :

$$\begin{aligned}
I_5 &= \int_0^t dt_1 \langle \Gamma^\dagger(t) \Gamma(t_1) \rangle \\
&= \int_0^t dt_1 \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} f_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}'} 4\pi n_{\mathbf{k}}^2 \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i(\epsilon_{\mathbf{k}} - \Delta)t} e^{-i(\epsilon_{\mathbf{k}'} - \Delta)t_1} \\
&= 4\pi \int_0^t dt_1 \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}^2 n_{\mathbf{k}}^2 e^{i(\epsilon_{\mathbf{k}} - \Delta)(t - t_1)}. \tag{4.32}
\end{aligned}$$

The sum can be converted into an integral by assuming that the maximum momentum is very large, i.e., infinite. The approximation will, however, yield consequences that are not present in the original setup (maximum momentum very large but finite), e.g., irreversible dynamics. That means monotonic decay of coherence. Philosophical and physical issues of transforming sums into integrals are analysed in detail in Section 5.1. If one wants to take the trap into account, one should include the density of the states of the trap in the conversion process. For simplicity, I have assumed that the particles are in a free space, because in the first approximation, I want to keep the system as simple as possible, but without forgetting anything evident. Neglecting the trap can be justified by the fact that the assumed decoherence time scale is much shorter than the time scales of the trap.

The integral in frequency representation $k = \sqrt{m\epsilon/\hbar}$, $d\epsilon = (2\hbar/m)kdk$ is

$$I_5 = \frac{m^{3/2}V}{\pi\hbar^{3/2}} \int_0^t dt_1 \int_0^\infty d\epsilon \sqrt{\epsilon} f^2(\epsilon) n^2(\epsilon) e^{i(\epsilon - \Delta)(t - t_1)}. \tag{4.33}$$

The Markov approximation is assumed to be valid, i.e., Δ is large enough and $\sqrt{\epsilon} f^2(\epsilon) n^2(\epsilon)$ is a slowly varying function in the vicinity of $\epsilon = \Delta$, and thus the correlation time scale is so short that it is possible to set $t \rightarrow \infty$ in the integral I_5 . The conditions are met by $\hbar\Delta \sim kT$. This leads to the principal value integral

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t e^{i(\epsilon - \Delta)(t - t_1)} = \pi \delta(\epsilon - \Delta) + i \frac{PV}{\Delta - \epsilon}. \tag{4.34}$$

Thus,

$$I_5 = \frac{m^{3/2}V}{\hbar^{3/2}} \sqrt{\Delta} f^2(\Delta) n^2(\Delta) + i\Delta_*, \tag{4.35}$$

where

$$\Delta_* = \frac{Vm^{3/2}}{\pi\hbar^{3/2}} PV \int_0^\infty d\epsilon \frac{\sqrt{\epsilon}}{\epsilon - \Delta} f^2(\epsilon) e^{i(\epsilon - \Delta)(t - t_1)} n^2(\epsilon). \tag{4.36}$$

Technically the term Δ_* is related to the Lamb shift, but it appears every time one connects a bound state to a continuum. This has been investigated in theory [148, 149] and experiment [150, 151, 152]. I assume that the shift can be neglected in this study – in practice it could be included in the detuning Δ . I_6 is solved similarly:

$$I_6 = \frac{m^{3/2}V}{\hbar^{3/2}} \sqrt{\Delta} f^2(\Delta) [n(\Delta) + 1]^2. \quad (4.37)$$

The master equation in the interaction picture is thus

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{int} &= -I_5 [A, [A^\dagger, \rho]] - I_6 [A^\dagger, [A, \rho]] \\ &= (I_5 + I_6)(A\rho A^\dagger + A^\dagger \rho A - AA^\dagger \rho - \rho A^\dagger A), \end{aligned}$$

and the corresponding master equation in the Schrödinger picture is

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_s &= -\frac{i}{\hbar} [H_0 + H_I, \rho_s] + \dot{\rho}_{int} \\ &= \frac{i}{\hbar} \left[\Delta(g^\dagger g \rho - \rho g^\dagger g) + \frac{1}{2} \chi e^{-i\phi} (a^\dagger a^\dagger g \rho - \rho a^\dagger a^\dagger g) + \frac{1}{2} \chi e^{i\phi} (g^\dagger a a \rho - \rho g^\dagger a a) \right. \\ &\quad \left. - (\lambda_{gg} - 4\lambda'_{aa})(g^\dagger g g^\dagger g \rho - \rho g^\dagger g g^\dagger g) + 2\lambda(g^\dagger a^\dagger g a \rho - \rho g^\dagger a^\dagger g a) \right] \\ &\quad + (I_5 + I_6)(A\rho A^\dagger + A^\dagger \rho A - AA^\dagger \rho - \rho A^\dagger A), \end{aligned} \quad (4.38)$$

where H_I is treated as a perturbation.

The aim is to study decoherence induced by "rogue dissociation". It is important to note that it is disputed whether strong two-colour photoassociation of a Bose-Einstein condensate is even possible [153]. Assumably it is and, moreover, it is possible to target electronic ground state levels that are sufficiently low lying to allow neglect of vibrational-relaxation losses [154].

The simulations consist of two phases. First, a particular joint-atom molecule condensate is created in the regime where photoassociation is much stronger than collisions (phase *I*). Then, the photoassociation intensity is reduced and the joint atom-molecule condensate evolves under the dominant collisional interaction into a macroscopic atom-molecule superposition (phase *II*).

A proper phase *I* joint atom-molecule condensate is given by parameter values [88]:

$$\Delta = 0, \quad (4.39)$$

$$\chi = 10\sqrt{N}\lambda, \quad (4.40)$$

$$\phi = \pi/2. \quad (4.41)$$

Proper means that the probability amplitude of the joint atom-molecule condensate is real [88], and thus the relative phase $\phi = \pi/2$ is chosen. The duration of the strong two-photon-resonant photoassociation pulse is τ , which can be obtained from the solution of the semiclassical approximation for the molecules [88]: $N/4 = (N/2) \tanh^2(\sqrt{N}\chi\tau)$ which is a result borrowed from the theory of second-harmonic-generated photons [92]. The condition $\Delta = 0$ means that the system is on a Stark-shifted resonance and the Markov approximation becomes dubious. On resonance, the interaction strength compared to the evolution time scale increases and it is expected that decoherence will take a more dominant role. Thus, large enough two-photon detuning must be used, $\hbar\Delta > kT$, in order to avoid the resonance and to fulfill the requirements of the Markov approximation⁷. $\Delta = 0.1N\lambda$ is enough for the density $\rho = 1.88 \times 10^{19}\text{m}^{-3}$. It is important to note that the value of Δ affects balancing superposition peaks and thus the time τ when the phase I ends.

The second phase is dominated by collisions:

$$\Delta = \sqrt{N}\chi = 0.1N\lambda, \quad (4.42)$$

$$\chi = 0.1\sqrt{N}\lambda, \quad (4.43)$$

$$\phi = 0. \quad (4.44)$$

The collision interactions are

$$\lambda_{aa} = \frac{4\pi\hbar a_{aa}}{mV}, \quad (4.45)$$

$$\lambda_{ag} = \frac{3\pi\hbar a_{ag}}{mV}, \quad (4.46)$$

$$\lambda_{gg} = \frac{2\pi\hbar a_{gg}}{mV}, \quad (4.47)$$

where the atom-atom scattering length is $a_{aa} = 5.4 \text{ nm}$ [155, 156], the atom-molecule scattering length is $a_{ag} = -9.346 \text{ nm}$ [155, 156], the unknown molecule-molecule scattering length is approximated as $a_{gg} = a_{aa}$, the mass of a ^{87}Rb atom is $m = 1.443 \times 10^{-25} \text{ kg}$, and V is the quantisation volume that depends on the context (e.g., cubic box, spherical cavity, or harmonic trap). By optically tuning the atom-atom scattering

⁷One should note that the parameter value $\Delta = 0$ in Ref. [88] does not imply that it is small compared with other parameter values. The only requirement that the value of Δ must fulfill is that it obeys Markov approximation. It fixes the ratio of T/ρ , since as stated later $\lambda = (\rho/N) \times 7.67715 \times 10^{-17} \text{ Hz}$, where $[\rho] \equiv \text{m}^{-3}$. To keep the problem simple and general, it is therefore easiest to choose that $\Delta \sim N$, and give the value of Δ in units of λ . Thus by choosing $\Delta = xN\lambda$, the Markov condition is $x\hbar/k \times 7.67715 \times 10^{-17} \text{ Hz} > T/\rho$.

length [148, 149, 157, 158, 159, 160], it is possible to reduce the number of parameters by setting $\lambda_{gg} - 4\lambda'_{aa} = 0$, which means that $a'_{aa} = a_{gg}/8$. The effects of the decay term $\Gamma = 12 \times 2\pi$ MHz [156] should be negligible if $|\delta| \gg \Gamma$, and thus $|\delta| \sim 10^3 \times 2\pi$ MHz is chosen. By this detuning (and by barring an anomalously large molecule-molecule scattering length), the light-induced scattering length shift should be possible. With the given value of λ'_{aa} , the collisional interaction strength is $\lambda = (\rho/N) \times 7.67715 \times 10^{-17}$ Hz, where $[\rho] \equiv \text{m}^{-3}$. Also, as a first order approximation a flat coupling profile $f(\Delta) = 1$ between condensate molecules and noncondensate modes is assumed.

The calculations are performed in the molecular number basis $\rho = |m\rangle\langle m'|$, where m and m' are the molecule numbers and N is the total number of particles. Hence, the coupled equations to solve are

$$\begin{aligned}
\dot{\rho}_{m,m'} = & \rho_{m,m'} \{ i\Delta(m-m') + i2\lambda[(N-2m)m - (N-2m')m'] \\
& - \frac{\chi^2}{4}(I_5 + I_6)m' \} & ; \forall m, m' \\
& - \rho_{m,m'} \frac{\chi^2}{4}(I_5 + I_6)(m+1) & ; m < N/2 \\
& + \rho_{m-1,m'} \frac{i\chi}{2} e^{-i\phi} \sqrt{(N-2m+1)(N-2m+2)m} & ; m > 0 \\
& - \rho_{m,m'+1} \frac{i\chi}{2} e^{-i\phi} \sqrt{(N-2m')(N-2m'-1)(m'+1)} & ; m' < N/2 \\
& + \rho_{m+1,m'} \frac{i\chi}{2} e^{i\phi} \sqrt{(N-2m)(N-2m-1)(m+1)} & ; m < N/2 \\
& - \rho_{m,m'-1} \frac{i\chi}{2} e^{i\phi} \sqrt{(N-2m'+1)(N-2m'+2)m'} & ; m' > 0 \\
& + \rho_{m-1,m'-1} \frac{\chi^2}{4}(I_5 + I_6) \sqrt{mm'} & ; m, m' > 0 \\
& + \rho_{m+1,m'+1} \frac{\chi^2}{4}(I_5 + I_6) \sqrt{(m+1)(m'+1)}. & ; m, m' < N/2
\end{aligned} \tag{4.48}$$

The conditions to calculate a matrix element $\dot{\rho}_{m,m'}$ are explicitly expressed after a semicolon at the end of the line in Eq. (4.48). If the condition is not met, then the contribution of that part of equation is zero. Equations of motion (4.48) behave well at the thermodynamical limit $V \rightarrow \infty$, because, typically for photoassociation, $\chi \sim 1/\sqrt{V}$ [66, 75], $I_5 + I_6 \sim V$ and $\rho_{m,m'} \sim 1/N$.

The common decay profile of coherence has the form of e^{-t/τ_d} , which defines the decoherence time τ_d [104, 105]. Phase *I* follows this usual behavior, and has the decoherence time

$$\tau_{d,\text{off}} = \frac{4}{\chi^2(I_5 + I_6)} = \frac{4\hbar^{3/2}\rho}{m^{3/2}\chi^2\sqrt{\Delta}N(2n^2 + 2n + 1)}, \tag{4.49}$$

where N is the total particle number and $n = 1/[\exp(\hbar\Delta/kT) - 1]$ is the number of noncondensate particles. Since photoassociation is dominant in phase *I*, the decoherence time scale must be compared to the photoassociation time scale $\tau_{pa} = (\sqrt{N}\chi)^{-1}$. The strength of decoherence is

described by

$$\xi_{d,I} = \frac{\tau_d}{\tau_{pa}} = \frac{2.712057 \times 10^{10}}{\sqrt{\rho[\text{m}^3]}(2n^2 + 2n + 1)}, \quad (4.50)$$

where the detuning $\Delta = 0.1N\lambda$ is used. In most simulations a small but realistic temperature $T = 10^{-9}\text{K}$ is used, and thus the Markov approximation requires $\Delta > 131\text{Hz}$. The nonzero detuning, compared with resonance, in the phase I does not contribute much to the moment τ , when phase I ends. A more accurate time estimate is given by the semiclassical approximation $N/4 = (N/2) \tanh^2(\sqrt{N}\chi\tau)$ with the generalised Rabi frequency $\chi_{gen} = \sqrt{N\chi^2 + \Delta^2} = N\lambda\sqrt{100 + 0.01}$ [79], but using it is not mandatory – instead, one can optimise the distance of atom-molecule superposition peaks by varying parameters. The optimal superposition size with probability peaks of equal heights as possible emerges if the phase I ends at the moment τ , when $\text{Tr}\rho g^\dagger g \sim 0.296N/2$. The endpoint is very sensitive – the accuracy in molecular fraction should be $\sim \pm 0.001$ in order to get equally sized peaks. The moment τ also depends on the particle number. The previously mentioned criterion is valid for $N = 1000$.

Phase II follows a similar behaviour, having formally the same decoherence time as in Eq. (4.49) for phase I . Since collisions are the dominant interaction now, the decoherence time scale is compared with collisional time scale $\tau_c \sim (2N\lambda)^{-1}$. Thus, the strength of decoherence is given by

$$\xi_{d,II} = \frac{\tau_d}{\tau_c} = \frac{2.408246 \times 10^{10}}{\sqrt{\rho[\text{m}^3]}(2n^2 + 2n + 1)}. \quad (4.51)$$

If phase I results in suitable initial conditions to produce an atom-molecule superposition, in phase II collisions create correlations that result in the desired superposition state. The decay of correlations is due to decoherence. If the decoherence time scale is shorter than photoassociation time scale in phase I and collision time scale in phase II , there is no macroscopic superposition. The constraint to the superposition is $\xi_{d,II} \gg 1$.

Due to limited computational resources, only four relevant scenarios with $N = 1000$ particles are considered. In scenario A there is no decoherence present, i.e., $\xi_{d,I} = \xi_{d,II} \approx \infty$. In scenario B , the parameter values $\rho = 1.88 \times 10^{19} \text{m}^{-3}$ and $T = 10^{-9} \text{K}$ result in moderate decoherence, i.e., $\xi_{d,I} = 3.44$ and $\xi_{d,II} = 3.05$. The scenario C is the borderline scenario with $\xi_{d,I} = \xi_{d,II} = 1$. Corresponding temperatures and densities can be calculated from the decoherence conditions of Eqs. (4.50) and (4.51). In scenario D the temperature $T = 10^{-10} \text{K}$ and the density $\rho = 1.88 \times 10^{18} \text{m}^{-3}$ are assumed, and thus $\xi_{d,I} = 10.88$ and $\xi_{d,II} = 9.65$. The most important results are illustrated in Figs. 4.2–4.4. In Fig. 4.2

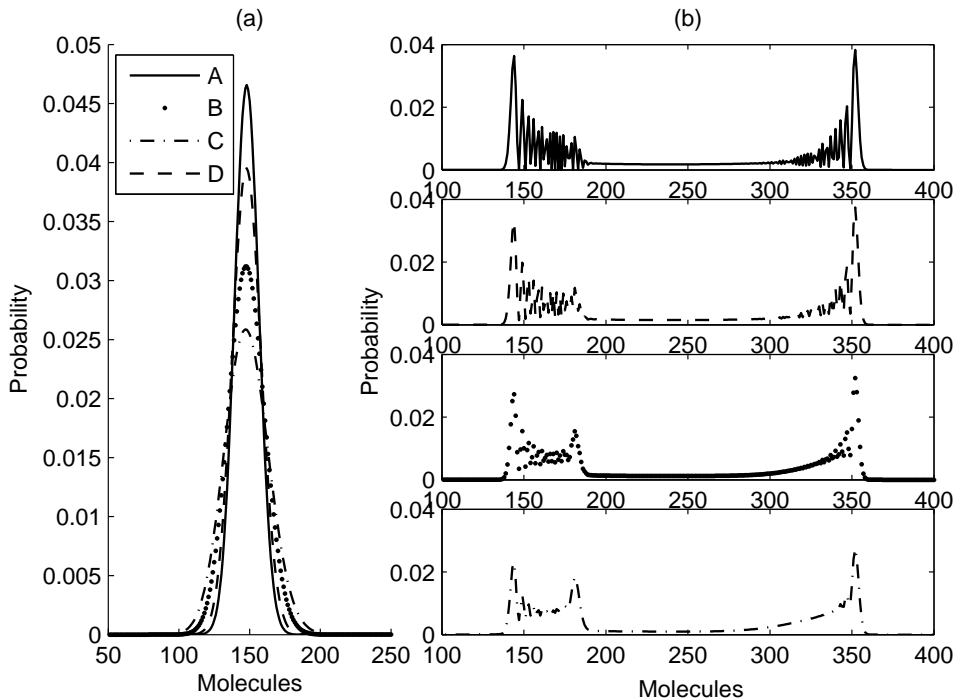


Figure 4.2: The probability distributions of scenarios *A* (no decoherence), *B* (moderate decoherence), *C* (strong decoherence) and *D* (weak decoherence) at a moment (a) $\lambda t_1 = 8.6 \times 10^{-5}$ (when phase *I* ends) and (b) $\lambda t_2 = 1.0486 \times 10^{-2}$, when the superposition peaks emerge. Decoherence affects the probability distributions so that stronger decoherence makes the probability peaks lower and wider.

probability distributions of all scenarios are presented at two moments of time. At the first instant (t_1), phase *I* ends and a joint-atom molecule condensate with a real probability amplitude is created. It serves the most ideal initial conditions to create a macroscopic superposition in phase *II*. At the second instant (t_2) superposition peaks should emerge. In Figure 4.3 there are the density matrices of all scenarios at the instant t_1 , and in Fig. 4.4 the density matrices of all scenarios at the instant t_2 .

If decoherence is strong enough, the quantum correlations are damped out and sharp peaks in probability distributions smoothen. Decoherence seems to be considerable also in the regime of moderate decoherence $1 < \xi_d < 6$ to hinder the creation of a macroscopic superposition. Strong decoherence effects $\xi_d < 1$ are faster and stronger. In order to get a macroscopic superposition with the given setup, system parameters should be safely in the regime of weak decoherence, i.e., $\xi_d > 10$.

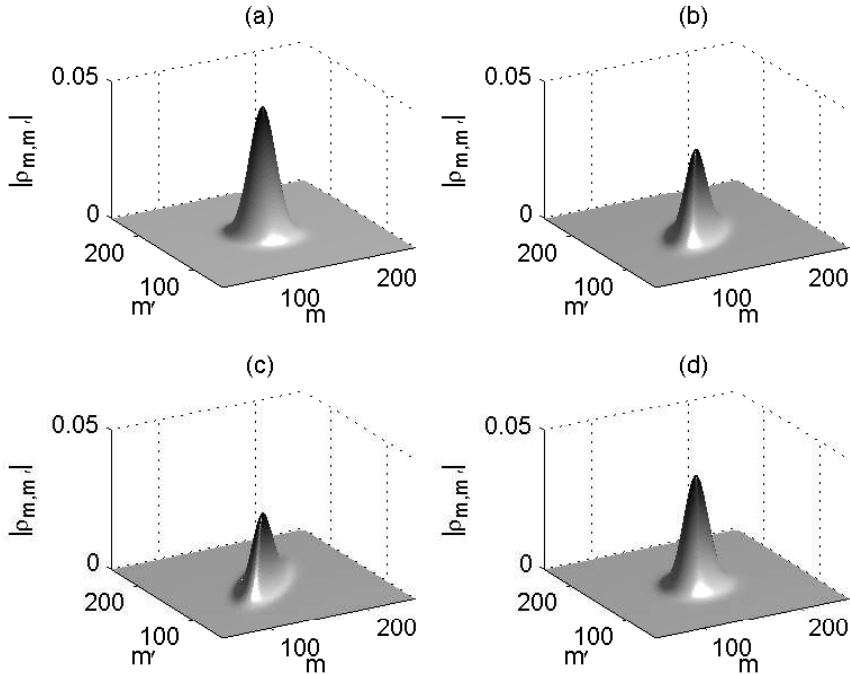


Figure 4.3: The density matrices of scenarios A [(a) no decoherence], B [(b) moderate decoherence], C [(c) strong decoherence] and D [(d) weak decoherence] at the end of phase I . Decoherence effects are clearly visible in scenarios B and C , as the decay of off-diagonal elements has resulted in an ellipsoid-Gaussian wave packet.

However, this is not possible with present experimental technology. Current condensate temperature record using evaporative cooling is around $T = 5 \times 10^{-10}\text{K}$ for sodium [161]. Another possibility is to enter the non-Markovian regime, which could considerably improve the ξ_d at least in phase I . However, the non-Markovian regime is only a speculation, since it cannot be reliably modelled with my model, and it will be studied elsewhere. Also, it is possible to manipulate either the environment or the interaction between condensates and degrees of freedom outside the condensate. Symmetrisation of the environment used in Ref. [162] to diminish decoherence effects would be a hard, maybe impossible, task to apply for atom-molecule superposition due to the inherent nonlinearity of the interactions. However, creating a special correlated environment might help since an uncorrelated heat bath is quite a harsh environment for coherence phenomena.

I should explicitly mention here that the presented theoretical setup

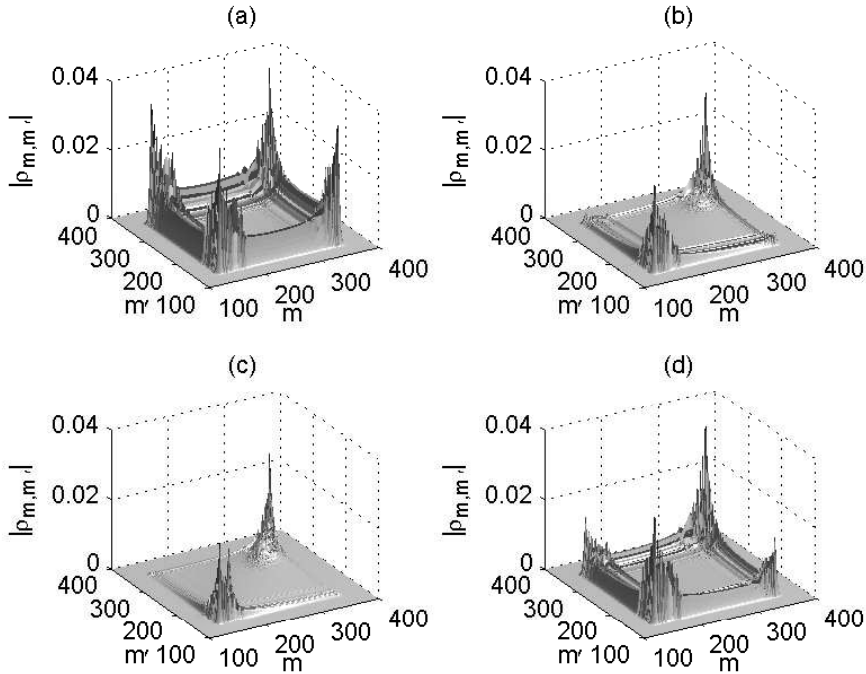


Figure 4.4: The density matrices of scenarios *A* [(a) no decoherence], *B* [(b) moderate decoherence], *C* [(c) strong decoherence] and *D* [(d) weak decoherence] at the moment t_2 , when a macroscopic superposition state should emerge. Only a small fraction of quantum correlations (off-diagonal elements) have survived from decoherence, even in the scenario *D*, that has extreme parameter values $T = 10^{-10}\text{K}$ and $\rho = 10^{18}\text{m}^{-3}$.

for the experiment is not indeed an exact description of a possible real physical experimental setup. In order to allow calculability, approximations have been made in constructing the model, and these approximations may – after more thorough analysis and/or with better understanding about physical reality – appear more or less unphysical. However, the approximations are never made to allow longer life to the macroscopic superposition in the model than in the reality. The model rather results in the upper limit for the strength of rogue decoherence. The most evident deviations of the model from physical reality occur in modelling the environment and the coupling. A real condensate is created by cooling a gas of bosonic atoms. Atoms condensing on the zero momentum state form the condensate and the rest of the atoms in the trap form the thermal cloud. Thus, it is quite obvious that in the physical reality there are correlations between the condensate and the noncondensate particles, the

thermal cloud is not an uncorrelated heat bath, and the particles in the thermal cloud are not free but trapped. Because the number of atoms in a thermal cloud is modest and there is practically not even (truly) nearly infinite number of noncondensate modes, approximating the sum in the correlation function calculations with an integral is a gross overestimation. The assumption that the condensate is initially not correlated with the thermal cloud is needed for tracing out the environment.

Special correlated environments, traps and finite number of noncondensate modes are accessible and more physical descriptions, as well as to assume a nonflat – maybe a Gaussian or Lorentzian – coupling profile between the molecular condensate and the thermal cloud. The Markov approximation is often used in physical modelling and it is valid in the model because only parameter space within the approximation is considered. Thus, it does not make the model more unphysical, but restricts the study to quite a small parameter space. With a non-Markovian model, a more favorable parameter space for macroscopic superpositions may be found.

So, what can one learn from this all? At least that rogue decoherence is a significant source of decoherence in Bose condensates, and hence in studying coherence phenomena (in condensates) one should not completely forget it, despite the fact that its modelling is not the simplest thing to do. Moreover, in wondering about the strength of decoherence, the decoherence time scale should be compared with the most dominant interaction time scale. The introduced parameter ξ_d is handy for this.

Chapter 5

General coherence theory

Coherence is often handled only qualitatively, and it is understood via phenomenological auxiliary concepts like decoherence time and coherence length.¹ Coherence itself is addressed with uncertainty – it appears that nobody knows what coherence really is and whether it is possible to quantify uniquely. It is even not clear whether coherence is a measure or not. There is no reason for the present situation, since the existent mathematico-logical machinery and knowledge of physics is all that is needed for more systematic and axiomatic grasp on coherence. A good start for the analysis is the basic problem of all quantitative problems, i.e., "how much coherence does the system under consideration have". This question must have an objective answer, since as explained in Section 2.1, the physical reality is consistent.

In a scientific dictionary, coherence is defined as "the existence of a correlation between the phases of two or more waves, so that interference effects may be produced between them, or of a correlation between the phases of part of a single wave" and "property of moving in unison" [38]: Coherence. The amount of coherence of waves depends on how correlated they are – how close the wave lengths, phases and amplitudes are to each other. Thus, coherence can generally be defined as "correlation of wave-like entities" (Definition 25)², that enables interference. In quantum physics, objects are generally described using wave functions or state vectors, which are "wave-like entities". Thus, quantum coherence could be understood as a "measure of the strength of quantum correlations" (Definition 26), and quantum coherence phenomena cannot be explained by classical correlations. It is proven that entanglement and superposition

¹Updated information about how coherence is presently understood via phenomenological auxiliary concepts is found in, e.g., Ref. [163].

²The numbered definitions refer to the definitions presented in Section 2.3.

states in general can produce observable non-classical correlations [51]. Within the density matrix formalism, the fingerprints of quantum correlations are the off-diagonal elements of the density matrix. (The reader should notice that in this study the word "coherence" mostly refers to the quantum coherence, unless the context imply otherwise.)

The basic quantification problem of coherence in quantum physics is related to the density matrix of the system, since the density matrix contains the most perfect possible information about the state of the system. Let us consider the density matrix ρ_A of a closed system that is expressed with a basis vector set $A = \{|\alpha_i\rangle\}$, $i = 1 \dots N$. The basis vector set spans a N -dimensional Hilbert space H , that, in effect, forms boundaries to the closed system of the example. An equivalent description of the system can be given with an arbitrary basis set $B = \{|\beta_i\rangle\}$ if the basis set spans the same Hilbert space H . The choice of the basis vector set should not affect the (physical) properties or the dynamics of the system in any way, because otherwise physical reality would be inconsistent and it would contain many nasty real paradoxes – I remind the reader of the pink carnivorous whales flying in stratosphere (see Section 4.1).

The definition often used for decoherence (and implicitly the definition of coherence) arises from the decay of off-diagonal elements of the density matrix [104, 105, 164], which is used in defining the decoherence time τ_d . The term "quantum coherence" often refers to these off-diagonal elements of the density matrix. Let us assume that "coherence" would refer to these off-diagonal elements of the density matrix ρ_A in a basis set A . With a suitable unitary transform any (finite) density matrix can be diagonalised, and let the basis B be that basis in which the density matrix ρ_B is diagonalised. Why would the basis A be "better" in describing the same system than the basis B ? This is a well-known problem in decoherence studies (a variant of the preferred basis problem explained in Section 4.1), and as a solution, the concept of *pointer basis* was invented. Pointer basis is the basis in which the dynamics of the system diagonalises the (reduced) density matrix of the system [104, 105, 165, 166]. But, the pointer basis is a meaningful concept only for reduced density matrices – although it does not even then solve the preferred basis problem; the value of coherence still depend on the chosen basis set in which the system is examined. The value of coherence would change in changing the basis vector set. On the other hand, it would be peculiar if the *present* amount of coherence of a certain quantum system depended on the possible *future* dynamics of the system.

According to my previous reasoning, *coherence* should be defined so that it does not depend on the chosen basis set. Thus, the coherence

of a closed system must be a conserved quantity. In principle, the same conclusion can be drawn from Noether's principle (see Definition 13) – the conservation law of coherence is a result of a particular symmetry of the system. The best "guess" for that symmetry is *the invariance of the density matrix under the change of the basis vector set*. A reasonable definition of coherence should fulfill at least these principles.

My definition of coherence and its analysis is presented in Articles IV and [2]. The quantitative form of coherence Ξ of the density matrix ρ is derived by the following reasoning: The density matrix of a totally coherent system of N possible states described with basis set $A = \{|\alpha_i\rangle\}$, $i = 1 \dots N$ is

$$\rho_A = \begin{pmatrix} \frac{1}{N} & \frac{1}{N} & \cdots & \frac{1}{N} \\ \frac{1}{N} & \frac{1}{N} & \cdots & \frac{1}{N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{N} & \frac{1}{N} & \cdots & \frac{1}{N} \end{pmatrix}. \quad (5.1)$$

The density matrix also has the description

$$\rho_B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

in the eigenvalue basis $B = \{|\beta_i\rangle\}$ that is always diagonal. The transformation between basis sets is obtained by unitary transformation U so that $\rho_B = U\rho_A U^{-1}$. According to the previous reasoning, these density matrices should contain the same amount of coherence. And, because quantum correlations cannot be explained by classical correlations, they should be measurable, at least in the idealistic sense. The totally classical density matrix

$$\rho_C = \begin{pmatrix} \frac{1}{N} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{N} \end{pmatrix} = \mathbb{1}_{N \times N} \frac{1}{N} \quad (5.3)$$

is diagonal in any basis.

Let us consider the following measurement scheme: an observable O can be measured in any basis. The probability to observe the fact $|O\rangle$ is

$$\text{Prob}(\rho, O) = \text{Tr}(\rho O) = \text{Tr}(\rho |O\rangle\langle O|). \quad (5.4)$$

While measuring the density matrix ρ_A , the probability $\text{Prob}(\rho_A, O)$ is maximised iff $|O\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} (1 \cdots 1)_A^T$, and thus $\text{Prob}(\rho_A, O) = \frac{1}{N} \sum_{i,j}^N \rho_{i,j} = 1$. For the totally classical density matrix ρ_C the probability for the same measurement outcome is $\text{Prob}(\rho_C, O) = \frac{1}{N} \sum_{i,j}^N \rho_{i,j} = \frac{1}{N}$. The maximum quantum correlations are causing a $1 - N^{-1}$ increase in the probability of the measurement outcome. If the measurement would be performed in the eigenvalue basis, the measured state would be $|O'\rangle = U|O\rangle = (1 \ 0 \cdots 0)_B^T$. The eigenvalue basis is useful, since the maximum eigenvalue λ_{max} is the probability for a state of the measurement outcome to be in its most probable state when the measurement basis is chosen to yield maximum probability. Thus, I define the coherence of the density matrix ρ by

$$\Xi(\rho) = \frac{N}{N-1} \left(\lambda_{max} - \frac{1}{N} \right), \quad (5.5)$$

where N is the dimension of the density matrix ρ . Subtraction of the term $1/N$, which represents the classical probability, is a background correction that sets the minimum coherence to zero. The prefactor $N/(N-1)$ normalises the maximum coherence to 1 – since coherence of a pure state is equal to the probability of the system to be in that pure state. The coherence defined in Eq. (5.5) is easily proven to be independent of the choice of the basis vector set, since it depends only on the dimension N and the maximum eigenvalue λ_{max} of the density matrix ρ . Entropy (von Neumann statistical entropy) obeys the same general principles as coherence. However, to define decoherence via entropy is problematic. Entropy is analysed in Section 5.2.

5.1 About coherence dynamics

The following thought experiments illustrate well the basic principles of coherence dynamics.

In the first thought experiment, a system obeying laws of classical physics, say 10^9 longcase pendulum clocks that do not interact with each other is studied. They are similar to each other except that their periods are random, due to random effective lengths of their pendulums. At an instant of time t_0 the system is in initial state in which the phase of all pendulums is the same, i.e., the pendulums are at the lowest possible point and swinging leftwards. Classically thinking, this initial setting is very coherent concerning the phases of pendulums. After a short time, at the moment t_1 the phase coherence is totally lost. However, at the moment t_P the phase coherence has revived: all pendulums are at the lowest possible point and swinging leftwards – since the number of pendulums is finite and

they all have fixed periods. The recurrence time t_P is known as *Poincaré recurrence time*, and it is the longest possible time scale in (any) finite system. In an infinite time, a finite system recurs arbitrarily close to its initial state (or any state) arbitrarily many times [147, 167].

Another thought experiment is about a simple quantum physical system: a Gaussian wave packet is trapped in an anharmonic potential $U(r) = \frac{1}{2}m\omega^2(r - r_0)^2 + \eta(r - r_0)^3$ that has small anharmonicity η . At first, the wave packet oscillates preserving the form and shape in the potential, i.e., it behaves coherently (see e.g., Ref. [168]: p. 376-377, and references therein). After some time the wave packet has lost its form and shape, i.e., has lost its coherence. However, after a very long time the wave packet reforms again to the Gaussian shape if the system consists of a finite amount of bound states. A good indicator of coherence is the time evolution of the expectation value of position $\langle x(t) \rangle$. The strong oscillations of the expectation value of the position that are present initially, dampen as the system evolves in time, resulting in a fluctuating mean that after a very long time will regroup again into strong oscillations.

My third example concerns interacting bosons in a (second quantised) photon field (or in general, bosons that collide with another type of bosons that form the environment). The "system" (interesting bosons) is studied, and therefore an effective theory is made that reduces the environment away from the complete description density matrix, which results in the master equation for the density matrix of the system. This textbook example can be found, e.g., in Refs. [144]: Chapter 15; [145]: Chapter 6.1; [146]: Chapter 1; [147]: Chapter 3.3. At the initial stages of the analysis the boson field is treated to have a finite (but large) number of degrees of freedom, but when correlation functions for the environmental effect are calculated, the number of degrees of freedom of the boson field is assumed to be infinite (justified by the fact that it is very large compared to the number of degrees of freedom of the system), so that the sums can be converted to calculable integrals. These kinds of environments are accepted sources of decoherence in theoretical studies (see e.g., Section 4.3 and Article III) – and the monotonic decay of coherence can be quantified by using decoherence time.

In all three examples the concept *coherence* (classical or quantum) is essential and suitable in describing the behaviour of the system, but the concept *decoherence* is commonly associated only with situations like the third example because there is a net loss of coherence out of the system. The fundamental difference between the systems of the first two examples and the last one is that the system of the last example is an *open* and *infinite system*. The net loss of coherence requires both openness and

infiniteness of the system – openness because an environment is needed for dumping the coherence, and infiniteness because from a finite environment all coherence will eventually come back to the system as the Poincaré recurrence time is finite. Thus, the observed net loss of coherence in some open quantum system studies is a result of an approximation that assumes infinity because of the need for calculating easier integrals instead of difficult (maybe impossible) sums. It is an approximation that changes the fundamental behaviour of the system – it results in a monotonic decay of coherence (with no revivals). If the example was studied with more detail without assuming the continuous energy spectrum of the photon field, Poincaré recurrences would happen in finite time. The irreversible dynamics is a result of assuming infinity. Usually, at the fundamental level, approximations neither increase accuracy nor enlarge the area of application.

The longcase pendulum clock example can be used to demonstrate the difference between a finite closed system and an infinite closed system. If the number of clocks is increased, Poincaré recurrence time either increases or remains the same. There is no increase of recurrence time if the period of the added clock multiplied by an integer is the period of the existing clock system. If the periods are random real numbers (it does not matter if the interval is fixed), for infinite number of clocks the Poincaré recurrence time is infinite – i.e., there is no recurrence. Even if the system is closed, the decay of phase coherence is monotonic. If one considers the second example system with infinite setting, this feature is even more dramatic: the system is closed, so that there is no net loss of coherence out of the system, i.e., total coherence of the whole system is a constant. Infiniteness causes that there are no Poincaré recurrences, because the initially very narrowly concentrated finite amount of coherence spreads evenly to infinitely small amounts of correlations between all the infinite states – and it never finds its way back.

While making thought experiments and models of physical reality, it is important to realise what are fundamental features of physical reality. In considering coherence dynamics, the evident questions are: is physical reality infinite or finite, and is physical reality open or closed. According to Definition 4, physical reality is closed. Moreover, it is reasonable to assume that infiniteness is only an approximation – a mathematical trick that is made by frustrated human intelligence in order to cope with problems of large numbers. From a physical viewpoint it is reasonable to assume that there do not exist infinitely large or small entities. At least, according to the present physical theories, the length scale is bounded

below by Planck length scale. Energy spectrums are discrete and finite³. The hydrogen atom, for example, has mathematically infinite energy spectrum, but physically due to the Heisenberg uncertainty the amount of energy levels is finite; two mathematically consecutive energy levels cannot physically have energy differences smaller than the uncertainty in energy. The energy spectrum of the fields in physical reality is not continuous due to the second quantisation. These examples can be seen as a realisation of the Bekenstein bound [48, 49, 50] that prohibits a finite volume to possess infinitely of information. According to Seth Lloyd the universe has performed so far 10^{120} elementary logic operations to 10^{120} bits that also includes gravitational degrees of freedom. The result could be interpreted so that a quantum computer needs that much capacity to simulate the entire universe. The capacity needed is finite. There are even more arguments for finiteness of physical reality⁴ but there is no need to analyse them in more detail in this study. The debate about finiteness or infiniteness of physical reality shall continue, but at least I am more convinced about the finiteness, and that the infinity is only a mathematical tool that eases many calculus-technical problems.

While closed and finite systems differ fundamentally from open and infinite systems, it appears that the concept of *decoherence* is an accurate description for what happened in these thought experiments. Generally in infinite systems decoherence (within the density matrix formalism) is identified with *the decay of off-diagonal elements of the reduced density matrix*. I am convinced that the identification is as valid even *before* the system has been approximated by any methods, e.g., by changing sums to integrals via assuming infinity. Infinity has only resulted in the absence of recoherence. The general habit to think that there is no decoherence if the system may experience recoherence (e.g. [164, 172]) is peculiar.

By my analysis here the given definition of decoherence (Definition

³A continuous (infinite) energy spectrum would mean that a finite volume contains an infinite amount of energy and thus information – violating the Bekenstein bound.

⁴According to the Casimir effect [170, 171] virtual particles cause "pressure". In a limited volume only such virtual particles may appear whose matter-wave length is the distance between the boundaries divided by an integer. This causes an attractive force between two parallel metal plates – there are more degrees of freedom outside the plates than between them. If the physical reality was infinite, then there would exist an infinite amount of degrees of freedom, and thus the attractive force between the plates would be infinitely strong. However, as in many problems related to infinity in quantum fields, in this case theory and calculations are made via assuming the infinity, and then "talking" away the unrealistic effects caused by infinity. This is done with a suitable renormalisation (e.g., ζ -function renormalisation) or including into the integrals a "convergence factor" that typically decays exponentially in approaching infinity.

27) that refers to a *dynamical phenomenon that decreases coherence* is valid. The word "decoherence" does not even suggest that the reduction of coherence should be permanent. Finite systems may experience both decoherence and recoherence. Recoherence (Definition 28) is a *dynamical phenomenon that increases coherence*. One should be cautious with metaphysical claims concerning physical reality – some predictions of a theory (e.g., monotonic decay of coherence and monotonic increase of entropy) do not necessarily describe physical reality, but only describe the properties of some approximations made while constructing the model of physical reality.

In general case, an accurate description of coherence dynamics of a certain subsystem $\rho_s(t)$ is given by the coherence function $\Xi(\rho_s(t))$.

5.2 Entropy

Problems concerning coherence are similar to those related to entropy – closed and finite systems (of the scale of the universe) caused problems a long time ago, much before quantum physics. At the end of the 19th century entropy was on the focus of "cosmological" problems. Since entropy and coherence have much in common, this section along with its subsections serves as a brief introduction to entropy, its problems, and how entropy and coherence are related and what can be learned from the suggested solutions to entropy problems. A reader interested in detailed entropy discussion is encouraged to study Refs. [35, 45, 173, 174, 175, 176], and references therein. The most important original articles translated in English can be found in Ref. [177].

5.2.1 A brief introduction to the nature of entropy

Entropy is, by Definition 29, an *extensive measure of the number of possible states and corresponding probabilities*⁵. Generally, entropy is associated with being a measure of chaos and disorder. Thermodynamically, entropy is defined as an *extensive measure that appears when heat differential is transformed into exact differential by using temperature as an integrating factor*. Extensive means that if the system A has entropy S_A and system B has entropy S_B , then the joint system $A + B$ has entropy $S_{A+B} = S_A + S_B$. Entropy is also often thought to be a measure that describes how far a system is from its most probable configuration, when

⁵"extensive measure depending on the number of possible (micro)states and corresponding probabilities" (Article IV)

the most probable configuration yields the maximum entropy. This can be demonstrated via an example of coin-tossing: from 10 tosses, it is more probable to get 5 heads and 5 tails than 9 heads and 1 tails. The former result has greater entropy. In statistical mechanics, entropy is understood as "a measure of the number of microstates a system could assume" [178].

There are various different types of entropy. Boltzmann entropy depends only on the number of possible states, and it has the form of $S_B = k_B \ln W$, where k_B is Boltzmann constant and W is the number of independent possible states. Thus, it is the entropy given by the definition of statistical thermodynamics for entropy. In quantum physics, W is the dimension of the Hilbert space of the system. The probabilities of microstates are used as weights in Gibbs entropy $S_G = -\sum_i^D p_i \ln p_i$, where p_i is the probability of i^{th} possible state. Gibbs and Boltzmann entropies coincide when the weights are $p_i \sim D^{-1}$, which yields the maximum value of Gibbs entropy. Gibbsian entropy is often titled *statistical entropy*, as well as its quantum equivalent, *von Neumann entropy* ($S_N = -\text{Tr} \rho \ln \rho$, where ρ is the density matrix of the system). A system with maximum von Neumann entropy does not possess any quantum correlations. Like my definition of coherence, von Neumann entropy is independent of the basis vector set in which the system is described.

Information is a measure that is defined with the help of entropy.

5.2.2 A brief history of the problems with entropy

Let us consider a universe that is a closed and finite chamber that contains a finite amount of "billiard balls", and that the most fundamental theory of physics is Newtonian mechanics. This is the basic setup for the entropy discussions about a century ago. Two premises according to the best possible physical knowledge are:

1. The second "law" of thermodynamics states that the entropy of a closed system cannot decrease.
2. Newtonian mechanics is valid (and it is a reversible theory).

Premises 1 and 2 are contradictory. For example, the initial state of the universe can be prepared so that the chamber is fictionally divided into two equally sized halves, and all the billiard balls are in the other half of the chamber. The state evolves in time in such a way that the billiard balls expand freely to the whole volume, and in this process entropy is increasing. The growth of entropy signals that the process is irreversible. A fundamentally reversible theory has caused an irreversible outcome.

Interesting. More interesting, common life experiences suggest that some processes are indeed irreversible: people grow older, the tea in the cup gets cold, windows will break etc. – observing the reversible counterpart of these examples would cause much wondering. The topic is covered in great detail in the literature about entropy and philosophy of physics, e.g., Refs. [35, 45, 173, 174, 175, 176, 177].

Let us consider the hidden assumptions of Premise 1 since the Newtonian mechanics is assumed to be the fundamental theory. Premise 1 is a direct result of Boltzmann H theorem, so that Premise 1 states that "according to Boltzmann H theorem, the time evolution of entropy is irreversible". In deriving Boltzmann H theorem, *Stosszahl Ansatz* (molecular chaos) is assumed (see e.g., [35, 45, 173, 175]). It means that the collision probability is directly proportional to the product of the particle densities in a phase-space element. Generally, assuming the *Stosszahl Ansatz* is valid in the thermodynamical limit (the particle number and the volume are infinite, but the density is finite), but a lot of information about the dynamics of the system is discarded in assuming it. The loss of information about the exact dynamics causes irreversibility. Even Boltzmann himself noticed the problem, discarded the *Stosszahl Ansatz* as a fundamental principle, and made two observations about entropy [179]:

1. The second "law" of thermodynamics (entropy cannot decrease) is not a lawlike theory, but only a statistical theory.
2. The "monotonic approach to equilibrium" thinking should be replaced by "pervasiveness of equilibrium" thinking.

The highest entropy state is the equilibrium state of the system – the dynamics drives the system towards a state of higher entropy and the system tends to stay in the vicinity of it. However, entropy fluctuates in finite systems, and therefore, entropy may also (momentarily) decrease. Poincaré recurrences are possible. In conclusion, the second "law" of thermodynamics should be understood only as a statistical law and not as a fundamental principle of physical reality. Thermodynamics with temperature, pressure and other (intensive) system variables is a *coarse-grained*⁶ theory. Of course, coarse-graining can also be done in a wrong way. The *Stosszahl Ansatz* is clearly wrong when one tries to describe the fundamental behaviour of a closed (and finite) universe and produce metaphysical claims about it. It may, however, be good enough for some practical purposes.

⁶Coarse-graining is a method by which the number of degrees of freedom needed to describe the system is diminished (see Definition 20).

Next, it was noticed that while the whole closed system is under consideration, its entropy is a constant of motion!⁷ Of course, it is a natural consequence of underlying reversible physical laws, but it appears to be in contradiction with observed natural processes. Gibbs encountered the seemingly contradictory situation by inventing *Gibbs coarse-grained entropy*. Coarse-graining is acquired by averaging nearby microstates to larger states, and then entropies of those larger states are added up to form the coarse-grained entropy.⁸ The elementary question of Gibbs coarse-graining is how large or small the coarse-grained states are chosen to be. Gibbs' idea is covered in more detail in Refs. [173, 174] and [45]: p. 48-59. Coarse-grained entropy is not a constant of motion as it does not include all existent correlations between possible states. The dynamics of the system drives it towards the maximum value. Fluctuations and recurrences of coarse-grained entropy are possible in all finite systems.

Despite the fact that the "invention" of coarse-grained entropy saved phenomena (i.e., explained why in the reality entropy appears to increase while the entropy of closed system "truly" is a constant of motion), it did not end the philosophical discussion concerning entropy. Philosophical dissatisfaction concentrated basically in two kinds of arguments: "what is the 'right' coarse-graining to choose from the many possibilities (i.e., how to divide the system into subsystems)" and "while the 'true' entropy of the closed system is a constant, what does it mean that coarse-grained entropy changes in time".

5.2.3 Entropy and coherence

Both entropy and coherence are important concepts that help us to classify and understand the properties and dynamics of quantum systems. Entropy is an extensive measure, as presented in Section 5.2.1. Coherence is an intensive measure that behaves like probability⁹. I illustrate some properties of entropy compared with the properties of coherence

⁷I denote entropy of the completely described closed system as idealistic entropy and use the symbol S_{id} for it.

⁸Gibbs actually calculated with infinitely small phase space elements. Coarse-graining was a result of calculating entropies of small but finite phase space elements of the system as a weighted average of (integrating) probabilities of infinitesimal phase space elements inside the small elements. Then these entropies of small systems were added up as the entropy of the system. However, infinity is not a necessary condition for Gibbs' idea.

⁹The concept of *non-extensive entropy* has been studied in statistical physics and information theory. For more details, see e.g., Refs. [180, 181] and the references therein.

by considering two identical uncorrelated spin 1/2 systems that have the density matrix

$$\rho_1 = \rho_2 = \rho_{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (5.6)$$

The eigenvalues of both systems are

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{4}. \quad (5.7)$$

The coherence of both systems is

$$\Xi_{\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \quad (5.8)$$

and the entropy is

$$S_{\frac{1}{2}} \simeq 0.56. \quad (5.9)$$

The joint system $\rho_{1+2} = \rho_1 \otimes \rho_2$ has eigenvalues $\lambda = \frac{9}{16} \wedge \frac{3}{16} \wedge \frac{3}{16} \wedge \frac{1}{16}$, and thus its entropy is $S_{1+2} \simeq 1.12$, and the entropy per particle is $S_{norm} \simeq 0.56$. However, the coherence of the joint system is $\Xi_{1+2} = \frac{5}{12}$. Moreover, constructing a greater system from uncorrelated smaller systems causes a dramatical drop in coherence, since the coherence of N joint uncorrelated systems is proportional to the product of maximum eigenvalues $\prod_l^N \lambda_{max,l}$.

The above mentioned "anomaly" in coherence is not at all surprising, since coherence is closely related to probability, that is, to the maximum possible probability of the system. If one has the probability of 3/4 to have the maximum probability state of a two-level system as the measurement outcome, the probability to have the maximum probability state for two such systems is $(3/4)^2$. It is analogous to randomly chosen classical uncoupled longcase pendulum clocks that are randomly timed. What is the probability that a photograph of clocks shows that the clocks show the same time and pendulums are in the same phase? Coherence measures this correlation – if the probability is great, then there are reasons to assume that the clocks have something in common indeed, maybe that the same person has timed them.

Both idealistic coherence and idealistic entropy of a closed system are constants of motion that give constraints to the system. Coherence reveals extra information, for example, about such different quantum physical systems that have the same entropy. For example, eigenvalues $\lambda \simeq 0.5 \wedge 0.32333 \wedge 0.125 \wedge 0.05167$ result in the same entropy as ρ_{1+2} , but the coherence is different: $\Xi = \frac{5}{12} \rightarrow \frac{1}{3}$. Of these systems, the one that has the greater coherence also has more quantum correlations, and would be more useful to, e.g., quantum computation. A system with eigenvalues

$\lambda = \frac{9}{16} \wedge \frac{7}{16}$ has the same coherence as ρ_{1+2} , but a different entropy: $S \simeq 1.12 \rightarrow 0.69$.

Thus, entropy does not tell us the whole story about the quantum physical system.

5.3 Idealistic and realistic standpoints

Next, I introduce two standpoints for entropy and coherence of a quantum system: I define the idealistic entropy of the system ρ as $S_{id} = -\text{Tr}\rho \ln \rho$, the idealistic coherence as $\Xi_{id} = \Xi(\rho)$, and the realistic entropy as $S_{re} = -\sum_i \text{Tr}\rho_i \ln \rho_i$ and the realistic coherence as $\Xi_{re} = N^{-1} \sum_i \Xi(\rho_i)$, where ρ_i is the density matrix of a subsystem and N is the number of subsystems. For any closed system, the idealistic entropy S_{id} and the coherence Ξ_{id} are constants of motion – in calculating them, everything inside the closed system is treated quantum physically, and if the physical reality is under consideration, it still demands that measurements, measurement apparatuses and even observers are treated quantum physically. Measurements are handled as interactions between measurement apparatuses and measured systems, and so on. Clearly this is possible only for an idealistic observer, say, a Clever Chinchilla. She does not interact with the physical reality (she is an "outsider"), and after having guessed the correct wave function and its time evolution operator, she studies the physical reality only as an academic example in her brain (or with a pen and paper).

The realistic standpoint describes what the real observers inside the physical reality observe. These observers are totally correlated with the physical reality and can only in their wildest imagination reach the Clever Chinchilla's view of the physical reality – as I do in this book, when I refer to idealistic quantities. If the Clever Chinchilla wishes to study the physical reality of her academic example in order to figure out what the physical reality looks like when viewed from inside, she coarse-grains her perfect model and obtains realistic quantities. Naturally, idealistic and realistic quantities behave differently, but there is no contradiction between them. If the coarse-graining is done properly (remember that the Clever Chinchilla is so clever that she never makes mistakes and she has solved the problem of right coarse-graining), she obtains as accurate a description as possible of the different possibilities of the physical reality as the Real Observer would see it. Because quantum physical reality has true random processes, the Clever Chinchilla "only" acquires all possible measurement outcomes weighted with their probabilities.

Both realistic and idealistic quantities describe the same system, but

from different standpoints. Entropies are related via the quantity $I = S_{re} - S_{id}$ known as *mutual information*. Mutual information expresses the amount of correlations between the (arbitrarily chosen) subsystems.¹⁰ Close relations between entropy and coherence (in many cases symmetric relations) suggest that there exists also a quantity $E = \Xi_{id} - \Xi_{re}$ that quantifies the *mutual entanglement*, i.e., how entangled the subsystems are with each other. This quantification scheme for entanglement is applicable for all quantum systems in density matrix formalism (i.e., in principle for all quantum systems), which is a considerable upgrade for existent measures for the usefulness of entanglement in quantum information that have consistent area of application only for two-level systems.

With the help of idealistic and realistic quantities, four fundamentally different physical system types can be categorised. In open and infinite systems (it is enough that an environment is infinite) both idealistic S_{id} (Ξ_{id}) and realistic quantities S_{re} (Ξ_{re}) increase (decrease) monotonically. In closed and infinite systems S_{id} and Ξ_{id} are constants of motion, but S_{re} (Ξ_{re}) increases (decreases) monotonically. In open and finite systems both types of quantities S_{re} (Ξ_{re}) and S_{id} (Ξ_{id}) may also decrease (increase), i.e., the systems may experience Poincaré recurrences. In closed and finite systems S_{id} and Ξ_{id} are constants of motion, but S_{re} (Ξ_{re}) may decrease (increase).

There is one problem *of principle* in decoherence of closed systems that arises (in some form or another) if one starts to argue against decoherence in closed systems: there cannot be "true" decoherence in closed systems. Let the universe (physical reality) be a closed system. Now S_{id} and Ξ_{id} are constants. There exists no environment, and thus there is no inflow (or outflow) of entropy (or coherence) to the universe. In fact, one can assume that the universe has a wave function, and thus the universe is in a pure state in which $S_{id} = 0$ and $\Xi_{id} = 1$. This is the initial point of Bell's well-known argument [182]. Bell's argument is mainly that if the universe starts in a pure state, it will always remain in a pure state – no matter how quickly the off-diagonal elements of the reduced density matrix decrease (initially a subsystem of the universe in a superposition state) and how small they will become. Bell claims that this gives, *in principle*, a possibility to make such a measurement of the state of the universe that will show quantum correlations.

However, a measurement is an interaction and it must be done with a measurement apparatus, and in order to measure desired quantum correlations the apparatus should fulfill certain criteria. Omnès has calculated

¹⁰A reader who is more interested in the relations between information, entropy and quantum physics is encouraged to study textbooks like Refs. [40, 52].

in [19]: p. 307-309 that the measurement apparatus must have at least $N' \sim C_1 e^{C_2 N^{2/3}}$ degrees of freedom, where N is the number of degrees of freedom of the measured system and C_i 's are constants of the order of unity. Therefore, the measurement apparatus must be much larger than the measured system, i.e., the universe (the same conclusion could be drawn by normal logic, if one starts to wonder what criteria a measurement device must fulfill in order to measure its own state). If the universe has $\sim 10^{80}$ relevant degrees of freedom, the measurement apparatus that can reach interferences must have at least $\sim 10^{10^{53}}$ degrees of freedom. In conclusion, it is impossible to make such a measurement, because there is no room for the measurement apparatus in the universe, it cannot be constructed and, if one assumes that the construction is possible, it certainly will not work due to the constraints of general relativity: information transfer speed is finite and the apparatus might even collapse to a black hole. Thus, it is logically impossible that inside the universe there could be a measurement apparatus that can reach all quantum correlations displaced in somewhere far corners of the wave function of the universe, e.g., of one notorious cat sealed in a steel chamber by some Mr. Schrödinger. The measurement scheme proposed by Bell is in principle impossible to perform.

The example demonstrates well why I have chosen to refer to coarse-grained entropy and coherence with the word "realistic". From the standpoint of a Real Observer inside the universe (or someone who would try to construct or use the measurement apparatus that produces the measurement demanded by Bell) events inside the universe happen according to realistic coherence and entropy. Ξ_{re} and S_{re} describe the dynamics of the universe observed by an observer totally correlated with the universe. Even if Ξ_{re} and S_{re} are "only" concepts of effective theory, effective theory is the best that a Real Observer can achieve by measuring the universe – for him, the wave function of the universe is accessible only via guessing, but even then he never could get all of it, because the universe has only so many degrees of freedom that the whole description of the wave function demands – he could not save the whole wave function of the universe in his memory or on paper. Thus, Ξ_{id} and S_{id} are defined by the word "idealistic" – they refer to (in this case) the whole wave function of the universe (or state) – to a standpoint that is impossible for everyone inside the universe if one does not compromise the demand for complete description and perform wild guesses.

If a theorist claims that there is no decoherence inside the universe, and the universe is always in a pure state, he has an "idealistic" chinchilla perspective to the matter and thus he does not even talk about the

same things as the experimentalists that have performed a measurement. Thus, in decoherence studies and discussions it is important to note which standpoint has been chosen by who. If someone for some reason wants to use an idealistic standpoint, he or she should do it without falling into many logical traps along the path. First, he or she should model everything – including measurements, measurement apparatuses, observers – quantum physically. Measurements do not differ from other interactions. Second, he or she should not compare the model directly to observations like "... we do not observe measurement apparatuses, cats and so on to be in a superposition state while the theory claims that they should", because it means comparing two incomparable propositions with each other, i.e., comparing propositions of idealistic standpoint with observations of realistic standpoint. Third, if one wants to compare observations with the predictions of the theory, one should change to the realistic description. The Clever Chinchilla transfers herself from idealistic description to realistic description by coarse-graining and then studying reduced density matrices.

The fundamental logical difference between the idealistic and the realistic standpoints can be interpreted as a physical counterpart of Gödel's incompleteness theorem. Basically, the theorem states that in a richer logical system than the first order predicate logics (the universe) that has propositions concerning its own consistency (a Real Observer, with the help of measurements, searches the perfect description of the universe) there exist propositions φ_i of the form of " φ_i cannot be proved true". To prove φ_i requires a higher order metatheory (Clever Chinchilla). Roughly, the incompleteness theorem prohibits the existence of the complete description of a closed system inside the system. Thus, the complete and incomplete descriptions must be different. Gödel's original article is Ref. [32], and more details of incompleteness theorem can be found in Refs. [8, 33].

Remember that decoherence is an *observed* phenomenon in the universe [110, 111], even if the wave function of the universe obeys unitary dynamics. Observed matters of facts inside the universe are related to realistic quantities S_{re} and Ξ_{re} .

5.4 Axioms and assumptions

Next, a little about general scientific theory formation concerning coherence theory. In science, there is a tendency to axiomatise theories – to found axioms of the theory (from which other propositions of the the-

ory can be derived directly, or with help of propositions of other theories and/or with experimental evidence). This axiomatisation begins either by itself or is started after the theory has found its place within the scientific community. [23]: II.3.2. Since coherence theory is a very young theory, it is practically impossible to find an axiomatised structure for it yet. Instead, a few axioms can be found via the analysis given in this thesis:

Axiom 1: *Quantum coherence is a measure of the strength of quantum correlations.*

Exact contents of Definition 26. Coherence is correlation of wave-like entities (Definition 25), and quantum correlations cannot be explained with the framework of classical correlations, i.e., quantum correlations are related to quantum physical superposition states (Definition 23).

Axiom 2: *Quantum coherence is a conserved quantity.*

The quantity-like essence of quantum coherence is implicitly included in Definition 26 and in Axiom 1 related to the definition. Quantum coherence quantifies the strength of quantum correlations. The "conservation law" of quantum coherence is (according to Noether's principle) a result of invariance of a quantum state on different basis sets (see Chapter 5). Thus, the symmetry is internal. Quantum coherence can be defined uniquely (the mathematical definition is in Chapter 5).

Axiom 3: *Quantum coherence is an intensive quantity.*

The fundamental structure of quantum coherence is that it is the intensive counterpart of entropy (which is an extensive quantity). Both entropy and coherence set constraints on the dynamical accessibility of possible states of closed systems (Section 5.2.3).

Moreover, I will list a few assumptions that may become axioms if future research validates them. These assumptions serve as good future research topics on coherence theory.

Assumption 1: *With quantum coherence, it is possible to define and quantify the mutual entanglement of subsystems.*

Assumption 2: *With coarse-grained coherence Ξ_{re} one can describe coherence phenomena within physical reality.*

According to Gödel's incompleteness theorem a complex enough system cannot be completely described within the system.

Decoherence scenario	<i>A</i> No	<i>D</i> Weak	<i>B</i> Moderate	<i>C</i> Strong
Time				
$\lambda t_1 = 8.6 \times 10^{-5}$	$\xi_{d,I} \sim \infty$ $\Xi = 1$	$\xi_{d,I} = 10.88$ $\Xi = 0.924$	$\xi_{d,I} = 3.44$ $\Xi = 0.793$	$\xi_{d,I} = 1$ $\Xi = 0.528$
$\lambda t_2 = 1.05 \times 10^{-2}$	$\xi_{d,II} \sim \infty$ $\Xi = 1$	$\xi_{d,II} = 9.65$ $\Xi = 0.792$	$\xi_{d,II} = 3.05$ $\Xi = 0.515$	$\xi_{d,II} = 1$ $\Xi = 0.228$

Table 5.1: Coherence Ξ of a macroscopic superposition (presented in section 4.3) in scenarios *A* (no decoherence), *D* (weak decoherence), *B* (moderate decoherence) and *C* (strong decoherence) at the instants of time t_1 (at the end of phase *I*) and t_2 (the possible birth moment of the macroscopic superposition). Even in the case *D*, that is not within the reach of present technology, decoherence reduces the probability to observe the macroscopic superposition by $\sim 20\%$.

Assumption 3: *It is possible, theoretically, to find the "right" coarse-graining.*

I assume that there is a formal way to link Gödel's incompleteness theorem to coarse-graining, and in future it will be possible to understand how the phenomenon that looks like "coarse-graining" truly occurs in physical reality, and what is the nature of the phenomenon.

There will be more axioms as the understanding of the nature of coherence increases (and maybe the exact formulation of the axioms given here will change), but this is a good starting point for an extensive research project.

5.5 Applying coherence theory in practice

For concreteness, I present in Table 5.1 coherences of density matrices of the macroscopic atom-molecule superposition in a Bose condensate shown in Figures 4.3 and 4.4 of Section 4.3 at two instants of time: t_1 (the end of phase *I*) and t_2 (when the macroscopic superposition should have been formed). The parameter ξ_d describes the strength of the dominant interaction compared with the strength of decoherence. It appears that even for weak decoherence (scenario *D*), the system has lost about 20% of its coherence before instant t_2 . Thus, with probability ~ 0.8 the measurement outcome is that the system is in a state that is a unitary

transformation of the initial pure state. With probability ~ 0.2 the system has ended up to some other state, i.e., the macroscopic superposition in the system has collapsed with probability ~ 0.2 .

With this little example I will show in practice the use of the (invariant) coherence: by using it, it is possible to evaluate the probabilities to collapse of all systems that can be expressed in the density matrix formalism. It is very handy tool in research of quantum computer, because the computational power of quantum computer is based on superposition states. For example, in the quantum computer with 400 qubits if each qubit loses ~ 0.01 units of coherence during the computation, the whole quantum computer has only ~ 0.018 units of coherence left, i.e., it computes the desired calculation right with probability of ~ 0.018 . Thus, it is understandable why it is challenging to develop a quantum computer.

Chapter 6

About decoherence in a closed system

In this Chapter, I consider the decoherence of a closed system by modelling it with a simple spin 1/2 model. I will use density matrix formalism, since the decoherent histories approach is problematic (see Section 4.1), and in my opinion, the fundamental approach for describing quantum physical systems is a wave function (i.e., a state vector). Moreover, studying quantum physics by state vectors in the scale of the physical reality should be a valid approach and result in meaningful results. My purpose is to apply the definition of coherence and derive a phenomenological concept of *decoherence time* τ_d from the dynamics of the realistic coherence $\Xi_{re}(t)$. In Section 6.1 I present the spin model, and the simulations and results are presented in Section 6.2. Finally, in Section 6.3 I consider the roles of decoherence, an environment and an observer in a closed system.

6.1 Spin 1/2 model

The Heisenberg spin model is a very suitable model for decoherence studies, because it is simple enough to be solved, and yet complicated enough to simulate the properties of real quantum systems. Moreover, it is easily either simplified or expanded. A simplified version is good enough in researching the general properties of coherence in closed systems. Coupled spin systems are interesting from a quantum computational point of view, too.

My system, N interacting particles fixed in a space, has no environment and, in that sense, the system forms a closed quantum universe. The particles are spin 1/2 particles, and the interaction between them is due

to their spin- z component (not necessary, but a simplification that makes the model analogous to the Ising model). When there is no coupling with the environment (i.e., no external magnetic field etc.), the spin states are degenerate and have the same energy, which is taken to be zero. Zurek [166], Omnès [19] and Schlosshauer [108, 109] have considered a similar, but simpler model in order to study the decay of off-diagonal elements (i.e., quantum correlations) of a reduced density matrix. They label one particle as *the system* and the others as *the environment*, and the particles that form the environment do not interact with each other. I, on the contrary, am interested in studying the particle system as a whole.

The interaction Hamiltonian

$$H = \hbar \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{i=j+1}^N g_{ij} \sigma_z^j \otimes \sigma_z^i \prod_{k=1, \neq j, i}^N \otimes \mathbf{1}_k \quad (6.1)$$

describes the dynamics of the system. The interaction matrix G , where $g_{ij} = g_{ji}$, gives the interaction strength between particles i and j . The interaction strength arises from the potential V , but for formal calculations there is no need to know more about it, because particles are doomed to stay in one place. Fixing the positions of the particles is a justified assumption in decoherence studies since, in most cases, the decoherence time scale is the shortest time scale [104], at least shorter than the time scale of particle motion. In numerical simulations (Section 6.2), only the potentials of the type $V = \eta/r^\epsilon$ are considered.

Let me simplify the model a bit so that the initial state of simulations is a product state of single particle superposition states

$$|\Psi(0)\rangle = \prod_{k=1}^N \otimes (a_k |+_k\rangle + b_k |-_k\rangle), \quad (6.2)$$

where a 's and b 's are normalised probability amplitudes $|a_k|^2 + |b_k|^2 = 1$ for all $k = 1, \dots, N$. The Schrödinger equation

$$i\hbar \partial_t |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle \quad (6.3)$$

gives the dynamics of the system, and with the given initial condition of Eq. (6.2) one gets the time dependence

$$|\Psi(t)\rangle = \exp \left[-i \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{i=j+1}^N g_{ij} \sigma_z^j \sigma_z^i t \right] \prod_{k=1}^N \otimes (a_k |+_k\rangle + b_k |-_k\rangle). \quad (6.4)$$

The fate of the l^{th} particle is solved by tracing over other particles,

$$\rho_l = \text{Tr}_{1, \dots, N \neq l} \rho, \quad (6.5)$$

where $\rho = |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|$. With Gibbsian coarse-graining [45, 173, 174] I make an effective theory of the particle system by tracing over the "uninteresting" particles (that form an effective environment to the particular particle in focus), as in the mean field approximation. The net effect of traced-out particles is described in a simpler form and with less degrees of freedom. Thus,

$$\begin{aligned} \rho_l &= |a_l|^2|+_l\rangle\langle+_l| + |b_l|^2|-_l\rangle\langle-_l| \\ &+ \left[a_l b_l^* \prod_{k=1, \neq l}^N \left(|a_k|^2 e^{-i2g_{lk}t} + |b_k|^2 e^{i2g_{lk}t} \right) |+_l\rangle\langle-_l| + h. c. \right]. \end{aligned} \quad (6.6)$$

It is interesting that the result of Eq. (6.6) is the same as in Ref. [166], if one drops off the index l . The existence of index l arises from the fact that in Ref. [166] only an interactionless environment has been considered, but my model counts all the interactions between particles.

Let us make our notation a bit lighter by denoting

$$z_l = a_l b_l^* \prod_{k=1, \neq l}^N \left(|a_k|^2 e^{-i2g_{lk}t} + |b_k|^2 e^{i2g_{lk}t} \right). \quad (6.7)$$

This z_l (or its complex conjugate z_l^*) describes the fate of the off-diagonal elements of l^{th} particle. The eigenvalues of the reduced density matrix ρ_l are

$$\lambda_{i,l} = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{1 - 4(|a_l|^2|b_l|^2 - |z_l(t)|^2)}. \quad (6.8)$$

Now the single particle coherences are $\Xi_{l,\text{single}} = \Xi(\rho_l)$, and the realistic coherence $\Xi_{re} = N^{-1} \sum_{l=1}^N \Xi_{l,\text{single}}$ of the closed system can be evaluated. Inserting the maximum eigenvalues of Eq. (6.8) into the definition of coherence¹ Eq. (5.5) results in

$$\begin{aligned} \Xi_{re}(t) &= \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \frac{M}{M-1} \left(\lambda_{max,l} - \frac{1}{M} \right) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \frac{2}{1} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1 - 4(|a_l|^2|b_l|^2 - |z_l(t)|^2)} - \frac{1}{2} \right) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \sqrt{1 - 4(|a_l|^2|b_l|^2 - |z_l(t)|^2)}, \end{aligned} \quad (6.9)$$

where N is the number of particles and M is the dimension of the reduced density matrix.

¹See Chapter 5 for a detailed analysis of coherence.

6.2 Simulations and results

6.2.1 The structure of simulations

The main aim of my numerical simulations is to demonstrate the usefulness of the mathematical definition of coherence presented in Chapter 5. The secondary aim is to study the time evolution of coherence in a simple closed and finite system that is possible to simulate with the present computational resources. The third aim is to estimate Poincaré recurrences and to calculate the dependence of decoherence time $\tau_d(N, n_\rho, \eta, \epsilon, D)$ on relevant system parameters N (the number of particles), n_ρ (particle density), η and ϵ (the shape of interaction in a η/r^ϵ -potential), and D (the number of spatial dimensions). The usual coherence decay in infinite systems has the form of $\Xi \sim \exp(-t/\tau_d)$, which is used to define the decoherence time τ_d [104, 105]. My numerical simulations suggest that the decay profile of the form of $\Xi \sim \exp\left(-t/\tau_d\right)^{f(D,\epsilon)}$ is more accurate than the usual one.

The starting point of simulations is a D -dimensional "box" whose volume is l^D . N particles are placed randomly in this box. These particles are in fixed places, and they interact with each other according to the Hamiltonian (6.1). The size of the box is related to the number of particles N and the particle density n_ρ by

$$l = \left(\frac{N}{n_\rho}\right)^{1/D}. \quad (6.10)$$

Without lack of generality the numerics can be eased by choosing to study an initial state that contains complete superpositions, so $a_k = b_k = 1/\sqrt{2}$. Thus, the closed and finite system has idealistic coherence $\Xi_{id} = 1$. The interactions between particles have the form of $g_{lk} = \eta/r_{lk}^\epsilon$, where r_{lk} is the distance between the l^{th} and k^{th} particle. Inserting these conditions into Eq. (6.9) results in the realistic coherence

$$\Xi_{re}(t) = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \prod_{k=1, \neq l}^N \cos\left(\frac{2\eta t}{r_{lk}^\epsilon}\right). \quad (6.11)$$

A least squares fit is applied on the time evolution of realistic coherence $\Xi_{re}(t)$ using a function

$$\xi(t) = (1 - c)e^{-(t/t_d)^C} + c \quad (6.12)$$

that allows fluctuations around the average level c of $\Xi_{re}(t)$. The average level c is the expectation value of $\Xi_{re}(t)$ in the interval $[t_1, t_2]$, where

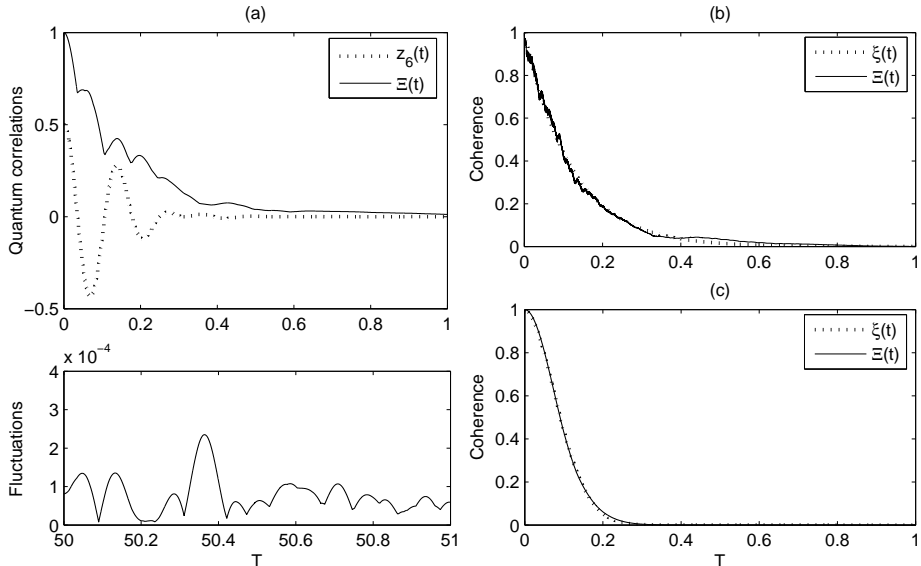


Figure 6.1: The behaviour of the coherence function $\Xi_{re}(t)$ in scenarios: (a) compared with single particle correlations $z_6(t)$ (of randomly chosen 6th particle) and long-time fluctuations with system parameters $N = 20, D = 1, \epsilon = 1, n_\rho = 1$. (b) compared with the fitting function $\xi(t)$ with system parameters $N = 100, D = 1, \epsilon = 1, n_\rho = 1$, and (c) compared with the fitting function $\xi(t)$ with system parameters $N = 100, D = 3, \epsilon = 1, n_\rho = 1$. The unit of simulation time is $T = \eta (2n_\rho[\text{m}])^{\epsilon/D} t$, where t is the real time. The fitting parameters (b) $t_d = 0.1212, C = 1.0070, c = 2.3 \times 10^{-16}, \chi^2 = 0.8420$ and (c) $t_d = 0.1114, C = 1.8443, c = 1.5 \times 10^{-21}, \chi^2 = 0.0744$ demonstrate the accuracy of the proposed coherence decay profile. Fluctuations from theory are insignificant when $D + 1 > \sqrt{N/200} \exp(\epsilon/2)$.

$\tau_d \ll t_1$ and $\tau_d \ll t_2 - t_1$:

$$c = \langle \Xi_{re} \rangle = \frac{1}{t_2 - t_1} \int_{t_1}^{t_2} \Xi_{re}(t) dt. \quad (6.13)$$

The sum of squared errors χ for the function of Eq. (6.12) describes the accuracy of the fit. On the last phase of numerical analysis, it will be used to obtain relative weights for data points. The data of one run consists of fitting parameters t_d (represents the estimate of decoherence time), C (exponent that characterises the coherence decay of $\sim r^{-\epsilon}$ -dependent potential in a certain dimension D), c (the fluctuation level of coherence) and χ (the sum of squared errors of the fit). Poincaré recurrence times T_P are calculated directly from g_{lk} s.

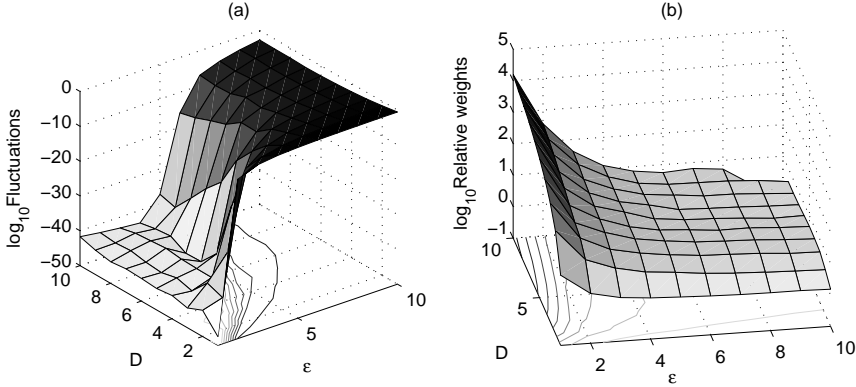


Figure 6.2: The expectation value of fluctuations (a) and average of weights (b) in respect to dimension D and the potential term ϵ . Other simulation parameter values are $N = 200$ and $n_\rho = 1$. These plots demonstrate that the proposed coherence decay profile is very accurate if $D + 1 > \sqrt{N/200} \exp(\epsilon/2)$.

The procedure is repeated U times. For $U = 100$, a good statistical estimate of the behaviour of the system with particular parameter values (N_i, ϵ_i, D_i) is obtained. The dependencies of coherence about η and n_ρ are included in the unit of "simulation time", i.e., $T = \eta n_\rho^{\epsilon/D} t$. The parameter space that is studied thoroughly is $N \in [20 \dots 100] \wedge D \in [1 \dots 4] \wedge \epsilon \in [1 \dots 2]$, and in addition some points and slices from greater N -values, most notably with $N = 200$: $D \in [1 \dots 10] \wedge \epsilon \in [1 \dots 10]$.

6.2.2 About the general results

Numerical simulations show that the proper coherence decay profile at least in my spin model is $\xi(t) = (1 - c)e^{-(t/t_d)^C} + c$. Figure 6.1 demonstrates the accuracy of the fit. The proposed decay profile $\xi(t)$ fits without significant fluctuations or deviations to simulation data if $D + 1 > \sqrt{N/200} \exp(\epsilon/2)$. The area of significant fluctuations arises mainly from the distance measure of two coordinate points $l = \sqrt{\sum_i^D (x_i - x'_i)^2}$ that allows more particles within a fixed distance from the reference particle as the amount of spatial dimensions D increases. Another factor is that as the range of potential shortens (as ϵ increases), less particles within a fixed distance contribute significantly to coherence decay.

Figure 6.2 presents the behaviour of expectation value of fluctuations and average of weights in respect to dimension D and the potential term ϵ . The minimum fluctuation level behaves as $\sim 10^{-N/5}$. Fluctuations begin to give a strong contribution to the dynamics if $D + 1 < \sqrt{N/200} \exp(\epsilon/2)$,

so that fluctuation level with $D = 1$ and $\epsilon = 10$ is ~ 0.3 – in which case fluctuations of coherence are quite dominant and thus that kind of system may show very strong quantum correlated behaviour despite the continuing decoherence. As stated above, it is not surprising at all, since the short range of the potential isolates particles practically from all other particles except their nearest neighbours. However, the $\sim \sqrt{N}$ behaviour for the low-level fluctuation limit results in the interesting fact that even systems with $\epsilon = 1$ type of potentials do not lay on the lowest coherence fluctuation level if the particle number is large enough. It seems that this result allows considerable coherence fluctuations for macroscopic objects, but the following facts should also be taken into account before claiming that these fluctuations will play a significant role: (1) The floor of the fluctuation level drops as $\sim 10^{-N/5}$, so that the net effect of coherence fluctuations may still get smaller even if the system parameters do not lay on the lowest fluctuation area. (2) The physical effect on the particular physical object is a sum of all interactions – also including those interactions that are on the bottom fluctuation level.

The power C of the exponential decay profile seems to have the upper limit $C \leq 2$. The usual coherence decay occurs if $D = \epsilon = 1$, so that $C = 1$. It might be that calling the case $C = 1$ as the usual coherence decay profile is a result of most of (de)coherence studies have been performed in too simple one-dimensional systems, and it has been forgotten to consider the possibility that the number of spatial dimensions of the system (or the shape of the interaction) could fundamentally affect the coherence decay profile. My study shows that the "usual" coherence decay profile only occurs with few system parameter values.

6.2.3 About interactions and decoherence in different basis sets

Just for certainty, I will now study decoherence of the spin model in a different basis set. So far, the study has considered the problem only in the spin- z basis, but, the perfect superposition state in spin- z basis is a well-defined eigenstate in spin- x basis (spin up). According to physical intuition, the results of nature should not depend on which way they are theoretically described. On the other hand, the preferred basis problem in the decoherent histories approach demonstrated that the change in theoretical view may have an enormous impact on the behaviour of model. Thus, I should do a reality-check of the null hypothesis: what happens to the density matrix in a general spin basis.

One can obtain any spin-basis via a unitary transformation

$$U = \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}. \quad (6.14)$$

The initial state of Eq. (6.2), with $a_k = b_k = \frac{1}{\sqrt{2}}$, is in the general spin-basis

$$|\Psi(0)\rangle_{\theta,\phi} = \prod_{k=1}^N \otimes \left((\cos \theta + e^{-i\phi} \sin \theta) |+_k\rangle_{\theta,\phi} + (e^{i\phi} \sin \theta - \cos \theta) |-_k\rangle_{\theta,\phi} \right). \quad (6.15)$$

If one chooses $\theta = \pi/4$ and $\phi = 0$, one obtains a spin- x basis which is a product state of eigenstates. The analysis illustrates some of the criticism against decoherence in closed systems: how would a pure state with the probability of 1 obtain a certain measurement outcome in a certain basis experience decoherence? One can always find a basis set in which a superposition state appearing in another basis set is an eigenstate.

It is essential to remember that decoherence is a *dynamical* process, and thus the interaction Hamiltonian is an equally important part of the problem as the initial state. In the present case, the Hamiltonian of Eq. (6.1) is in the general $\sigma_{\theta,\phi}$ -basis

$$H = \hbar \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{i=j+1}^N g_{ij} \sigma_{\theta,\phi}^j \otimes \sigma_{\theta,\phi}^i \prod_{k=1, \neq j,i}^N \otimes \mathbf{1}_k, \quad (6.16)$$

where

$$\sigma_{\theta,\phi} = \begin{pmatrix} \cos^2 \theta - \sin^2 \theta & e^{-i\phi} \sin 2\theta \\ e^{i\phi} \sin 2\theta & \sin^2 \theta - \cos^2 \theta \end{pmatrix}. \quad (6.17)$$

Thus, the reduced density matrix of l^{th} particle in a general spin-basis is

$$\rho(t)_{l,\theta,\phi} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sin 2\theta (e^{-i\phi} z_l(t) + e^{i\phi} z_l^*(t)) & e^{-i2\phi} \sin^2 \theta z_l(t) - \cos^2 \theta z_l^*(t) \\ e^{i2\phi} \sin^2 \theta z_l^*(t) - \cos^2 \theta z_l(t) & \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sin 2\theta (e^{-i\phi} z_l(t) + e^{i\phi} z_l^*(t)) \end{pmatrix}, \quad (6.18)$$

where $z_l(t) = z_l^*(t) = \frac{1}{2} \prod_{k=1, \neq l}^N \cos(2g_{lk}t)$.

The off-diagonal elements of the reduced density matrix (6.18) are proportional to $z_l(t)$ [or $z_l^*(t)$] in any basis that has off-diagonal elements. At least in the general spin model the common idea of the relation between off-diagonal elements of the density matrix and quantum correlations (coherence) is valid, and the coherence function $\Xi(\rho_l, t) = 2|z_l(t)|$ well describes the time evolution of coherence. As explained in Section 5.1, if $N \rightarrow \infty \wedge t \rightarrow \infty$, then $z(t), z^*(t) \rightarrow 0$, i.e., in an infinite model

the permanent diagonalisation of the reduced density matrix happens in all possible basis sets. In a finite model, Poincaré recurrences are present.

The dynamical effects (decoherence and recoherence) do not depend on the chosen basis set, and thus, the preferred basis problem is not realised with my definition of coherence.

6.2.4 Poincaré recurrence

The simulated system is a closed and finite quantum system, and thus its idealistic coherence Ξ_{id} is a constant of motion, but realistic coherence Ξ_{re} may experience Poincaré recurrence. There is an elementary procedure for an upper estimate of the recurrence time of a system consisting of N subsystems, that has $M = \frac{1}{2}(N^2 - N)$ fixed (independent) periods T_i . From the construct

$$\frac{T_{\text{unit}}}{T_i} = \frac{n_i}{d_i}, \quad (6.19)$$

where n_i and d_i are smallest possible natural numbers, the upper limit of Poincaré recurrence time is obtained:

$$T_P = T_{\text{unit}} \prod_i^M d_i. \quad (6.20)$$

The procedure of evaluating Poincaré recurrence time T_P of a particular simulation run is rather easy to do numerically, but with the drawback of a limited accuracy. The inaccuracy tends to increase the estimated value. Thus, one should think the results of Figure 6.3 as the magnitude of the upper limit of recurrence time. The best fit for the simulation data is given by the function

$$T_P(N, n_\rho, \eta, \epsilon, D) = \pi \eta^{-1} n_\rho^{-\epsilon/D} e^{3.07(N^2 - N)}. \quad (6.21)$$

In Ref. [108], Poincaré recurrence time of similar system is $T_P \sim N!$. The difference between the estimates may be a result of limited numerical accuracy on applying my method. Another possibility is that there is unintentional "double-counting" due to the coarseness of the procedure that unintentionally includes such periods that multiplied by an integer are the product of all the other periods. Thus, my result only gives an upper estimate for recurrence time.

Nevertheless, it is clear that the system *may* return to its initial position, but the recurrence time grows fast with respect to N . For example, for $N = 100$, $D = 3$, $\epsilon = 1$, $n_\rho = 10^{30} \text{ m}^{-3}$ and $\eta = 8.22 \times 10^{43} e^2 \text{ Hz m C}^{-2}$ (electro-magnetic interaction with charge of electron e) the estimated upper limit for recurrence time is $T_P \sim 10^{13183} \text{ s}$, and if recurrence time is

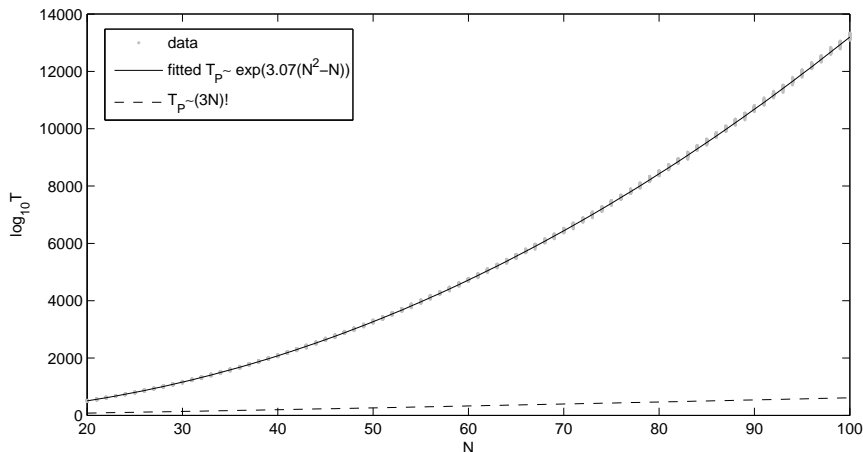


Figure 6.3: An upper estimate of Poincaré recurrence. Simulation data (gray dots) is obtained with parameters $D = 1$, $\epsilon = 1$ and $n_\rho = 1$. The unit of simulation time is $T = \eta(n_\rho[m])^{\epsilon/D} t$, where t is the real time. The best fit (solid line) differs considerably from $\sim N!$ type of behaviour (dashed line).

$\sim N!$ then $T_P \sim 10^{142}$ s, which is still a very long time compared with the age of the universe $T_U \sim 4 \times 10^{17}$ s.

6.2.5 The dependence of coherence decay on system parameters

As shown in Section 6.2.2, the decay of coherence obeys well the profile $\xi(t) = (1 - c)e^{-(t/t_d)^C} + c$. The floor of fluctuation level behaves as $c \sim 10^{N/5}$, if $D + 1 > \sqrt{N/200} \exp(\epsilon/2)$. To derive the dependence of coherence decay on system parameters, there are two separate steps remaining: to study the power parameter C and the decoherence time parameter t_d .

As the simulation results presented in Figure 6.4 show, the power parameter C is not a function of N . It appears that the function

$$f(D, \epsilon) = 1.97 \left(1 - 0.93 \exp(-0.65 D^{1.35} \epsilon^{-1.68}) \right) \quad (6.22)$$

gives the best fit for the values of C of the fitting function $\xi(t)$. It also appears that as both D and ϵ increase, the deviation of data points in parameter C widens.

Quite a good approximation of the functional behaviour of the deco-

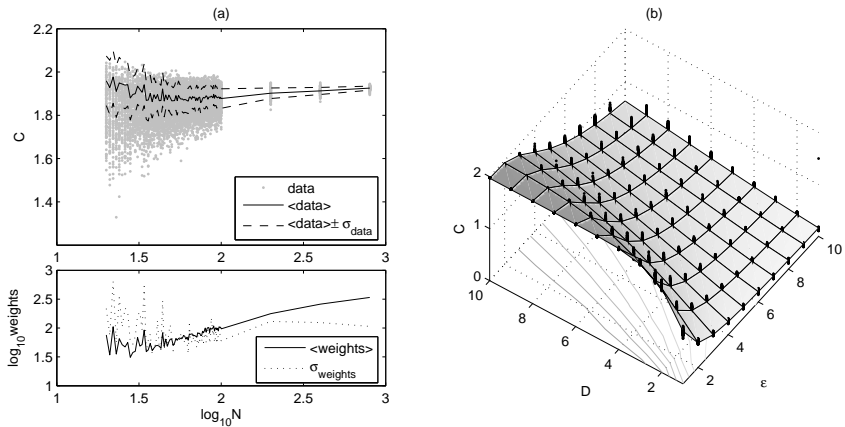


Figure 6.4: The dependence of the power parameter C on system parameters N , ϵ and D . The density is $n_\rho = 1$. Projections of the parameter space are (a) $D = 3$, $\epsilon = 1$ and (b) $N = 200$. For each parameter value set (N, D, ϵ) there exist 100 data points. It seems that there is no relation between C and the number of particles (a). With small values of N the standard deviation of weights is greater than the average of the weights, which explains the deviations of weighted average of C from a constant value. With respect to dimension D and potential parameter ϵ the best fit for the power parameter C is given by the function $f(D, \epsilon) = 1.97(1 - 0.93 \exp(-0.65D^{1.35}\epsilon^{-1.68}))$ (b). For large D and ϵ the deviation in data points widens.

herence time parameter t_d is given by

$$\begin{aligned} \tau_d = & \eta^{-1} n_\rho^{-\epsilon/D} \left(\frac{N}{200} \right)^{-0.085(D-1)/\epsilon} \times \left(0.29e^{-0.79(D-1)\epsilon^{1/4} - 0.13(\epsilon-3.4)^2} \right. \\ & \left. + 0.17 \frac{\epsilon - 1}{2^\epsilon} ((D-2)^2)^{0.19(\epsilon-1)} + \frac{0.03}{\epsilon^{1/2}} + 0.07 \right). \end{aligned} \quad (6.23)$$

I assume that the accuracy of the fit (6.23) is limited to the close environment of the parameter space, since the form of the fit is very complex and most likely it does not follow the physical behaviour of the system accurately enough – it is only a fit on the observed behaviour which is demonstrated in Figure 6.5. Moreover, the deviation in data points widens as both D and ϵ increase. The most evident reason for this is the fact that $N = 200$ particles is still too small a number for an accurate and reliable analysis in a short-range interaction parameter space $\epsilon > 3$ if the number of particles pro dimension is too small. In the future, this inconvenience should be easily overcome as the available computational capacity increases. The behaviour of τ_d with respect to the particle number N is more reliable because the few simulations with greater par-

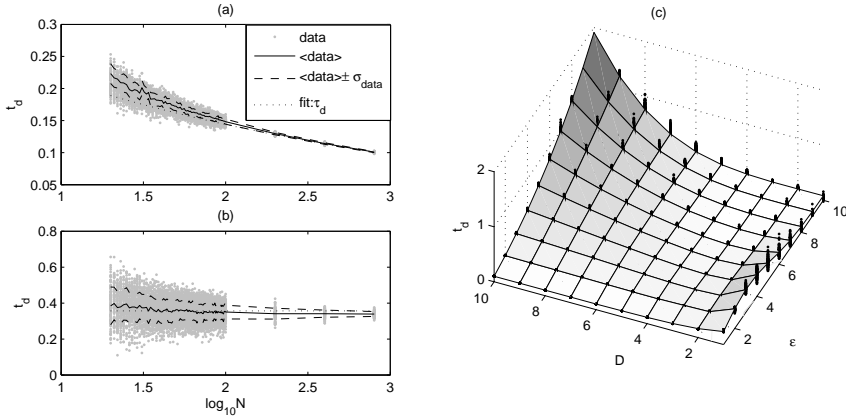


Figure 6.5: The dependence of the decoherence time parameter t_d on system parameters N , ϵ and D . The density is $n_\rho = 1$. The projections of the parameter space are (a) $D = 3$, $\epsilon = 1$, (b) $D = 1$, $\epsilon = 2$ and (c) $N = 200$. The unit of simulation time is $[t_d] = \eta(n_\rho[\text{m}])^{\epsilon/D} t$, where t is the real time. For each parameter value set (N, D, ϵ) there exist 100 data points. A rather good approximation of functional behaviour of t_d is given by τ_d of Equation (6.23). For small N (a,b) and large D and ϵ , the deviation in data points widens.

title numbers $N = 400$ and $N = 800$ confirm the observed behaviour, and because particle number-related functions are simple functions which factorise out of the complex form in Eq. (6.23).

Despite the fact that for each parameter point there are only data points of 100 simulations, and despite the accuracy problems as both D and ϵ increase, the behaviour of functions $f(D, \epsilon)$ and $\tau_d(N, n_\rho, \eta, \epsilon, D)$ is quite reliable for physically relevant cases. Physically the most interesting results are:

- The decoherence time behaves as $\tau_d \sim N^{-\text{const.}(D-1)/\epsilon}$ with respect to the particle number N . I do not know whether there exists a constant level that the decoherence time approaches as the particle number increases. At least with my simulation parameter values of N there was no evidence for the saturation, but to find a reliable answer, one should do simulations with N at least two orders of magnitude greater.

Moreover, the fit has $(D - 1)$. Is this "-1" a physical property of the model or a result of numerics? I suspect the latter, but I could not find a suitable fit without "-1".

- The upper limit of the exponent $f(D, \epsilon)$ of the decay profile $\Xi(t) = \exp[-(t/\tau_d)^{f(D, \epsilon)}]$ is ~ 2 .

- The decoherence time τ_d seems to have a lower limit with respect to D and ϵ . It is around ~ 0.07 in units of simulation time $\eta (n_\rho[\text{m}])^{\epsilon/D} t$ for $N = 200$.
- The behaviour of τ_d is dominated by two different trends in the parameter space (D, ϵ) . One trend is a Gaussian peaking near $(D = 1, \epsilon = 3.4)$, and the other one is a runaway solution when both D and ϵ are large. I suspect that at least a part of the Gaussian is a physical property of the model, but also that most of the runaway solution is caused by too few particles in the numerics.
- The electro-magnetic interaction ($\epsilon = 1$) with parameter values $D = 3$, $N = 100$ and $n_\rho = 10^{30} \text{ m}^{-3}$ results in the decoherence time $\tau_d = 4.3 \times 10^{-17} \text{ s}$ and exponent $f(D, \epsilon) = 1.87$. Spin-spin interaction ($\epsilon = 3$) and $\eta = 3.27 \times 10^{-26} \text{ m}^3 \text{ Hz}$ (for ${}^6\text{Li}$) with otherwise the same setup results in the decoherence time $\tau_d = 3.3 \times 10^{-5} \text{ s}$ and exponent $f(D, \epsilon) = 0.80$. For pure spin-spin interaction, the experimental observation of coherence decay seems possible in few-particle systems, but only if particles are isolated well enough from other (stronger) interactions – most notably from electro-magnetic interaction.

While a more sophisticated study to solve the form of decoherence time needs more computational power, obvious results of this research are that my definition of coherence is confirmed by the case-study, and that the coherence decay profile is $\Xi_{\text{re}}(t) = (1 - c) \exp[-(t/\tau_d)^f] + c$ in the Heisenberg model (with η/r^ϵ -dependent interactions).

6.3 Decoherence, the environment and the observer

In decoherence studies, either (or both) of the following two misconceptions is often assumed:

- Decoherence occurs only in open systems, i.e., the system that experiences decoherence is connected with an environment that consumes coherence out of the system.
- The environment that causes decoherence cannot be followed by an observer.

A common opinion is that decoherence means the loss of quantum coherence of the system in contact with an environment² (see e.g., [38, 106, 107, 108, 164, 183]). This means that only open systems can experience decoherence. As analysed before, the study of decoherence in closed systems is a meaningful scientific problem (see Chapters 5 and 6). Moreover, the demand of an environment voids, e.g., decoherence studies of the whole physical reality (universe), since the universe has no environment [104, 105, 108, 109].

As a consequence, the study of decoherence in closed systems has previously been justified by the thought that "internal degrees of freedom may constitute an environment, if they cannot be followed by the observer" [107]. However, this leads to peculiar overestimation of the role of the observer and it renders decoherence to be only an epistemological phenomenon. Even so, it is still obvious that decoherence also has ontological consequences – otherwise two experimental groups that measure decoherence effects with the same experimental setup would have quantitatively different results if their theoretical epistemological standpoints differ.

Let me speculate about the role of an environment and the observer by a thought experiment of spin 1/2 particles. Let the interesting subsystem of the closed system be a particle with spin up in the x -basis (that is superposition in z -basis). The particle is coupled with an uninteresting subsystem of spin 1/2 particles (that is an "environment" that consist of internal degrees of freedom which was mentioned in Ref. [107]). After a couple of decoherence times a measurement in the spin x basis is performed to the interesting subsystem. It is clear that the measurement outcome should not depend on whether an arbitrary observer can or cannot follow the other spin 1/2 particles. On the other hand, the quotation of Ref. [107] has the logical form of "if an observer can follow the spins of an uninteresting subsystem, then the interesting system does not experience decoherence, but if the observer cannot follow the spins of the uninteresting subsystem, then the interesting system experiences decoherence".

To support the qualitative argument one can perform the following formal deduction and calculations. Let the initial state of a closed system

²Decoherence has been defined as "the loss of quantum coherence suffered by a quantum system in contact with an environment" [107], and "the process whereby the quantum-mechanical state of any macroscopic system is rapidly correlated with that of its environment in such a way that no measurement on the system alone (without a simultaneous measurement of the complete state of the environment) can demonstrate any interference between two quantum states of the system" [38]: Decoherence.

be

$$|\psi(0)\rangle = |\psi_S(0)\rangle \otimes |\psi_E(0)\rangle, \quad (6.24)$$

where the system $|\psi_S(0)\rangle$ is initially prepared into superposition state, and the initial state of the uninteresting subsystem is

$$|\psi_E(0)\rangle = \prod_i |E\rangle_i. \quad (6.25)$$

The time evolution operator U_{S+E} maps the initial state $|\psi(0)\rangle$ to

$$|\psi(t)\rangle = U_{S+E}|\psi(0)\rangle = |\psi_{S+E}\rangle. \quad (6.26)$$

Let us assume that the time evolution operator U_{S+E} is a consequence of such interactions that are given by the Hamilton operator H_{S+E} , and they result in decoherence in the system, i.e., the (reduced) density matrix of the system is diagonalised because of interactions in H_{S+E} . The latter quotation of Ref. [107] is formally "If there exists an observer (whose initial state is, say $|O_0\rangle = \prod_j |C_0\rangle_j$) who can measure the degrees of freedom of the uninteresting subsystem (e.g., with interaction $H_M = \sum_i |C_i\rangle_i |E\rangle_i \otimes \langle E|_i \langle C_0|_i + h.c.$), then the off-diagonal elements of the (reduced) density matrix of the system do not decay". But, the time evolution operator U_M of the interaction H_M maps the initial state of the uninteresting subsystem and the observer $\prod_i |E\rangle_i \otimes \prod_j |C_0\rangle_j$ to $|EO\rangle = \prod_i |E\rangle_i |C_i\rangle$. The state $|EO\rangle$ is a perfectly entangled state of the uninteresting subsystem and the observer, and in addition, the interaction $H_{S+E} + H_M$ results in exactly the same system dynamics as the bare uninteresting subsystem $|E\rangle$ with interaction H_{S+E} , if the system and the observer of the uninteresting subsystem do not interact with each other.

With density matrices: the initial state is

$$\rho(0) = |\psi(0)\rangle\langle\psi(0)| = |\psi_S(0)\rangle\langle\psi_S(0)| \left(\prod_i \otimes |E_i\rangle\langle E_i| \right) \prod_j \otimes |C_0\rangle_j\langle C_0|_j. \quad (6.27)$$

If the observer does not observe the uninteresting subsystem, then there exists only an interaction H_{S+E} that results in the time evolution of the density matrix

$$\rho(t) = |\psi_{S+E}\rangle\langle\psi_{S+E}| \otimes |O_0\rangle\langle O_0|. \quad (6.28)$$

The reduced density matrix of the system is

$$\rho_S(t) = \text{Tr}_{E+O} (|\psi_{S+E}\rangle\langle\psi_{S+E}| \otimes |O_0\rangle\langle O_0|) = \text{Tr}_E (|\psi_{S+E}\rangle\langle\psi_{S+E}|), \quad (6.29)$$

whose off-diagonal elements decay in time. If the observer O can observe the uninteresting subsystem (the whole uninteresting subsystem with the interaction H_M), the reduced density matrix of the system is now

$$\rho_{S'}(t) = \text{Tr}_{EO} (|\psi_{S+EO}\rangle\langle\psi_{S+EO}|) = \rho_S(t). \quad (6.30)$$

There exist measurement outcomes that the observer observes at the same moment the system is experiencing decoherence – they are

$$\rho_O = \text{Tr}_{S+E} (|\psi_{S+EO}\rangle\langle\psi_{S+EO}|). \quad (6.31)$$

Implementing the familiar spin 1/2 model here reveals the idea. Let the state of the system be

$$|\psi_S\rangle = |\uparrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_z\rangle + |\downarrow_z\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+_S\rangle + |-_S\rangle), \quad (6.32)$$

the state of the uninteresting subsystem

$$|\psi_E\rangle = \prod_{i=1}^N \otimes (a_i|+_E\rangle_i + b_i|-_E\rangle_i), \quad (6.33)$$

and the state of the measurement apparatus (or observer) that observes the uninteresting subsystem is

$$|O_0\rangle = \prod_{j=N+1}^{2N} \otimes |+_O\rangle_j. \quad (6.34)$$

Interactions between the system and uninteresting subsystem are expressed with the Hamilton operator

$$H_{S+E} = \hbar \sum_{k=1}^N g_k \sigma_k^z \otimes \sigma^z \prod_{k'=1, \neq k}^N \otimes 1_{k'}, \quad (6.35)$$

where g_k 's describe the interaction between system and k^{th} particle of the uninteresting subsystem. It does not matter what values g_k 's have – let them be random numbers in the first approximation. The model is similar to the ones presented in Articles IV and [166], except that in this model there also exists the observer that observes the uninteresting subsystem. Interactions between the observer and the uninteresting subsystem are:

$$\begin{aligned} H_{E+O} = & \sum_{k=1}^N (|+_E\rangle_k |+_O\rangle_k \langle+_O|_k \langle+_E|_k \\ & + |-_E\rangle_k |-_O\rangle_k \langle+_O|_k \langle-_E|_k + h.c.) \delta(t'), \end{aligned} \quad (6.36)$$

where the moment of time t' reveals the moment when the observer measures the uninteresting subsystem.

It is easily verified that with the interaction of $H_{S+E} + H_{E+O}$ from the initial state of $|\psi_S\rangle \otimes |\psi_E\rangle \otimes |O_0\rangle$ one gets the time evolution of the reduced density matrix

$$\begin{aligned} \rho_S(t) = & \frac{1}{2}|+_S\rangle\langle+_S| + \frac{1}{2}|-_S\rangle\langle-_S| \\ & + \left[\frac{1}{2} \prod_{k=1}^N (|a_k|^2 e^{-i2g_k t} + |b_k|^2 e^{i2g_k t}) |+_S\rangle\langle-_S| + h.c. \right], \quad (6.37) \end{aligned}$$

and it does not depend on the moment of time t' when the uninterested subsystem is measured. The natural conclusion is that in the presented model the time evolution of the reduced density matrix does not depend on whether the uninterested subsystem is measured or not, and that the system will experience decoherence even if the observer is able to observe the whole uninteresting subsystem. The real observer inside a closed system cannot prevent decoherence by observing degrees of freedom inside the system. Decoherence is a dynamical phenomenon that does not depend on the theoretical possibility for an arbitrary observer to observe arbitrary degrees of freedom. This is a logical truth that is valid for all closed systems, even for the whole physical reality or "universe".

One note about the spin model: an observer within the closed system can easily measure how decoherence is advancing via measuring the interesting system in spin x basis, because superposition in the z basis is *up* in the x basis. If the initial superposition in the z basis becomes a statistical mixture, then measurement outcomes of *down* begin to appear in the x basis. My model here is an oversimplification, whose purpose is not to model observation of the environment *perfectly*, but only to consider logical consequences. If an observer would perform *realistic* measurements to the degrees of freedom of "the environment", most probably it would affect the dynamics of the system – depending on, of course, what kind of measurement interaction there would be. In my example I chose a measurement interaction that does not contribute to the dynamics of the reduced density matrix, since it demonstrates nicely the role of an uninteresting subsystem (or the environment) in decoherence studies of closed systems.

The catch of the story presented in this section is that there is no reasonable argument for an overassumed role of an observer or an environment in decoherence studies, and scientists should be wary about the statements concerning the roles of observers and environments. Of course, the observer has a role, but it is a small supporting role that was demonstrated by Clever Chinchilla in Section 5.3.

The measurement scheme is analysed in more detail in [2].

Chapter 7

Conclusions

Finally, I present the most important concluding remarks with some discussion.

- Coherence is a conserved quantity.
- Philosophy and terminology are useful tools for a theoretical physicist. Vaguely defined concepts lead often to a situation where a part of scientific community talks about the trees and another part about the wood – even if they use the same word. In quantum physics, this happens at least with fundamental problems of decoherence, but also debates like "is quantum physics deterministic or not" fall into the same category. Moreover, ignorance about philosophy by theoretical physicists leads to ill-made philosophy of (quantum) physics, which results in various "interpretations of quantum physics". However, the birth of "interpretations of quantum physics" is also due to many philosophers (of physics) that do not master quantum physics, and thus philosophers have something to learn from physicists, too. A knowledge of the philosophy of science correlates strongly with a knowledge of the criteria for a scientific theory. All scientists should know the features of a scientific theory, and it is especially important for such theoretical scientists whose field has a wide abyss between theory and experimental results, bridged by only a few narrow bridges.

The presentation of terminology and metatheory of quantum physics is short in this thesis, but it should be appropriate enough. The topic is covered in more detail in Article [2] that is in preparation.

- Three important remarks about coherence itself:

(1) There are two different types of coherence (similarly to entropy): idealistic and realistic coherence. Studying idealistic coherence demands the so-called chinchilla perspective, i.e., the state of physical reality (including all measurement apparatuses, observers and so on) and its time evolution is "guessed correctly" without interacting with the physical reality. Now, the idealistic coherence and entropy are constants of motion, since the state of physical reality is always a pure state. The standpoint of the realistic coherence is acquired by coarse-graining the state of physical reality, thus resulting in a description about what observers totally correlated with the physical reality observe. If the physical reality (and the metatheory describing it) has true random processes this description contains possibilities weighted by probability amplitudes.

(2) There is a basis-set-independent way to define coherence.

(3) The possibility of recoherence does not nullify decoherence. If decoherence is understood as *the decay of off-diagonal elements of reduced density matrix*, then recoherence is *the increase of off-diagonal elements of the reduced density matrix*. All finite systems may experience Poincaré recurrence and thus recoherence, but it does not mean that they do not experience decoherence.

These three remarks defend the idea that decoherence is a valid and working concept to describe coherence decay phenomena also in closed (and finite) quantum systems.

- I propose an exact and functional way to quantify quantum coherence. Generally, coherence is approached by using some other possible quantifiable measures, such as decoherence time or coherence length. This kind of approach does not necessarily provide satisfactorily answers to questions about the nature of coherence – especially questions like "how much coherence (at a certain instant of time) does a particular system contain". Moreover, I present a couple of foundation stones of coherence theory. I hope that coherence theory will develop quickly, since it seems to enable better understanding about the behaviour of quantum physical systems.
- With coherence theory and my definition of coherence Ξ it is possible to derive, e.g., the form of decoherence time (a simple example system is presented in Article IV). An interesting feature appeared in the example, i.e., only seldom does coherence decay happen as the usually suggested exponential decay. This bolsters the view that,

in general, decoherence in "natural processes" is seldom plainly exponential.

Moreover, understanding coherence makes it possible to measure indirectly some properties of degenerate quantum systems, like scattering lengths and coupling strengths via measuring coherence and its time evolution. It would be very interesting to redo a part of previous theoretical Bose condensate studies applying the simple model for the environment and decoherence presented in Article III, and follow how the coherence behaves. Coherence is what enables the peculiar behaviour of quantum systems like, e.g., the collective behaviour of fermions (articles I and II). It may be that observed real measurement outcomes that deviate a bit from predictions of decoherenceless theory – that previously are assumed to be measurement errors or uncertainties in measurement – are explained by previously unmodelled weak decoherence mechanisms. Detailed research into this topic may lead to a better understanding of quantum physical measurements, better-modelled measurements and better measurement technology. There may even be applications in quantum informatics. Especially, the mutual entanglement $E = \Xi_{id} - \Xi_{re}$ may be useful in quantum information research.

- The practical side of heavy simulations taught me especially that while doing scientific computing with a laptop (on the kitchen table), one should not forget a chocolate bar for a couple of hours in the vicinity of the hot air vent of the laptop.

References

- [1] E. Schrödinger (1935). *Die gegenwärtige Situation in der Quantenmechanik*. Die Naturwissenschaften **23**, 807-812, 823-828, 844-849.
- [2] Alia Dannenberg, Riina Kosunen, and Anna Dannenberg (2011). *Understanding quantum coherence: metatheory and coherent terminology*. Unpublished.
- [3] J. K. Beatty and E. Young (2007). *Planet*. In: AccessScience@McGraw-Hill, <http://www.accessscience.com>, DOI 10.1036/1097-8542.521900.
- [4] J. Javanainen, M. Koštrun, Y. Zheng, A. Carmichael, U. Shrestha, P. Meinel, M. Mackie, O. Dannenberg, and K.-A. Suominen (2004). *Collective Molecule Formation in a Degenerate Fermi Gas via a Feshbach Resonance*. Physical Review Letters **92**, 200402.
- [5] M. Mackie, O. Dannenberg, J. Piilo, K.-A. Suominen, and J. Javanainen (2004). *New directions in degenerate dipolar molecules via collective association*. European Physical Journal D **31**, 273.
- [6] W. G. Pollard (2007). *Physics*. In: AccessScience@McGraw-Hill, <http://www.accessscience.com>, DOI 10.1036/1097-8542.514300.
- [7] M. Bunge (2007). *Scientific methods*. In: AccessScience@McGraw-Hill, <http://www.accessscience.com>, DOI 10.1036/1097-8542.607200.
- [8] L. M. Blumenthal and G. Cherlin (2007). *Logic*. In: AccessScience@McGraw-Hill, <http://www.accessscience.com>, DOI 10.1036/1097-8542.389200.
- [9] S. E. Stumpf (1989). *Philosophy: history & problems* (4th edition). New York: Mc Graw-Hill Book Company.
- [10] P. V. Spade (2006). *William of Ockham*. In: The Stanford Encyclopedia of Philosophy (Fall 2006 Edition), ed. E. N. Zalta, <http://plato.stanford.edu/archives/fall2006/entries/ockham/>.

- [11] A. Franklin (2007). *Experiment in Physics*. In: The Stanford Encyclopedia of Philosophy (Fall 2007 Edition), ed. E. N. Zalta. <http://plato.stanford.edu/archives/fall2007/entries/physics-experiment/>.
- [12] D. Stoljar (2005). *Physicalism*. In: The Stanford Encyclopedia of Philosophy (Winter 2005 Edition), ed. E. N. Zalta. <http://plato.stanford.edu/archives/win2005/entries/physicalism/>.
- [13] K. R. Popper (1963). *Conjectures and refutations: the growth of scientific knowledge* (especially Chapter 10). London: Routledge and Kegan Paul.
- [14] M. Bunge (2007). *Physical law*. In: AccessScience@McGraw-Hill, <http://www.accessscience.com>, DOI 10.1036/1097-8542.513800.
- [15] M. David (2005). *The Correspondence Theory of Truth*. In: The Stanford Encyclopedia of Philosophy (Fall 2005 Edition), ed. E. N. Zalta. <http://plato.stanford.edu/archives/fall2005/entries/truth-correspondence/>.
- [16] J. O. Young (2001). *The Coherence Theory of Truth*. In: The Stanford Encyclopedia of Philosophy (Summer 2001 Edition), ed. E. N. Zalta. <http://plato.stanford.edu/archives/sum2001/entries/truth-coherence/>.
- [17] R. Boyd (2002). *Scientific Realism*. In: The Stanford Encyclopedia of Philosophy (Summer 2002 Edition), ed. E. N. Zalta. <http://plato.stanford.edu/archives/sum2002/entries/scientific-realism/>.
- [18] T. Uebel (2006). *Vienna Circle*. In: The Stanford Encyclopedia of Philosophy (Fall 2006 Edition), ed. E. N. Zalta. <http://plato.stanford.edu/archives/fall2006/entries/vienna-circle/>.
- [19] R. Omnès (1994). *The Interpretation of Quantum Mechanics*. Princeton: Princeton University Press.
- [20] G. Berkeley (1710). *A treatise concerning the principles of human knowledge*. Reprint edition (1957). Indianapolis: Bobbs-Merrill.
- [21] G. Berkeley (1713). *Three dialogues between Hylas and Philonous: In opposition to sceptics and atheists*. Reprint edition (1954). Indianapolis: Bobbs-Merrill.

- [22] D. Dieks (1992). *Continuous wave function and discrete physical properties*. In: Erwin Schrödinger: philosophy and the birth of quantum mechanics. Gif-sur-Yvette Cedex, France: Editions Frontieres.
- [23] I. Niiniluoto (2002). *Johdatus tieteenfilosofiaan: käsitteen- ja teori-anmuodostus*. Keuruu: Otava.
- [24] M. R. Cohen and E. Nagel (1934). *An introduction to logic and scientific method*. London: Routledge and Kegan Paul.
- [25] E. Wüster (1979). *Einführung in die allgemeine Terminologielehre und terminologische Lexikographie*, 2 vol. New York: Springer.
- [26] H. Suonuuti (1997). *Guide to terminology*. Helsinki: Tekniikan sanastokeskus.
- [27] T. Horgan (1983). *Supervenience and Microphysics*. Pacific Philosophical Quarterly **63**, 29-43.
- [28] D. Lewis (1983). *New Work for a Theory of Universals*. Australasian Journal of Philosophy, **61**(4), 343.
- [29] D. Lewis (1986). *On the Plurality of Worlds*. Oxford: Blackwell.
- [30] R. Smullyan (1978). *What is the name of this book?* New York: Prentice-Hall. *Mikä tämän kirjan nimi on?* Suomentanut H. Salminen (1999). Helsinki: Terra Cognita.
- [31] R. Juti (2001). *Johdatus metafysiikkaan*. Helsinki: Gaudeamus.
- [32] K. Gödel (1931). *Über formal unentscheidbare Sätze der Principia Mathematica und verwandter Systeme, I*. Monatshefte für Mathematik und Physik, **38**, 173; English translation in: From Frege to Gödel: A Source Book in Mathematical Logic, 1879-1931, ed. J. van Heijenoort. Harvard: Harvard University Press (2002).
- [33] R. M. Smullyan (2007). *Gödel's theorem*. In: Access-Science@McGraw-Hill, <http://www.accessscience.com>, DOI 10.1036/1097-8542.757437.
- [34] J. Renn, T. Sauer, and J. Stachel (1997). *The Origin of Gravitational Lensing: A Postscript to Einstein's 1936 Science paper*. Science **275**, 184;
P. Schneider, J. Ehlers, and E. E. Falco (1992). *Gravitational Lenses*. Berlin: Springer.

- [35] L. Sklar (1974). *Space, Time, and Spacetime*, mainly Ch. V. California: University of California Press.
- [36] E. Castellani (2003). *Symmetry and equivalence*. In: *Symmetries in Physics: Philosophical Reflections*, ed. K. Brading and E. Castellani. Cambridge: Cambridge University Press.
- [37] K. Brading and E. Castellani (2008). *Symmetry and Symmetry Breaking*. In: *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Spring 2008 Edition), ed. E. N. Zalta. <http://plato.stanford.edu/archives/spr2008/entries/symmetry-breaking/>.
- [38] *McGraw-Hill Dictionary of Scientific and Technical Terms*, 10th Edition. AccessScience@McGraw-Hill, <http://www.accessscience.com> (September 28 2008).
- [39] J. Locke (1690). *An essay concerning human understanding*. Reprint edition (1959). New York: Dover.
- [40] J. Preskill (1998). *Quantum Information and Computation (lecture notes for physics 229)*. <http://www.theory.caltech.edu/~preskill/ph229>.
- [41] E. Noether (1918). *Invariante Variationsprobleme*. Nachr. d. König. Gesellsch. d. Wiss. zu Göttingen, Math-phys. Klasse, 235-257; English translation in: M. A. Tavel (1971). *Transport Theory and Statistical Physics* **1**, 183.
- [42] G. Brida, E. Cagliero, G. Falzetta, M. Genovese, M. Gramegna, and C. Novero (2002). *Experimental realization of a first test of de Broglie-Bohm theory*. *Journal of Physics B* **35**, 4751.
- [43] G. Brida, E. Cagliero, M. Genovese, and M. Gramegna (2004). *Reply to Comment on 'Experimental realization of a first test of de Broglie-Bohm theory'*. *Journal of Physics B* **37**, 3781.
- [44] M. Genovese, G. Brida, M. Gramegna, F. Piacentini, E. Predazzi, and I. Ruo-Berchera (2007). *Experimental tests of hidden variable theories from dBB to stochastic electrodynamics*. *Journal of Physics: Conference Series* **67**, 012047.
- [45] L. Sklar (1993). *Physics and Chance: Philosophical Issues in the Foundations of Statistical Mechanics*. Cambridge: Cambridge University Press.

- [46] W. H. Zurek (2007). *Superposition principle*. In: AccessScience@McGraw-Hill, <http://www.accessscience.com>, DOI 10.1036/1097-8542.669800.
- [47] A. Gallois (2005). *Identity Through Time*. In: The Stanford Encyclopedia of Philosophy (Spring 2005 Edition), ed. E. N. Zalta. <http://plato.stanford.edu/archives/spr2005/entries/identity-time/>.
- [48] J. D. Bekenstein (1981a). *Universal upper bound on the entropy-to-energy ratio for bounded systems*. Physical Review D **23**, 287.
- [49] J. D. Bekenstein (1981b). *Energy cost of information transfer*. Physical Review Letters **46**, 623.
- [50] J. D. Bekenstein (1984). *Entropy content and information flow in systems with limited energy*. Physical Review D **30**, 1669.
- [51] J.-W. Pan, D. Bouwmeester, M. Daniell, H. Weinfurter, and A. Zeilinger (2000). *Experimental test of quantum nonlocality in three-photon Greenberger-Horne-Zeilinger entanglement*. Nature **403**, 515.
- [52] S. Stenholm and K.-A. Suominen (2005). *Quantum Approach to Informatics*. Hoboken NJ: John Wiley & Sons.
- [53] E. Schrödinger (1953). *What is matter?* Scientific American **189**, 52.
- [54] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollet, and R. G. Hulet (1995). *Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions*. Physical Review Letters **75**, 1687.
- [55] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell (1995). *Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor*. Science **269**, 198.
- [56] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle (1995). *Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms*. Physical Review Letters **75**, 3969.
- [57] D. G. Fried, T. C. Killian, L. Willmann, D. Landhuis, S. C. Moss, D. Kleppner, and T. J. Greytak (1998). *Bose-Einstein Condensation of Atomic Hydrogen*. Physical Review Letters **81**, 3811.
- [58] F. P. D. Santos, J. Lonard, J. Wang, C. J. Barrelet, F. Perales, E. Rasel, C. S. Unnikrishnan, M. Leduc, and C. Cohen-Tannoudji (2001). *Bose-Einstein Condensation of Metastable Helium*. Physical Review Letters **86**, 3459.

- [59] A. Robert, O. Sirjean, A. Browaeys, J. Poupard, S. Nowak, S. Boiron, C. I. Westbrook, and A. Aspect (2001). *A Bose-Einstein Condensate of Metastable Atoms*. *Science* **292**, 461.
- [60] G. Modugno, G. Ferrari, G. Roati, R. J. Brecha, A. Simoni, and M. Inguscio (2001). *Bose-Einstein Condensation of Potassium Atoms by Sympathetic Cooling*. *Science* **294**, 1320.
- [61] S. L. Cornish, N. R. Claussen, J. L. Roberts, E. A. Cornell, and C. E. Wieman (2001). *Stable ^{85}Rb Bose-Einstein Condensates with Widely Tunable Interactions*. *Physical Review Letters* **85**, 1795.
- [62] T. Weber, J. Herbig, M. Mark, H.-C. Nägerl, and R. Grimm (2003). *Bose-Einstein Condensation of Cesium*. *Science* **299**, 232.
- [63] Y. Takasu, K. Maki, K. Komori, T. Takano, K. Honda, M. Kumakura, T. Yabuzaki, and Y. Takahashi (2003). *Spin-Singlet Bose-Einstein Condensation of Two-Electron Atoms*. *Physical Review Letters* **91**, 040404.
- [64] A. Griesmaier, J. Werner, S. Hensler, J. Stuhler, and T. Pfau (2005). *Bose-Einstein Condensation of Chromium*. *Physical Review Letters* **94**, 160401.
- [65] M. R. Andrews, C. G. Townsend, H.-J. Miesner, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle (1997). *Observation of Interference Between Two Bose Condensates*. *Science* **275**, 637.
- [66] J. Javanainen and M. Mackie (1999). *Coherent photoassociation of a Bose-Einstein condensate*. *Physical Review A* **59**, R3186.
- [67] D. J. Heinzen, R. Wynar, P. D. Drummond, and K. V. Kheruntsyan (2000). *Superchemistry: Dynamics of Coupled Atomic and Molecular Bose-Einstein Condensates*. *Physical Review Letters* **84**, 5029.
- [68] A. Vardi, V. A. Yurovsky, and J. R. Anglin (2001). *Quantum effects on the dynamics of a two-mode atom-molecule Bose-Einstein condensate*. *Physical Review A* **64**, 063611.
- [69] M. R. Matthews, B. P. Anderson, P. C. Haljan, D. S. Hall, C. E. Wieman, and E. A. Cornell (1999). *Vortices in a Bose-Einstein Condensate*. *Physical Review Letters* **83**, 2498.

- [70] J. R. Abo-Shaeer, C. Raman, J. M. Vogels, and W. Ketterle (2001). *Observation of Vortex Lattices in Bose-Einstein Condensates*. *Science* **292**, 476.
- [71] M. W. Zwierlein, J. R. Abo-Shaeer, A. Schirotzek, C. H. Schunck, and W. Ketterle (2005). *Vortices and superfluidity in a strongly interacting Fermi gas*. *Nature* **435** 1047.
- [72] P. D. Drummond, K. V. Kheruntsyan, and H. He (1998). *Coherent Molecular Solitons in Bose-Einstein Condensates*. *Physical Review Letters* **81**, 3055.
- [73] B. P. Anderson, P. C. Haljan, C. A. Regal, D. L. Feder, L. A. Collins, C. W. Clark, and E. A. Cornell (2001). *Watching Dark Solitons Decay into Vortex Rings in a Bose-Einstein Condensate*. *Physical Review Letters* **86**, 2926.
- [74] E. Cartlidge (2002). *Tantalizing evidence for molecular condensation*. *Physics World*, May 30, 2002.
- [75] M. Kořtrun, M. Mackie, R. Côté, and J. Javanainen (2000). *Theory of coherent photoassociation of a Bose-Einstein condensate*. *Physical Review A* **62**, 063616.
- [76] S. Jochim, M. Bartenstein, A. Altmeyer, G. Hendl, S. Riedl, C. Chin, J. H. Denschlag, and R. Grimm (2003). *Bose-Einstein Condensation of Molecules*. *Science* **302**, 2101.
- [77] M. Greiner, C. A. Regal, and D. S. Jin (2003). *Emergence of a molecular Bose-Einstein condensate from a Fermi gas*. *Nature* **426** 537.
- [78] M. W. Zwierlein, C. A. Stan, C. H. Schunck, S. M. F. Raupach, S. Gupta, Z. Hadzibabic, and W. Ketterle (2003). *Observation of Bose-Einstein Condensation of Molecules*. *Physical Review Letters* **91**, 250401.
- [79] D. J. Harter, P. Narum, M. G. Raymer, and R. W. Boyd (1981). *Four-Wave Parametric Amplification of Rabi Sidebands in Sodium*. *Physical Review Letters* **46**, 1192.
- [80] P. S. Julienne, K. Burnett, Y. B. Band, and W. C. Stwalley (1998). *Stimulated Raman molecule production in Bose-Einstein condensates*. *Physical Review A* **58**, R797.

- [81] J. Weiner, V. S. Bagnato, S. Zilio, and P. S. Julienne (1999). *Experiments and theory in cold and ultracold collisions*. Reviews of Modern Physics **71**, 1.
- [82] J. J. Hope and M. K. Olsen (2001). *Quantum Superchemistry: Dynamical Quantum Effects in Coupled Atomic and Molecular Bose-Einstein Condensates*. Physical Review Letters **86**, 3220.
- [83] J. Javanainen and M. Mackie (2002). *Rate Limit for Photoassociation of a Bose-Einstein Condensate*. Physical Review Letters **88**, 090403.
- [84] K. Góral, M. Gajda, and K. Rzążewski (2001). *Multimode Dynamics of a Coupled Ultracold Atomic-Molecular System*. Physical Review Letters **86**, 1397.
- [85] M. Holland, J. Park, and R. Walser (2001). *Formation of Pairing Fields in Resonantly Coupled Atomic and Molecular Bose-Einstein Condensates*. Physical Review Letters **86**, 1915.
- [86] L. Allen and J. H. Eberly (1975). *Optical Resonance and Two-Level Atoms*. New York: Wiley.
- [87] R. Dum, J. I. Cirac M. Lewenstein, and P. Zoller (1998). *Creation of Dark Solitons and Vortices in Bose-Einstein Condensates*. Physical Review Letters **80**, 2972.
- [88] J. Calsamiglia, M. Mackie, and K.-A. Suominen (2001). *Superposition of Macroscopic Numbers of Atoms and Molecules*. Physical Review Letters **87**, 160403.
- [89] J. Katriel and N. Moiseyev (1983). *Approximate and exact treatments of second-harmonic generation: Regular vs "stochastic" behavior*. Journal of Chemical Physics **78**, 876.
- [90] B. Yurke and D. Stoler (1986). *Generating Quantum Mechanical Superpositions of Macroscopically Distinguishable States via Amplitude Dispersion*. Physical Review Letters **57**, 13.
- [91] B. Yurke and D. Stoler (1987). *Quantum behavior of a four-wave mixer operated in a nonlinear regime*. Physical Review A **35**, 4846.
- [92] D. F. Walls and C. T. Tindle (1972). *Nonlinear quantum effects in optics*. Journal of Physics A **5**, 534.

- [93] A. G. Truscott, K. E. Strecker, W. I. McAlexander, G. B. Partridge, and R. G. Hulet (2001). *Observation of Fermi Pressure in a Gas of Trapped Atoms*. Science **291**, 2570.
- [94] F. Schreck, G. Ferrari, K. L. Corwin, J. Cubizolles, L. Khaykovich, M.-O. Mewes, and C. Salomon (2001). *Sympathetic cooling of bosonic and fermionic lithium gases towards quantum degeneracy*. Physical Review A **64**, 011402(R).
- [95] G. Modugno, G. Roati, F. Riboli, F. Ferlaino, R. J. Brecha, and M. Inguscio (2002). *Collapse of a Degenerate Fermi Gas*. Science **297**, 2240.
- [96] H.-J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn, M. R. Andrews, D. S. Durfee, S. Inouye, and W. Ketterle (1998). *Bosonic Stimulation in the Formation of a Bose-Einstein Condensate*. Science **279**, 1005.
- [97] E. P. Wigner (1948). *On the Behavior of Cross Sections Near Thresholds*. Physical Review **73**, 1002.
- [98] K. M. Ervin (2001). *Experimental Techniques in Gas-Phase Ion Thermochemistry*. Chemical Review **101**, 391.
- [99] C. A. Regal, C. Ticknor, J. L. Bohn, and D. S. Jin (2003). *Creation of ultracold molecules from a Fermi gas of atoms*. Nature **424**, 47.
- [100] K. E. Strecker, G. B. Partridge, and R. G. Hulet (2003). *Conversion of an Atomic Fermi Gas to a Long-Lived Molecular Bose Gas*. Physical Review Letters **91**, 080406.
- [101] P. Marte, P. Zoller, and J. L. Hall (1991). *Coherent atomic mirrors and beam splitters by adiabatic passage in multilevel systems*. Physical Review A **44**, R4118.
- [102] N. V. Vitanov, K.-A. Suominen, and B. W. Shore (1999). *Creation of coherent atomic superpositions by fractional stimulated Raman adiabatic passage*. Journal of Physics B **32**, 4535.
- [103] A. O. Caldeira and A. J. Leggett (1983). *Path integral approach to quantum Brownian motion*. Physica A **121**, 587;
A. O. Caldeira and A. J. Leggett (1985). *Influence of damping on quantum interference: An exactly soluble model*. Physical Review A **31**, 1059.

- [104] W. G. Unruh and W. H. Zurek (1989). *Reduction of a wave packet in quantum Brownian motion*. Physical Review D **40**, 1071.
- [105] W. H. Zurek (1991). *Decoherence and the transition from quantum to classical*. Physics Today **44**(10), 36.
- [106] B. L. Hu, J. P. Paz, and Y. Zhang (1992). *Quantum Brownian motion in a general environment: exact master equation with nonlocal dissipation and colored noise*. Physical Review D **45**, 2843.
- [107] J. R. Anglin, R. Laflamme, W. H. Zurek, and J. P. Paz (1995). *Decoherence and recoherence in an analogue of the black hole information paradox*. Physical Review D **52**, 2221.
- [108] M. Schlosshauer (2004). *Decoherence, the measurement problem, and interpretations of quantum mechanics*. Reviews of Modern Physics **76**, 1267.
- [109] M. Schlosshauer (2005). *Self-induced decoherence approach: Strong limitations on its validity in a simple spin bath model and on its general physical relevance*. Physical Review A **72**, 012109.
- [110] M. Brune, E. Hagley, J. Dreyer, X. Maître, A. Maali, C. Wunderlich, J.-M. Raimond, and S. Haroche (1996). *Observing the progressive decoherence of the "meter" in a quantum measurement*. Physical Review Letters **77**, 4887.
- [111] M. C. Nemes (2004). *Introduction: Experimental and Theoretical Status of Decoherence*. In: Decoherence and Entropy in Complex Systems, edited by H.-T. Elze. Heidelberg: Springer-Verlag; and references therein.
- [112] H. F. Dowker and J. J. Halliwell (1992). *Quantum mechanics of history: The decoherence functional in quantum mechanics*. Physical Review D **46**, 1580.
- [113] M. Gell-Mann and J. B. Hartle (1993). *Classical equations for quantum systems*. Physical Review D **47**, 3345.
- [114] T. A. Brun and J. J. Halliwell (1996). *Decoherence of hydrodynamic histories: A simple spin model*. Physical Review D **54**, 2899.
- [115] T. A. Brun and J. B. Hartle (1999). *Classical dynamics of the quantum harmonic chain*. Physical Review D **60**, 123503.

- [116] J. J. Halliwell (2004). *Some Recent Developments in the Decoherent Histories Approach to Quantum Theory*. In: *Decoherence and Entropy in Complex Systems*, edited by H.-T. Elze. Heidelberg: Springer-Verlag.
- [117] M. Castagnino and R. Laura (1997). *Minimal irreversible quantum mechanics: Pure-state formalism*. *Physical Review A* **56**, 108;
M. Castagnino and R. Laura (2000). *Functional Approach to Quantum Decoherence and the Classical Final Limit: The Mott and Cosmological Problems*. *International Journal of Theoretical Physics* **39**, 1737;
M. Castagnino and R. Laura (2000). *Functional approach to quantum decoherence and the classical final limit*. *Physical Review A* **62**, 022107.
- [118] R. Laura and M. Castagnino (1998). *Functional approach for quantum systems with continuous spectrum*. *Physical Review E* **57**, 3948;
R. Laura and M. Castagnino (1998). *Minimal irreversible quantum mechanics: The mixed states and the diagonal singularity*. *Physical Review A* **57**, 4140.
- [119] M. Castagnino (1999). *The Classical Regime of a Quantum Universe Obtained Through a Functional Method*. *International Journal of Theoretical Physics* **38**, 1333.
- [120] R. Laura, M. Castagnino, and R. I. Betan (1999). *Perturbative method for generalized spectral decompositions*. *Physica A* **271**, 357.
- [121] M. Castagnino and O. Lombardi (2003). *The Self-Induced Approach to Decoherence in Cosmology*. *International Journal of Theoretical Physics* **42**, 1281;
M. Castagnino and O. Lombardi (2004). *Self-induced decoherence: a new approach*. *Studies in History and Philosophy of Modern Physics* **35**, 73;
M. Castagnino and O. Lombardi (2005). *Decoherence time in self-induced decoherence*. *Physical Review A* **72**, 012102.
- [122] D. Dieks (1989). *Resolution of the measurement problem through decoherence of the quantum state*. *Physics Letters A* **142**, 439.
- [123] H. Krips (2007). *Measurement in Quantum Theory*. In: *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Fall 2007 Edition), ed. E. N. Zalta. <http://plato.stanford.edu/archives/fall2007/entries/qt-measurement/>.
- [124] A. Byrne and N. Hall (1999). *Chalmers on Consciousness and Quantum Mechanics*. *Philosophy of Science* **66**, 370.

- [125] G. Ghirardi (2007). *Collapse Theories*. In: The Stanford Encyclopedia of Philosophy (Fall 2007 Edition), ed. E. N. Zalta.
<http://plato.stanford.edu/archives/fall2007/entries/qm-collapse/>.
- [126] S. Goldstein (1998). *Quantum Theory Without Observers*. *Physics Today* **51**(3), 42, **51**(4), 38.
- [127] M. Jammer (1974). *The Philosophy of Quantum Mechanics*. New York: Wiley.
- [128] H. Everett III (1957). "Relative State" Formalism of Quantum Mechanics. *Reviews of Modern Physics* **29**, 454; Reprinted in: *The Many-Worlds Interpretation of Quantum Mechanics*, ed. B. de Witt, and R. N. Graham (1973). Princeton: Princeton University Press.
- [129] H. Everett III (1973). *The Theory of the Universal Wave Function*. In: *The Many-Worlds Interpretation of Quantum Mechanics*, ed. B. de Witt, and R. N. Graham. Princeton: Princeton University Press.
- [130] B. de Witt (1973). *The Many-Universes Interpretation of Quantum Mechanics*. In: *The Many-Worlds Interpretation of Quantum Mechanics*, ed. B. de Witt, and R. N. Graham. Princeton: Princeton University Press.
- [131] D. Deutsch (1997). *The Fabric of Reality*, London: The Penguin Press; *Todellisuuden rakenne* (suom. Kimmo Pietiläinen), Vaasa: Terra Cognita.
- [132] J. A. Barrett (2003). *Everett's Relative-State Formulation of Quantum Mechanics*. In: The Stanford Encyclopedia of Philosophy (Spring 2003 Edition), ed. E. N. Zalta.
<http://plato.stanford.edu/archives/spr2003/entries/qm-everett/>.
- [133] R. B. Griffiths (1984). *Consistent Histories and the Interpretation of Quantum Mechanics*. *Journal of Statistical Physics* **36**, 219.
- [134] R. Omnès (1988). *Logical Reformulation of Quantum Mechanics. I. Foundations*. *Journal of Statistical Physics* **53**, 893;
 R. Omnès (1988). *Logical Reformulation of Quantum Mechanics. II. Interferences and the Einstein-Podolsky-Rosen Experiment*. *Journal of Statistical Physics* **53**, 933;
 R. Omnès (1988). *Logical Reformulation of Quantum Mechanics. III. Classical Limit and Irreversibility*. *Journal of Statistical Physics* **53**, 957.

- [135] M. Gell-Mann and J. B. Hartle (1990). *Quantum Mechanics in the Light of Quantum Cosmology*. In: Complexity, Entropy, and the Physics of Information, ed. W. Zurek. Reading: Addison-Wesley; Also in: Proceedings of the 3rd International Symposium on Quantum Mechanics in the Light of New Technology, eds. S. Kobayashi, H. Ezawa, Y. Murayama, and S. Nomura. Physical Society of Japan.
- [136] F. Dowker and A. Kent (1996). *On the consistent histories approach to quantum mechanics*. Journal of Statistical Physics **82**, 1575.
- [137] A. Kent (1996). *Quasiclassical dynamics in a closed quantum system*. Physical Review A **54**, 4670.
- [138] A. Kent (1997). *Consistent sets yield contrary inferences in quantum theory*. Physical Review Letters **78**, 2874.
- [139] A. Bassi and G. C. Ghirardi (1999). *Can the decoherent histories description of reality be considered satisfactory?* Physics Letters A **257**, 247.
- [140] M. Reed and B. Simon (1975). *Fourier Analysis, Self-Adjointness*. New York: Academic Press.
- [141] M. Mackie (2003). *Anomalous Frequency Shift in the Photoassociation Spectrum of a Bose-Einstein Condensate*. Physical Review Letters **91**, 173004.
- [142] P. Naidon and F. Masnou-Seeuws (2003). *Pair dynamics in the formation of molecules in a Bose-Einstein condensate*. Physical Review A **68**, 033612.
- [143] Y. P. Huang and M. G. Moore (2006). *Creation, detection, and decoherence of macroscopic quantum superposition states in double-well Bose-Einstein condensates*. Physical Review A **73**, 023606.
- [144] P. Meystre and M. Sargent III (1999). *Elements of Quantum Optics* (3rd edition). Heidelberg: Springer-Verlag.
- [145] D. F. Walls and G. J. Milburn (1994). *Quantum Optics*. Heidelberg: Springer-Verlag.
- [146] H. J. Carmichael (1999). *Statistical Methods in Quantum Optics 1: Master Equations and Fokker-Planck Equations*. Heidelberg: Springer-Verlag.

- [147] H.-B. Breuer and F. Petruccione (2002). *The Theory of Open Quantum Systems*. Oxford: Oxford University Press.
- [148] P. O. Fedichev, Yu. Kagan, G. V. Shlyapnikov, and J. T. M. Walraven (1996). *Influence of Nearly Resonant Light on the Scattering Length in Low-Temperature Atomic Gases*. Physical Review Letters **77**, 2913.
- [149] J. L. Bohn and P. S. Julienne (1999). *Semianalytic theory of laser-assisted resonant cold collisions*. Physical Review A **60**, 414.
- [150] J. M. Gerton, B. J. Frew, and R.G. Hulet (2001). *Photoassociative frequency shift in a quantum degenerate gas*. Physical Review A **64**, 053410.
- [151] C. McKenzie, J. H. Denschlag, H. Häffner, A. Browaeys, L. E. E. de Araujo, F. K. Fatemi, K. M. Jones, J. E. Simsarian, D. Cho, A. Simoni, E. Tiesinga, P. S. Julienne, K. Helmerson, P. D. Lett, S. L. Rolston, and W. D. Phillips (2002). *Photoassociation of Sodium in a Bose-Einstein Condensate*. Physical Review Letters **88**, 120403.
- [152] I. D. Prodan, M. Pichler, M. Junker, R. G. Hulet, and J. L. Bohn (2003). *Intensity Dependence of Photoassociation in a Quantum Degenerate Atomic Gas*. Physical Review Letters **91**, 080402.
- [153] M. Mackie, A. Collin, and J. Javanainen (2005). *Comment on "Stimulated Raman adiabatic passage from an atomic to a molecular Bose-Einstein condensate"*. Physical Review A **71**, 017601;
P. D. Drummond, K. V. Kherunstyan, D. J. Heinzen, and R. Wynar (2005). *Reply to "Comment on 'Stimulated Raman adiabatic passage from an atomic to a molecular Bose-Einstein condensate'"*. Physical Review A **71**, 017602.
- [154] M. Mackie, K. Härkönen, A. Collin, K.-A. Suominen, and J. Javanainen (2004). *Improved efficiency of stimulated Raman adiabatic passage in photoassociation of a Bose-Einstein condensate*. Physical Review A **70**, 013614.
- [155] P. D. Drummond, K. V. Kherunstyan, D. J. Heinzen, and R. H. Wynar (2002). *Stimulated Raman adiabatic passage from an atomic to a molecular Bose-Einstein condensate*. Physical Review A **65**, 063619.
- [156] R. H. Wynar, R. S. Freeland, D. J. Han, C. Ryu, and D. J. Heinzen (2000). *Molecules in a Bose-Einstein Condensate*. Science **287**, 1016.

- [157] J. L. Bohn and P. S. Julienne (1997). *Prospects for influencing scattering lengths with far-off-resonant light*. Physical Review A **56**, 1486.
- [158] F. K. Fatemi, K. M. Jones, and P. D. Lett (2000). *Observation of Optically Induced Feshbach Resonances in Collisions of Cold Atoms*. Physical Review Letters **85**, 4462.
- [159] M. Theis, G. Thalhammer, K. Winkler, M. Hellwig, G. Ruff, R. Grimm, and J. H. Denschlag (2004). *Tuning the Scattering Length with an Optically Induced Feshbach Resonance*. Physical Review Letters **93**, 123001.
- [160] G. Thalhammer, M. Theis, K. Winkler, R. Grimm, and J. H. Denschlag (2005). *Inducing an optical Feshbach resonance via stimulated Raman coupling*. Physical Review A **71**, 033403.
- [161] A. E. Leanhardt, T. A. Pasquini, M. Saba, A. Schirotzek, Y. Shin, D. Kielpinski, D. E. Pritchard, and W. Ketterle (2003). *Cooling Bose-Einstein Condensates Below 500 Picokelvin*. Science **301**, 1513.
- [162] D. A. R. Dalvit, J. Dziarmaga, and W. H. Zurek (2000). *Decoherence in Bose-Einstein condensates: Towards bigger and better Schrödinger cats*. Physical Review A **62**, 013607.
- [163] R. G. Winter and A. M. Steinberg (2007). *Coherence*. In: AccessScience@McGraw-Hill, <http://www.accessscience.com>, DOI 10.1036/1097-8542.146900.
- [164] J. P. Paz, S. Habib, and W. H. Zurek (1993). *Reduction of the wave packet: Preferred observable and decoherence time scale*. Physical Review D **47**, 488.
- [165] W. H. Zurek (1981). *Pointer basis of quantum apparatus: Into what mixture does the wave packet collapse?* Physical Review D **24**, 1516.
- [166] W. H. Zurek (1982). *Environment-induced superselection rules*. Physical Review D **26**, 1862.
- [167] F. H. Gaioli, E. T. G. Alvarez, and J. Guevara (1997). *Quantum Brownian motion*. International Journal of Theoretical Physics **36**, 2167.
- [168] B. M. Garraway and K.-A. Suominen (1995). *Wave packet dynamics: New physics and chemistry in femto-time*. Reports on Progress in Physics **58**, 365-419.

- [169] S. Lloyd (2002). *Computational Capacity of the Universe*. Physical Review Letters **88**, 237901.
- [170] H. B. G. Casimir and D. Polder (1948). *The Influence of Retardation on the London-van der Waals Forces*. Physical Review **73**, 360.
- [171] S. K. Lamoreaux (1997). *Demonstration of the Casimir Force in the 0.6 to 6 μm Range*. Physical Review Letters **78**, 5;
S. K. Lamoreaux (1998). *Erratum: Demonstration of the Casimir Force in the 0.6 to 6 μm Range [Phys. Rev. Lett. 78, 5 (1997)]*. Physical Review Letters **81**, 5475.
- [172] D. M. Greenberger and A. Ya'sin (1986). In: *New Techniques and Ideas in Quantum Measurement Theory*, ed. D. M. Greenberger. New York: New York Academy of Science.
- [173] P. Ehrenfest and T. Ehrenfest (1959). *The Conceptual Foundations of the Statistical Approach in Mechanics*. Ithaca NY: Cornell University Press.
- [174] J. W. Gibbs (1960). *Elementary Principles in Statistical Mechanics*. New York: Dover.
- [175] R. Peierls (1979). *Surprises in theoretical physics*. Princeton: Princeton University Press.
- [176] M. Redhead (1995). *From Physics to Metaphysics*. Cambridge: Cambridge University Press.
- [177] S. Brush (2003). *Kinetic Theory of Gases*. London: Imperial College Press.
- [178] W. F. Jaep and F. H. Rockett (2007). *Entropy*. In: AccessScience@ McGraw-Hill, <http://www.accessscience.com>, DOI 10.1036/1097-8542.235400.
- [179] L. Boltzmann (1896). *Entgegnung auf die wärmetheoretischen Betrachtungen des Hrn. E. Zermelo*. Annalen der Physik und Chemie **57**, 773; Reprinted and translated in [177], 393-402.
- [180] P. Jizba (2004). *Information Theory and Generalized Statistics*. In: *Decoherence and Entropy in Complex Systems*, edited by H.-T. Elze. Heidelberg: Springer-Verlag.

- [181] Y. S. Weinstein, C. Tsallis, and S. Lloyd (2004). *On the Emergence of Nonextensivity at the Edge of Quantum Chaos*. In: *Decoherence and Entropy in Complex Systems*, edited by H.-T. Elze. Heidelberg: Springer-Verlag.
- [182] J. S. Bell (1975). *On the wave packet reduction in the Coleman-Hepp model*. *Helvetica Physica Acta* **48**, 93-98.
- [183] J. P. Paz and W. H. Zurek (1993). *Environment-induced decoherence, classicality, and consistency of quantum histories*. *Physical Review D* **48**, 2728.

Accompanying articles

In the pdf version of the thesis, accompanying articles are omitted. Their bibliographic information is on page 8.

**Suomeksi:
Koherenssiteorian
perusteista**

Sisältö

Kiitokset	184
Tiivistelmä	187
Väitöskirjaan liittyvät artikkelit	188
Väitöskirjaan liittyvien artikkeleiden tiivistelmät	189
Väittelijän osuus artikkeleissa	190
1 Aluksi	191
2 Johdatus keskeisiin käsitteisiin ja kvanttifysiikan metateoriaan	195
2.1 Kvanttifysiikan metateoriasta	196
2.2 Käsitteiden määrittelystä ja terminologiasta	199
2.3 Keskeisten käsitteiden määritelmät ja selitteet	200
3 Tunnetuista ja havaituista koherenssi-ilmiöistä	217
3.1 Yleistä teoriaa Bose-kondensaateista	218
3.2 Atomi- ja molekyylikondensaateista, Rabi-oskillaatioista ja fotoassosiaatiosta	222
3.3 Makroskooppinen superpositio atomi- ja molekyylikondensaattilojen välillä	226
3.4 Degeneroituneiden fermionisysteemien kollektiivisesta käytöksestä	230
4 Dekoherenssi	237
4.1 Monihistoriatulkinta ja sen ongelmat	239
4.2 Itseaiheutetun dekoherenssin skeema	243
4.3 Dekoherenssi avoimessa systeemissä: ”roistodekoherenssin” vaikutus makroskooppisen superpositiotilan syntymiseen atomi- ja molekyylikondensaattilojen välille	244
5 Yleistä koherenssiteoriaa	259
5.1 Koherenssin dynamiikasta	262
5.2 Entropia	267

5.2.1	Lyhyt johdanto entropian olemukseen	267
5.2.2	Entropian ongelman lyhyt historia	268
5.2.3	Entropia ja koherenssi	270
5.3	Idealistinen ja realistinen näkökulma	272
5.4	Peruslauseita ja oletuksia	276
5.5	Koherenssiteorian soveltamisesta käytäntöön	277
6	Suljetun systeemin dekoherenssista	279
6.1	Spin $1/2$ -malli	279
6.2	Simulaatiot ja tulokset	282
6.2.1	Simulaatioiden rakenne	282
6.2.2	Yleistä tuloksista	284
6.2.3	Vuorovaikutuksista ja dekoherenssista eri kannoissa	286
6.2.4	Poincarén paluu	287
6.2.5	Koherenssin vähenemisen riippuminen systeemin pa- rametreista	289
6.3	Dekoherenssi, ympäristö ja havaitsija	292
7	Lopuksi	297
	Kirjallisuutta	300

Kiitokset

Minulla on syytä olla kiitollinen monille tahoille siitä, että väitöstutkimukseni on nyt edennyt loppumetreille. Prof. Kalle-Antti Suominen työni ohjaajana ja Fysiikan tutkimuslaitoksella toimineen Kvanttioptiikan ja laserfysiikan tutkimusryhmän johtajana on vaikuttanut niin moniin väitöstutkimuksen käytännön asioihin kuin teoreettisiin tutkimusongelmiin. Minulla on ollut ilo työskennellä PhD Matt Mackien kanssa monissa, aluksi itselleni vieraisissa fotoassosiaatioon ja kondensaatteihin liittyneissä projekteissa. Ehkä kuitenkin tärkeintä, mitä Mattilta olen oppinut, on tieteellisen metodin soveltaminen käytäntöön. Meillä oli usein erimielisyyksiä dekoherenssiin ja degeneroituneisiin kvanttisysteemeihin liittyneissä kysymyksissä, joita tuli usein ratkottua siten, että väittelimme asioista useita tunteja. Todennäköisin totuus oli löytynyt silloin, jos argumentaation seurauksena lopulta olimme asiasta samaa mieltä. Tämä edesauttoi mahdollisten loogisten sudenkuoppien välttämistä tutkimusta tehdessä, kun kumpikaan perfektionistisuuttaan ja loogisuuttaan ei kyennyt myöntymään ennen kuin oli vakuuttunut ja ymmärtänyt asian. Näitä väitteilyitä kaipaam todella. Lisäksi opin Mattilta, kuinka tiedeyhteisö toimii; erityisesti sen, että totuus itsessään on mykkä – se tarvitsee kovaäänisen mutta kohteliaan airuen puhumaan puolestaan.

FM Riina Kosunen ja FM Anna Dannenberg ovat opettaneet minulle sen, että jotkin teorioissa olevat ristiriidat johtuvat huonosti määritellyistä (tai määrittelemättömistä) termeistä, ja heidän kanssaan on ollut antoisaa yrittää korjata ja saattaa ristiriidattomaan muotoon muutamia kvanttifysiikan keskeisiä määritelmiä. Prof. Keijo Kajantie, prof. Gabriel Sandu, prof. Christofer Cronström, prof. Ilkka Niiniluoto, prof. Dennis Bamford, dos. Jouni Niskanen, dos. Lauri Jetsu ja dos. Markus Lammerranta ovat opettaneet minulle paljon tieteestä, ja heidän kanssaan käydyt keskustelut ovat osaltaan myötävaikuttaneet kvanttifysikaalisen todellisuuden ymmärtämisyritykseeni.

Työn tekeminen olisi ollut käytännössä mahdotonta ilman Fysiikan tutkimuslaitoksen Kvanttioptiikan ja laserfysiikan tutkimusryhmän kautta minulle tarjoamaa infrastruktuuria ja yli vuoden kestänyttä työsuhdetta, Magnus Ehrnroothin säätiön kolmeksi ja puoleksi vuodeksi myöntämää apurahaa, Turun yliopistolla vajaan puoli vuotta kestänyttä tutkijanpestiä ja Helsingin yliopiston tiedesäätiön myöntämää väitöskirjan viimeistelyapurahaa. Lisäksi olen saanut väitöskirjan painatuskuluihin avustusta Fysiikan tutkimuslaitokselta.

Monien asioiden suhteen olisin ollut huomattavasti enemmän pallo hukassa ilman puolisoni Anna Dannenbergin tukea. Lisäksi lapsillemme,

marraskuussa 2005 syntyneelle Leolle, joulukuussa 2007 syntyneelle Timolle ja huhtikuussa 2010 syntyneelle Sofialle, erityiskiitokset siitä, että heidän olemassaolonsa on antanut minulle mahdollisuuden tehdä sellaisia epäkonventionaaliselta tuntuvia valintoja, joita olen aina halunnut tehdä mutta joiden tekeminen muuten olisi erittäin vaikeaa. Hyvälle ystävälleni Anna Lassilalle kiitos tuesta ja sopivasta patistelusta – tämän käsikirjoituksen valmistuminen lähti leikkimielisestä kilpailusta, kumpi meistä kirjoittaa rästissä olevan opinnäytetyönsä nopeammin. Kiitos myös appivanhemmilleni Leila ja Juha Hurmalaiselle monista hyvistä keskusteluista ja kommentteista sekä käsikirjoituksen viimeistelyvaiheessa tarjotusta ”turvapaikasta”, joka nopeutti huomattavasti kirjoitusprosessia. Lisäksi kiitos veljilleni Heikille ja Laurille, jotka ovat tietoteknisellä osaamisellaan edistäneet työtäni ja saaneet osittain vahingossa pudotettua simulaatioihin ja datankäsittelyyn kuluneen ajan murto-osaan.

Edellä mainittujen lisäksi monet muutkin ystäväni ovat joutuneet kuuntelemaan tieteenharjoittamisen riemuja ja murheita. Olen edelleen kohtuullisessa psykofyysisessä kunnossa – kiitokset siitä ainakin Aleksii Hongalle, Heli Kokkoselle, Terhi Kokkoselle, Vesa Kokkoselle, Hanna Multaselle, Janne Nuutiselle, Sari Saloselle, Vesajoonalla Saloselle, Visaajaani Saloselle, Laura Sutiselle ja Helena Zimmermanille. Ehdottomasti kiitos Helsingin yliopiston Karjalaiselle Osakunnalle, jonka kuraattorina toimin väitöstutkimukseni viimeistelyvaiheessa kaudella 2006–2007 – osakunta on opettanut minulle paljon, ja sitä kautta olen löytänyt suurimman osan ystäväistäni. Lisäksi lämmin kiitos yläasteen äidinkielenopettajalleni Eija Rytkoselle, joka edesauttoi luovan ajattelun, kriittisyyden ja kyseenalaistamisen säilymistä ja kehittymistä sosiaalisesti liian haasteellisessa ympäristössä, ja lukion fysiikanopettajalleni Ilkka Koivistoiselle, joka yritti opettaa ymmärtämään fysiikkaa, kertoili kauniita tarinoita kiehtovista fysiikan ongelmista kuten Schrödingerin kissasta ja oli sitä mieltä, että minun kannattaisi päätyä opiskelemaan teoreettista fysiikkaa. Kuten lopulta, todella monen mutkan kautta, päädyinkin.

Kiitos kaukaiselle sukulaiselleni Julius Krohnille siitä, että tämä väitöskirja on kirjoitettu selvällä suomen kielellä. Julius Krohn kirjoitti ensimmäisen suomenkielisen akateemisen opinnäytetyön (pro gradu) vuonna 1857 ja ajatteli, että jotta kieli olisi elinkelpoinen, sillä tulee voida tehdä minkä tahansa tieteenalan akateemista tutkimusta ja opetusta. Tieteen kansainvälisyyspaineen vuoksi väitöskirjat ja jopa pro gradutkin ovat nykyään pääsääntöisesti englanniksi, ja tämän kansainvälisyysajattelun vuoksi tämäkin väitöskirja on näissä kansissa myös englanniksi. Suomenkielisen osan luettavuuden parantamiseksi olen soveltuvien osin toistanut tekstissä niitä asioita, jotka on julkaistu (englanniksi) väitöskirjan liitear-

tikkeleissa. Pelkään pahoin, että tämä saattaa olla viimeinen suomenkielinen teoreettisen fysiikan väitöskirja. Toivon vilpittömästi, että minun osoitetaan olevan väärässä.

Lopuksi mainittakoon, että esikoispoikani nimestä Leo Dannenberg saadaan anagrammi *endanger Nobel*. Myönnettäköön, että hänen ja hänen sisarustensa olemassaolo on luonnollisesti vaikuttanut menemisiini, tulemisiini, haluamisiini ja mahdollisiin tulevaisuudenkuviini tieteenharjoittajanakin. Lukijan mietittäväksi jätän sen, missä määrin nimi voi muodostua enteeksi, mutta huomautettakoon, että minua mahdollinen enteellisyys ei hetkauta suuntaan eikä toiseen.

Joensuussa 14/3 2011

Alia Dannenberg

Tiivistelmä

Väitöskirjassani käsittelen erilaisia kvanttikoherenssi-ilmiöitä ja luon perusteita systemaattiselle koherenssiteorialle. Kvanttikoherenssin käsittely tieteessä on tähän asti ollut puhtaasti fenomenologista. Väitöstutkimuksessani pyrin vastaamaan kysymykseen, mitä kvanttikoherenssi on ja miten sitä tulee lähestyä fysiikan, fysiikan metateorian ja niihin liittyvän terminologian kannalta. Erityisen huomionarvoista on, että kvanttikoherenssi on säilyvä suure, joka voidaan määrittää eksaktisti. Esitän tavan määrittää kvanttikoherenssi matemaattisesti systeemin tiheysmatriisista.

Degeneroituneet kvanttikaasusysteemit eli Bose-kondensaatit ja ultrakylmät fermionisysteemit muodostavat hyvän koherenssitutkimuslaboratorion, sillä niiden entropia on pieni ja koherenssi suuri, joten niissä esiintyvät koherenssi-ilmiötkin ovat voimakkaita. Väitöstutkimuksessani käsittelen degeneroituneissa kvanttikaasuissa tapahtuvien koherenssi-ilmiöiden osalta lähinnä kollektiivista assosiaatiota atomeista molekyyleiksi, Rabi-oskillaatioita ja dekoherenssia. Osoittautuu, että kollektiivinen assosiaatio ja oskillaatiot eivät riipu hiukkasten spin-statistiikasta.

Lisäksi selvitän suljetun systeemin dekoherenssin loogisia piirteitä yksinkertaisen spin-mallin avulla. Väitän, että dekoherenssi on pätevä käsite myös niissä tapauksissa, joissa systeemillä on mahdollisuus rekoherenssiin eli Poincarén paluut ovat mahdollisia. Tämä on metateoreettisesti merkittävä tulos, sillä se oikeuttaa kvanttikosmologian: koko maailmankaikkeuden (siis fyysikaalisen todellisuuden) puhdas kvanttifyysikaalinen tarkastelu on mielekästä ja pätevää tiedettä, jossa dekoherenssi selittää, miksi kvanttifyysikaalinen maailmankaikkeus näyttäytyy maailmankaikkeuden tutkijoille hyvin klassisen kaltaisena.

Suljetun systeemin loogisen rakenteen tutkiminen paljastaa myös, että riittävän monimutkaisille (fyysikaalisille) suljetuille systeemeille pätee loogikasta tutun Gödelin epätäydellisyysteoreeman kaltainen periaate, jonka mukaan suljetun systeemin täydellinen kuvaaminen systeemin sisältä katsoen on mahdotonta, ja että suljetun systeemin sisäpuolinen ja ulkopuolinen kuvaus systeemistä voivat poiketa merkittävästi toisistaan. Tämän ymmärtämisen myötä voi olla mahdollista ymmärtää karkeistusta paremmin ja määrittellä kvanttifyysikaalisten systeemien keskinäinen lojittuminen yksikäsitteisesti.

Väitöskirjaan liittyvät artikkelit

Väitöskirjani muodostuu johdannosta ja neljästä tieteellisiin julkaisuihin kirjoitetusta artikkelista.

I *Shortcut to a Fermi-degenerate gas of molecules via cooperative association*

O. Dannenberg, M. Mackie, and K.-A. Suominen.

Physical Review Letters **91**, 210404 (2003).

II *Raman photoassociation of Bose-Fermi mixtures and the subsequent prospects for atom-molecule Cooper pairing*

M. Mackie, O. Dannenberg, J. Piilo, K.-A. Suominen, and J. Javanainen.

Physical Review A **69**, 053614 (2004).

III *Rogue decoherence in the formation of a macroscopic atom-molecule superposition*

O. Dannenberg, and M. Mackie.

Physical Review A **74**, 053601 (2006).

IV *Coherence theory and coherence phenomena in a closed spin-1/2 system*

O. Dannenberg.

Annalen der Physik (Berlin) **17**, 355-373 (2008).

Väitöskirjaan liittyvien artikkeleiden tiivistelmät

- I We theoretically examine the creation of a Fermi-degenerate gas of molecules by considering a photoassociation or Feshbach resonance applied to a degenerate Bose-Fermi mixture of atoms. This problem raises interest because, unlike bosons, fermions in general do not behave cooperatively, so that the collective conversion of a degenerate gas atoms into a macroscopic number of diatomic molecules is not to be expected. Nevertheless, we find that the coupled Fermi system displays collective Rabi-like oscillations and a rapid adiabatic passage between atoms and molecules, thereby mimicking Bose-Einstein statistics. Cooperative association of a degenerate mixture of Bose and Fermi gases could therefore serve as a shortcut to a degenerate gas of Fermi molecules.
- II We theoretically investigate Raman photoassociation of a degenerate Bose-Fermi mixture of atoms and the subsequent prospect for anomalous (Cooper) pairing between atoms and molecules. Stable fermionic molecules are created via free-bound-bound stimulated Raman adiabatic passage which, in contrast to purely bosonic systems, can occur in spite of collisions. With the leftover atomic condensate to enhance intrafermion interactions, the superfluid transition to atom-molecule Cooper pairs occurs at a temperature that is roughly an order of magnitude below what is currently feasible.
- III We theoretically examine two-color photoassociation of a Bose-Einstein condensate, focusing on the role of rogue decoherence in the formation of macroscopic atom-molecule superpositions. Rogue dissociation occurs when two zero-momentum condensate atoms are photoassociated into a molecule, which then dissociates into a pair of atoms of equal-and-opposite momentum, instead of dissociating back to the zero-momentum condensate. As a source of decoherence that may damp quantum correlations in the condensates, rogue dissociation is an obstacle to the formation of a macroscopic atom-molecule superposition. We study rogue decoherence in a setup which, without decoherence, would yield a macroscopic atom-molecule superposition, and find that the most favorable conditions for said superpositions are a density $\rho \sim 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ and temperature $T \sim 0.1 \text{ nK}$.
- IV A simplified Heisenberg spin model is studied in order to examine the idea of decoherence in closed quantum systems. For this purpose, we

present a quantifiable definition to quantum coherence Ξ , and discuss in some detail a general coherence theory and its elementary results. As expected, decoherence is understood as a statistical process that is caused by the dynamics of the system, similar to the growth of entropy. It appears that coherence is an important measure that helps to understand quantum properties of a system, e.g., the decoherence time can be derived from the coherence function $\Xi(t)$, but not from the entropy dynamics. Moreover, the concept of decoherence time is applicable in closed and finite systems. However, in most cases, the decay of off-diagonal elements differs from the usual $\exp(-t/\tau_d)$ behaviour. For concreteness, we report the form of decoherence time τ_d in a finite Heisenberg model with respect to the number of particles N , density n_ρ , spatial dimension D and ϵ in a η/r^ϵ -type of potential.

Väittelijän osuus artikkeleissa

- I PhD Matt Mackien idea. Vastasin kollektiivisen assosiaation mallin pohjalta kehittämieni tietokonesimulaatioiden suunnittelusta ja toteutuksesta, sekä osittain kollektiivisen assosiaation teoreettisesta linkittämisestä kvanttifysiikan perusteisiin.
- II Kuten artikkeli I.
- III Idea tutkimukseen tuli PhD Matt Mackieltä, kun mietittiin, kuinka olisi mahdollista yhdistää molempien erityisosaamista. Käytännössä kyseessä on Calsamiglian, Mackien ja Suomisen aikaisemman artikkelin [88] jatkotutkimus. Vastasin suurimmaksi osaksi kirjoitusprosessista ja teoreettisesta laskemisesta sekä täysin simulaattorin ohjelmoimisesta, ylläpidosta, tulosten käsittelystä ja dekoherenssiin liittyvistä teoreettisista ja käytännön asioista.
- IV Kaikki omaa alkaen ideasta ja päättyen lopulliseen toteutukseen.

Luku 1

Aluksi

Kvanttifysikaalinen todellisuus vaikuttaa olevan pullollaan mielenkiintoisia arvoituksia ja ihmeellisiä paradokseja. Toisaalta taas on melko selvää, että nämä paradoksit ovat vain asioita puutteellisesti ymmärtävän mielen tuotteita, sillä fysikaalinen todellisuus on ristiriidaton. Eräs ensimmäisistä kvanttifysiikan ”paradokseista” liittyi kvanttifysiikan ja klassisen fysiikan väliseen rajankäyntiin. Erwin Schrödinger nosti kvanttifysiikan perusteiden ymmärrykseen liittyen melkein konkreettisestikin *kissan pöydälle* tekemällä ajatuskokeen, jossa kissa suljettiin terässäiliöön sellaisen helvetinkoneen kanssa, joka koostuu pienestä määrästä radioaktiivista ainetta vasarakoneistoon yhdistetyssä Geiger-putkessa [1]. Mikäli yksikin radioaktiivinen ydin hajoaisi, vasarakoneisto aktivoituisi ja vasara rikkoi si nihappopullon, mikä taas aiheuttaisi kissan kuoleman. Radioaktiivisen ytimen hajoaminen on kvanttifysikaalinen tapahtuma. Mallinnettaessa koko systeemiä terässäiliön ulkopuolelta kvanttimekaniikkaa käyttäen huomataan, että hetken kuluttua kokeen aloittamisesta koko systeemin aaltofunktio antaa sellaisen kuvan, että se sisältää superposition elävän ja kuolleen kissan tiloista. Yksikään todellinen havaittu kissa ei ole ollut superpositio elävästä ja kuolleesta kissasta. Ristiriita? Kuulematon legenda *Schrödingerin kissasta* kvanttimekaniikkaan liittyvänä paradoksina oli syntynyt.

Superpositio elävästä ja kuolleesta kissasta oli toki väärinkäsitys, mutta tämän oivaltaminen edellytti noin puolta vuosisataa aktiivista kvanttifysiikan perusteiden tutkimista. Käytännön ratkaisukin oli erittäin yksinkertainen: kissaa ei ole tarkoituksenmukaista mallintaa pistemäisenä kissana tyhjiössä vaan kohtuullisen isona objektina, jolla on paljon vapausasteita, ja nämä vapausasteet ovat kytkeytyneet vuorovaikutuksilla kissan ympäristön vapausasteisiin, joita taas on erittäin paljon. Nämä vuorovaikutukset aiheuttavat dekoherenssiksi kutsutun dynaamisen

ilmiön, joka vähentää nopeasti kissan kvanttikorrelaatioita, jolloin kissa ei koskaan päädy superpositiotilaan, tai jos päätyisikin, niin superpositio katoaa dekoherenssin myötä todella nopeasti.

Tosin kissan ongelman ratkaisu ei teoriassa ole näin yksinkertainen. Schrödingerin antamassa ongelmanasettelussa todettiin *koko systeemin* tilan olevan sellainen, että se vaikuttaa sisältävän elävän ja kuolleen kissan superposition. Täksi koko systeemiksi voidaan haluttaessa valita vaikkapa suurin mahdollinen systeemi, jolla ei ole karkeistettavaa ympäristöä, eli koko maailmankaikkeus (itse käytän tästä mielestäni täsmällisempää termiä *fysikaalinen todellisuus*, joka siis sisältää kaiken fysikaalisen). Fysikaalisen todellisuuden tila sisältää välttämättä lomittuneita superpositio-tiloja, joiden voidaan tulkita sisältävän elävän ja kuolleen kissan superpositioita. Tätä *periaatteellista* ongelmaa dekoherenssi ei ratkaise; dekoherenssi *vain* selittää, miksi havaitsijat, jotka ovat korreloituneita fysikaalisen todellisuuden kanssa (ovat osa fysikaalista todellisuutta), eivät koskaan havaitse mitään, mikä edes etäisesti muistuttaisi elävän ja kuolleen kissan superpositiota. Tämän periaatteellisen ongelman ratkaisu on tuttu logiikasta: Gödelin epätäydellisyysteoreeman mukaan riittävän monimutkaisen suljetun systeemin kuvaaminen yksikäsitteisesti systeemin sisältä on loogisesti mahdotonta. Tästä syystä ei ole olemassa ristiriitaa saman systeemin kahden ristiriitaiselta vaikuttavan kuvauksen kanssa, joista toisen (systeemin ulkopuolisen) kuvauksen mukaan systeemin tila sisältää lomittuneen superposition elävästä ja kuolleesta kissasta, kun systeemin sisäisen kuvauksen mukaan elävän ja kuolleen kissan tilat muodostavat statistisen sekatilaa, joiden väliset kvanttikorrelaatiot ovat kadonneet todella nopeasti dekoherenssista johtuen. Käsittelen aihepiiriä tarkemmin luvussa 5.3.

Vaikka Schrödingerin kissan paradoksi on käytännössä ratkennut, koherenssin perusteiden tutkimus ja käsitteenmuodostus on vasta alkutekijöissään. Tämän kirjan nimi on ”Koherenssiteorian perusteista” juuri siksi, että tarkoitukseni on käsitellä koherenssin perusteita puhtaasti teoreettisista lähtökohdista. Tähänastisessa koherenssiin liittyvässä tutkimuksessa on kyllä tullut esille teoreettisen oloisia käsitteitä, kuten *koherenssipituus* tai *dekoherenssiaika*, mutta loppujen lopuksi kyseiset käsitteet ovat fenomenologisia, mutta voidaanko niitä johtaa yksikäsitteisesti jostain yleisemmästä periaatteesta, mikä on se koherenssi johon ne viittaavat, tai mitä koherenssi ylipäänsä on, on epäselvää. Tietääkseni ei ole edes tarkkaa käsitystä siitä, onko koherenssi suure vai ei. En ole niin kunnianhimoinen, että pyrkisin väitöskirjassani esittämään lähestulkoonkaan valmista koherenssiteoriaa, vaan lähinnä sen perusteet ja ensimmäisen askelman matkalla kohti kattavampaa teoreettista tutkimusta.

Dekoherenssia tutkittaessa tulee vastaan sellaisia ongelmia, joita yleisesti luullaan fysikaalisiksi ongelmiksi, mutta jotka itse asiassa johtuvat käsitteiden löysästä määrittelystä aiheutuvista käsitteiden välisistä loogisista ristiriidoista. Tämä motivoi minua ryhtymään luvussa 2 lyhyesti esiteltävään koherenssitutkimuksen keskeisten käsitteiden määrittelyyn ja fysiikan metateorian ihmettelyyn. Aiheeseen liittyvä pidempi ja yksityiskohtaisempi tutkimus on työn alla [2]. Luonnontieteellisten käsitteiden määrittelyyn on herätty muuallakin: esimerkiksi planeetoista on tähtitieteessä puhuttu vuosisatoja, mutta vasta 14.–25. elokuuta 2006 kokoontunut IAU:n yleiskokous on määritellyt planeetan¹.

Luku 3 perustuu väitöskirjani artikkeleihin I ja II ja osittain artikkeleihin [4, 5]. Tarkoituksena on tutustua käytännön tasolla muutamaaan eksoottiseen koherenssi-ilmiöön, kuten fermionien kollektiiviseen käytökseen. Tämän jälkeen luvussa 4 tutustutaan dekoherenssiin aikaisemman tutkimuksen ja artikkeliin III perustuvan käytännön esimerkin valossa. Sitten päästään itse asiaan, eli luvussa 5 esiteltävään koherenssiteoriaan, jonka osina käsitellään koherenssin määritelmää, havaitsijan asemaa fysikaalisessa todellisuudessa, rekoherenssia sekä entropian ja koherenssin välistä suhdetta. Esitetyt tulokset pohjautuvat artikkeleihin IV ja [2]. Luvussa 6 tutkitaan esimerkin valossa suljetun systeemin dekoherenssia käyttäen artikkelissa IV esittelemääni koherenssin matemaattista määritelmää, minkä lisäksi tutkitaan dekoherenssin suhdetta ympäristöön ja havaitsijaan. Lopulta luvussa 7 kootaan tärkeimmät asiat yhteen ja mietitään mahdollisia jatkotutkimuksia.

¹Planeetta on sellainen objekti, joka ei ole tähti, mutta kiertää tähteä ja on sen verran massiivinen, että oma gravitaatio on muovannut pinnan pallomaiseksi. Lisäksi planeetan tulee olla dominoiva objekti radallaan. [3] Ellei radalla dominoivuutta olisi ehtona, niin aurinkokuntaamme tulisi kolme planeettaa lisää: asteroidina aikaisemmin tunnettu Ceres, Pluton ”kuuna” tunnettu Kharon (Kharon täyttäisi planeetan määritelmän, mutta ei kuun määritelmää, jonka mukaan objekti on kuu, mikäli sen ja planeetan painopiste sijaitsee planeetan sisällä) ja melko uusi löydös, jota ainakin epävirallisesti kutsutaan Xenaksi. Radalladominoivuusehto puolestaan pudottaa kolmen kandidaatin lisäksi Pluton planeettojen joukosta, koska Pluton rata on osittain Neptunuksen radan sisäpuolella, mutta vastaavasti taas tulee aiheuttamaan ongelmia muiden aurinkokuntien suhteen. ”Rata” on vaikea asia – on epäselvää, millaisia ehtoja sen stabiiliudelle asetetaan, eikä tarvita edes kovin kieroja mieltä kehrittelemään mallia aurinkokunnasta, jossa määritelmän mukaan ei olisi yhtään planeettaa mutta jonka keskustähteä kiertäisi useita Jupiterin kokoisia möykkyjä, jotka tulkittaisiin asteroidiksi (tai sitten komeetoiksi, mikäli niiden radat olisivat erittäin eksentrisiä). Tämä esimerkkinä siitä, että triviaalintuntuisen asian onnistunut määrittely ei välttämättä ole kovinkaan triviaalia.

Luku 2

Johdatus keskeisiin käsitteisiin ja kvanttifysiikan metateoriaan

Ennen tutkimuksen aloittamista on hyödyllistä tietää, mitä oikeastaan on tutkimassa, koska tutkimukseen saattaa tulla ylimääräisiä ongelmia, mikäli tutkimuskysymys on huonosti aseteltu tai keskeiset käsitteet ja määritelmät on peräti määritelty liian löysästi. Koska koherenssitutkimus on nuori kvanttifysiikan haara, huolimattomasti tehty käsitteenmäärittely on melko ymmärrettävää, mutta tämä kuitenkin ei ole peruste olla tekemättä käsitteenmäärittelyä – varsinkaan, kun hyvin toteutettu määrittely itsessään jo ratkaisee eräitä fysiikan alaan kuuluvaksi luultuja ongelmia.

Fysikaalisen maailmankuvan rakentamisenkin kannalta täsmällisesti määritelty ja ristiriidaton käsitejärjestelmä on ilmeisen tärkeä, sillä jo tällainen käsitejärjestelmä fysikaalisesta todellisuudesta itsessään on fysikaalisen todellisuuden malli¹.

Tässä luvussa esittelen lyhyesti kvanttifysiikan metateoriaa ja keskeisten käsitteiden määritelmiä ja niiden selityksiä. Määrittely on tehty terminologisen sanastotyön periaatteiden mukaan. Tavoitteena on saada aikaan mahdollisimman yksikäsitteiset määritelmät, jotka mahdollisuuksien mukaan ovat yhtenevät termien yleisen käytön kanssa ja jotka kuvaavat mahdollisimman tarkasti fysikaalisen todellisuuden rakennetta. Laajempi ja täsmällisempi esitys termeistä ja niiden välisistä suhteista käsitekarttoineen julkaistaan artikkelissa [2].

¹Käsite ”malli” voidaan määritellä ”(todellisuuden) yksinkertaistetuksi kuvaukseksi”.

2.1 Kvanttifysiikan metateoriasta

Tutkin asioita *fysiikan* viitekehyksessä. Fysiikka on empiirinen eksakti luonnontiede. Tieteellisyys ja empiria asettavat toden tiedon tuottamisen metodin, ja tutkimuskohtena on ”luonto”, eli *fysikaalisen todellisuuden* rakenne ja ”lait” (eli kaikki, mikä on fysikaalista) [6]. Tieteellinen metodi [7] asettaa rajat pätevälle päättelylle [8]. Päättelyn tulos ei saa riippua mistään muusta kuin käytetyistä premiseistä ja päättelysäännöistä. Occamin periaatetta² pidetään osana tieteellistä metodologiaa. Fysikaalista todellisuutta koskevien väitteiden todistaminen tapahtuu empiirisesti [11]. Mittausten tulee olla toistettavissa, ja mittaustulokset ovat tosia ja objektiivisia [7, 11]. Edellä mainittu johtaa sellaiseen ontologiaan³, että on olemassa objektiivinen ja riippumaton (”ihmis”mielestä tai illuusioista riippumaton) fysikaalinen todellisuus, ja mittaustulokset heijastelevat sen käytöstä. Tämä tarkoittaa, että oletan *fysikalismia* [12] pitävän paikkaansa. Toisaalta taas teoriat fysikaalisesta todellisuudesta ovat *vain* mielessä olevia epistemologisia⁴ malleja. Teoria voidaan *todistaa* oikeaksi vain harvoin – yleisempää on, että teorioita todistetaan vääriksi. Mikäli mittattaessa havaitaan sellaisia mittaustuloksia, jotka jokin teoria ennustaa, niin nämä mittaustulokset eivät yleensä todista teoriaa oikeaksi, vaan vain *korroboroivat* sitä [13]. Fysiikan eksaktius tarkoittaa sitä, että havaitut säännönmukaisuudet pyritään esittämään matemaattisessa muodossa olevina lakeina [14].

Fysikaalinen todellisuus voidaan jakaa kahteen tasoon: on olemassa objektiivinen ontologinen taso ja epistemologinen taso, joka käsittää ontologisesta tasosta hankitut tiedot ja teoriat. Luonnollisesti epistemologisen tason sisältö on osa ontologista tasoa (joka siis käsittää kaiken olemassaolevan), koska esimerkiksi informaatiota on (ontologisesti) olemassa, mutta yhdenkään epistemologiatasolla olevan proposition ei tarvitse olla täsmällinen ja tarkka kuvaus ontologiatason propositioneista.

Edellä esitetty yksinkertaistettu kuva hieman hämärtyy, kun aletaan miettiä oleellista kysymystä: ”Mikä on totta?” On itsestään selvää, että fysikaalisessa todellisuudessa olevat objektit ovat olemassa ja propositionit, jotka kuvaavat täsmällisesti fysikaalisen todellisuuden tilaa, ovat totta. Tämä tarkoittaa *totuuden korrespondenssteorian* olettamista [15].

²Keskiaikainen filosofi Wilhelm Occamilainen piti tärkeänä kahta modernin tieteen kannalta tärkeää ideaa. Entiteetin olemassaolon voi olettaa vasta sitten kun olemassaolon puolesta on todisteita, eli *eksistenssväitteen esittäjällä on todistustaakka*, ja ei ole syytä tehdä enempää oletuksia kuin on tarpeen. Jälkimmäinen tunnetaan myös nimellä *Occamin partaveitsi*. [9]: s. 198-199, [10].

³Ontologia: oppi siitä, mitä on olemassa.

⁴Epistemologia: oppi siitä, mitä voidaan tietää olevan olemassa.

Esitetyn väitteen totuusarvo saadaan selville, kun verrataan sen sisältöä fysikaaliseen todellisuuteen. Totuuden korrespondenssiteorian mukainen ontologia on helppoa, mutta epistemologinen kysymys ”Minkä *tiedetään* olevan totta?” on jo astetta vaikeampi. Luonnollisesti fysikaalisesta todellisuudesta muodostetun epistemologisen mallin pitäisi olla mahdollisimman lähellä ontologista fysikaalista todellisuutta. Koska fysikaalinen todellisuus on ristiriidaton, niin epistemologisen mallin on oltava ristiriidaton. Täten epistemologisessa mallissa tulee vähintään *totuuden koherenssiteorian* [16] päteä, eli malli ei saa sisältää ristiriitaisia propositioita. Totuuden korrespondenssiteoriaa tulee pyrkiä käyttämään niissä harvoissa tapauksissa, joissa se on mahdollista. Mahdottomuus todistaa suurinta osaa teorioista todeksi tekee tästä erityisen haastavaa.

Yksinkertainen tapa tehdä tiedettä on olettaa, että sekä epistemologisessa että ontologisessa mallissa⁵ pelkästään mittaustulokset ovat tosia eikä fysikaalisella todellisuudella ole mittaustuloksia kummallisempaa ”syvärakennetta”. Tätä lähtökohtaa voidaan kutsua *epistemologiseksi todellisuuskäsitykseksi*. Se on päivitetty versio loogisesta positivismista (tai loogisesta empirismistä), tai yleisestä antirealismista [11, 17, 18]. Tämän näkökulman mukaan esimerkiksi sellaista objektia kuin elektroni ei ole oikeasti olemassa. Todellisuus on sellainen, että tietynlaisella mittausjärjestelyllä havaitaan tiettyjä mittaustuloksia. Mikäli tehdään johtopäätös, että mittauksen kohde (vaikkapa elektroni) on oikeasti olemassa, on jo tehty liian rohkeita oletuksia ja johtopäätöksiä. Elektroni sattuu olemaan vain teoreettinen olio, jota ei oikeasti ole olemassa mutta joka nimenä yhdistetään tietyn mittalaitteen antamiin tiettyihin tuloksiin. Tämä ajatus sisältyy filosofisen antirealismien lisäksi myös kvanttimekaniikan kööpenhaminalaiseen tulkintaan (katso esim. [19]: s. 85). Parasta, mihin ikinä todellisuuden kuvaamisessa voidaan päästä, on saada toistetuilla mittauksilla selville tietyn koejärjestelyn mittaustulosten jakauma, vaikkakaan tästä jakaumasta ei voida päätellä mitään todellisuudesta niillä hetkillä kun mittauksia ei tehdä – (todellisuus ja) olemassaolevat entiteetit ovat olemassa vain tietyissä (mittaus)viitekehyksessä. Tosin tuntuu erittäin kummalliselta, mikäli tieteen pätevyys rajoittuisi pelkästään mittaustapahtumiin; on loogista ajatella, että todellisuus on olemassa myös silloin kuin mittauksia ei tehdä ja että tieteentekemisen tavoitteena on

⁵Fysikaalisen todellisuuden ontologinen malli on fysikaalisen todellisuuden täysin kuvaavien tosien propositioiden joukko (totuuden korrespondenssiteorian mielessä). Fysiikka tieteenä perustuu oletukseen, että ontologinen malli on olemassa, eli että fysikaalinen todellisuus on mahdollista kuvata täysin propositioita käyttäen. Muodollisesti fysiikan perusongelmat ovat ontologisen mallin ja epistemologisen mallin propositioiden välisten vastaavuuksien etsimistä.

tavoittaa myös todellisuuden tämä puoli [22].

Toisenlainen lähestymistapa perustuu *tieteelliseen realismiin*. Tieteellisen realismin kannattajat pitävät sitä tieteiden omana tieteenfilosofiana. Tieteellisen realismin puolustaminen filosofisia haasteita vastaan edellyttää lisäksi tieteeseen soveltuvan (meta)filosofisen näkökulman valitsemista, kuten jotain filosofisen naturalismin muotoa (vaikkapa fysikalismia). [17] Lyhyesti: ontologisen syvärakenteen oletaminen on rationaalista, ja täten voidaan välttää epistemologisen todellisuuskäsityksen mukanaan tuomia ongelmia (kuten mikä on mittausta ja onko jotain olemassa, mikäli sitä ei juuri sillä hetkellä mitata), ja epistemologiaan liittyvät ongelmat johtuvat vain puutteista ymmärtää fysikaalista todellisuutta.

Ontologisessa todellisuuskäsityksessä oletetaan, että mittaustulokset ovat vain heijasteita fysikaalisen todellisuuden koko olemuksesta, vaikkakin ne ovat objektiivisia ja tosia. Mittaustulokset alideterminoivat fysikaalisen todellisuuden; voi hyvin olla olemassa useita aivan erilaisia epistemologisia malleja (tieteellisiä teorioita) fysikaalisesta todellisuudesta, jotka kaikki selittävät havaitut mittaustulokset [17]. On ontologisen todellisuuskäsityksen mukaista olettaa, että jotkin abstraktit teoreettisesti määritellyt oliot (kuten elektronit, aaltofunktiot, kvanttitilat) ovat myös oikeasti olemassa fysikaalisessa todellisuudessa⁶. Mikäli jonkin abstraktin teoreettisen entiteetin olemassaolo oletetaan, niin kyseisen teoreettisen entiteetin tulee olla hyvin määritelty, koska korroboraatio olemassaololle voi parhaimmillaankin olla hyvin epäsuoraa. Palataan taas esimerkin vuoksi teoreettiseen entiteettiin nimeltä elektroni. ”Elektronin” määritelmä sisältää ainakin seuraavat ominaisuudet: lepomassa on $9.1093897 \times 10^{-31}$ kg, sähkövaraus $1.6021773 \times 10^{-19}$ C ja spin 1/2. Mikäli fyysikko törmää johonkin tuntemattomaan objektiin, mittaa sen lepomassan, sähkövarauksen ja spinin ja huomaa niiden olevan ”elektronin” määritelmän mukaisia, niin hänellä on vahvat syyt olettaa, että hän on ollut elektronin kanssa tekemisissä ja että elektroneja todella on olemassa fysikaalisessa todellisuudessa. ”Fysikaalisen todellisuuden tila(vektori)” on huomattavasti abstraktimpi kuin ”elektroni”, mutta sillä on tiettyjä ominaisuuksia, joita voidaan havaita epäsuorasti. Tuskin edes on kuviteltavissa tilanne, jossa on loogisesti mahdollista mitata koko fysikaalisen todellisuuden tila (sillä

⁶Muuten olisi hankalaa puhua fysikaalisista olioista silloin kun niitä ei havaita, mikä puolestaan johtaa subjektivismiin tai Berkeleyltä tuttuihin ratkaisuyrityksiin, joissa oletetaan ylikuunnollisia olioita havaitsemaan jatkuvasti aivan kaikki, koska epäjatkuvasti havaittu objekti saattaa yhtäkkiä lakata olemasta olemassa. Piispa Berkeleyyn suuri huolenaihe oli, että pihalla oleva puu tai hänen kirkkonsa alttari voi kadota silloin, kun kukaan ei havaitse niitä. Mikäli Berkeleyyn ongelmat kiinnostavat enemmän, niin niihin voi tutustua viitteissä [20, 21].

me, havaitsijat ja mittalaitteet olemme osa sitä), mutta sen olemassaolo on fysikalismiin ja modernin kvanttifysiikan mukaista.

Ontologinen todellisuuskäsitys on huomattavasti epistemologista vahvempi, mutta edellä esitetyin perustein sen pitäisi olla mahdollinen näkökulma myös modernissa (kööpenhaminalaisen tulkinnan jälkeisessä) kvanttifysiikassa. Totean tässä yhteydessä, että kausaaliteetin oletaminen (kvanttifysiikassa aaltofunktion tai tilan yksikäsitteinen aikakehitys) edellyttää ontologista todellisuuskäsitystä.

2.2 Käsitteiden määrittelystä ja terminologiasta

Minun on tyydyttävä antamaan tässä alaluvussa määritelmät selitteineen vain pienelle käsitejoukolle, sillä täsmällinen käsitteiden määrittely on aikaavievää työtä suhteessa koko väitöstutkimukseen käytettävissä olevaan äärelliseen aikaan. Työn taustasta sen verran, että kesällä 2005 tulin FM Riina Kosusen (terminologi) ja FM Anna Dannenbergin (lingvisti) kanssa siihen tulokseen, että kvanttifysiikan tutkimista edistää huomattavasti käsitteiden selkeä ja yksikäsitteinen määrittely. Aloimme kirjoittaa aiheesta harrastuksenomaisesti artikkelia [2], ja työ osoittautui haastavammaksi kuin alussa kuvittelimme. Artikkelissa käsittelemme yli 60:tä keskeistä käsitettä.

Hieman terminologiasta: Terminologia on tieteenala, joka tutkii erikoiskielten käsitteitä, termejä ja termistöjä. Terminologia sai alkunsa 1920-luvulla vaikuttaneen Wienin piirin [18, 23] ajatuksista tieteen ja filosofian roolista. Wienin piiriläiset olivat aikaisemmin mainittuja filosofissa paljon parjattuja loogisia positivistejä/empiristejä, joten todettakoon tässä, että kummallisen köyhdytetyn ontologisen ajattelun lisäksi he kyllä saivat jotain järkevääkin aikaan. Loogisten positivistien mielestä reduktionistinen fysikalismi oli tieteen ihanne⁷, ja mielekkäät filosofiset ongelmat liittyvät kieleen ja tästä olennainen osa on käsitteiden määrittely. Hyvä määritelmä (1) kuvaa määriteltävän käsitteen, (2) ei ole kehä, (3) ei sisällä kieltoilmaisuja, mikäli positiiviset ovat mahdollisia ja (4) ei sisällä epäselvää tai kuvaannollista kieltä [23]: s. 164, [24]: s. 238. Lisäksi on erittäin suotavaa, että (5) käsite ja/tai määritelmä ei ole ristiriidassa muun käsitejärjestelmän kanssa, eli että järjestelmä on koherentti. Terminologisen sanastotyön kannalta suurimmat haasteet tulevat usein kohdistu (1) ja (5). Kohdan (1) haasteellisuus johtuu siitä, että määriteltävän

⁷Tätä taustaa vasten monien loogisten positivistien antirealistinen ontologinen ajattelu tuntuu kummalliselta.

termin kuvaus ei saa olla liian suppea tai liian laaja, koska muuten voi seurata ongelmia. Varsinaisesti terminologian isänä pidetään Eugen Wüsteriä, jonka lähestymistapa oli pragmaattisempi kuin Wienin piiriläisillä ja jonka aloitteesta alkoi määritelmien standardisointi. Viitteestä [25] löytyy lisätietoa Wüsterin kehittämästä terminologiasta, ja viitteessä [26] on selitetty terminologista sanastotyötä standardeineen⁸.

2.3 Keskeisten käsitteiden määritelmät ja selitteet

Tässä aluvuossa esiteltävien käsitteiden seliteosioissa käsitellään lyhyesti myös osa kvanttifysiikan filosofiaan liittyvistä kysymyksistä.

1. fysikalismi: filosofinen teoria, jonka mukaan kaikki on fysikaalista

Määritelmä on eksakti ja esitetty viitteessä [12]. Fysikalismin pää-idea on, että periaatteessa kaikki voidaan selittää fysiikan viitekehityksessä. Todellisuudessa ei ole olemassa yhtään ylikuonnollista prosessia tai entiteettiä – havaitut omituisuudet johtuvat vain ja ainoastaan puutteellisesta fysiikan tuntemuksesta. Vaikka käyttämäni määritelmä on eksakti, niin sen loogista muotoa voidaan helpommin analysoida, mikäli lisätään hieman redundanssia, jolloin määritelmä asettuu muotoon ”... kaikki, mikä on olemassa, on fysikaalista”. Tämän jälkeen määritelmän analyysi voidaan jakaa kolmeen osaan: mitä tarkoittaa a) *kaikki*, b) *olla olemassa* ja c) *fysikaalinen*.

Fysikalismiin liittyy neljä tunnettua filosofista ongelmaa, mutta vain yksi niistä on relevantti: epifenomenaalisen ektoplasman ongelma [12, 27, 28]. Kolme muuta ongelmaa ovat lähinnä seurausta huonosti ratkaistusta epifenomenaalisen ektoplasman ongelmasta. Oletetaan, että on olemassa fysikaalinen todellisuus *A*, jossa fysikalismi pätee. Oletetaan myös, että on olemassa fysikaalinen todellisuus *B*, joka on yhtä seikkaa lukuunottamatta *A*:n täydellinen kopio – nimittäin *B*:ssä *on olemassa* myös jotain, jota kutsutaan epifenomenaaliseksi ektoplasmaksi, joka ei vuorovaikuta muun fysikaalisessa todellisuudessa olevan kanssa. Filosofit (kuten [12, 27, 28]) näkevät tässä ongelman, sillä usein käytetyn fysikalismin muodon, nimittäin supervenienssifysikalismin⁹ mukaan ”fysikalismi pätee mahdollisessa

⁸Yleistä terminologiaan liittyvää tietoa ja lähdeviitteitä löytyy Vaasan yliopiston terminologiafoorumilta URL: <http://lipas.uwasa.fi/termino/> (20/9 2009).

⁹Supervenienssin idea on usein kiteytetty pistematriisikuvaan: kuvalla on joitain

maailmassa w jossa mikä tahansa maailma, joka on w :n fysikaalinen kopio, on yksinkertaisesti w :n kopio¹⁰ [12], mikä taas sulkee B :n pois fysikaalisten todellisuuksien joukosta. Tämä ei mielestäni ole ongelma, sillä ongelmanasettelun ongelma on *olemassaolon* merkityksestä johtuva¹¹. Yleisesti fysikaalisessa mielessä olemassaolo rinnastetaan siihen, että objekti vuorovaikuttaa jonkin kanssa, joten viittaus objektiin, joka on olemassa mutta ei vuorovaikuta, on merkityksetöntä ja perusteetonta sanoilla leikkimistä. Mikäli fysikaalisen ideaa lähdetään muuttamaan siten, että myös B olisi kaikin puolin fysikaalinen, niin tämä taas johtaa muihin (ainakin niihin kolmeen jäljellä olevaan) ongelmiin.

Proposition ”kaikki on fysikaalista” looginen muoto selviää tutkimalla proposition predikaattilogiikkaa käyttäen. Predikaattilogiikassa eksistenssi on kvantorisuure eikä predikaatti, joten tutkittavan proposition looginen muoto on $\forall xP(x)$, missä $P(x) \equiv$ ” x on fysikaalinen”. Osa epifenomenaalisen ektoplasman ongelmaa on se, että lauseesta $\forall xP(x)$ voidaan ilman ajattelua ja lauseen pätevyysalueen

globaaleja ominaisuuksia ja muotoja, mutta lopulta se muodostuu vain pisteistä ja pisteiden puuttumisesta paperilla – nämä globaalit ominaisuudet ovat vain pisteistä muodostuneita. Globaalien muotojen ja pisteiden välillä on supervenienssi: ei ole mahdollista, että kaksi kuvaa poikkeavat toisistaan globaaleissa ominaisuuksissa ilman poikkeavuutta pisteiden sijoittelussa. [29]: s. 14. Fysikaalisessa todellisuudessa havaittavat mentaaliset ”ominaisuudet” samastetaan yleisesti pistematriisikuvan globaaleihin muotoihin. Viitteestä [29] löytyy myös muita esimerkkejä ja selventävää pohdintaa.

¹⁰”Physicalism is true at a possible world w iff any world which is a physical duplicate of w is a duplicate of w *simpliciter*”

¹¹Descartes todisti jumalansa olemassaolon olettamalla olemassaolon ominaisuudeksi. Hänen päättelyssään oli muitakin puutteita; niistä sekä muusta luonnollisessa kielessä ”olemassaoloon” liittyvästä kikkailusta tarkemmin mm. viitteestä [30]: osio 239. Olemassaolo ei ole ominaisuus (ainakaan missään fysiikkaan liittyvässä), minkä osoittamiseen riittää seuraava ajatuskoe: Mietitään jotain olemassaolevaa objektia, jolla on ominaisuuksia, sanotaan vaikkapa elektronia. Poistetaan elektronilta ominaisuuksia: ensin lepomassa, sitten sähkövaraus, spin jne. Lopulta jäljelle ”jää” jotain sellaista, millä ei ole ominaisuuksia. Filosofissa tätä ”jäljelle jäävää” kutsutaan substanssiksi. Mutta onko tämä substanssi olemassa? Substanssius ei ainakaan ole säilyvä asiointila, eikä substanssien ”määrä” ole mikään metafysikaalinen vakio tai määrittäminen. Onko substanssia koskaan havaittu edes epäsuorasti? Kuuluuko substanssi samaan kategoriaan esimerkiksi taskukellossani asuvan demonin kanssa? Occamin periaatteen mukaan mikäli väitän, että taskukellossani asuu demoni, minulla on todistustaakka; minun tulee esittää riittävän päteviä todisteita demonin olemassaololle. Kuinka kukaan kykenisi edes ajatuskokeessa esittämään todisteita substanssin olemassaololle? Muuta todistetta kuin proposition, joka on muotoa ”substanssi on olemassa koska substanssi on olemassa”? Entä jos olemassaolo on ominaisuus? Koska substanssi on ominaisuudeton olio, niin tässä tapauksessa sen olemassaolo on loogisesti mahdotonta. Substanssiin liittyvistä filosofisista pohdinnoista tarkemmin esimerkiksi viitteessä [31]: VI.

tarkastelua päätellä $P(\epsilon)$, missä $\epsilon \equiv$ ”epifenomenaalinen ektoplasma” – eli tehdä virhepäätelmä, että se olisi fysikaalinen. Samalla tavalla voitaisiin päätellä kaiken maailman jumalien, taskukelloissa asuvien demonien tai Ranskan nykyisen kaljun kuninkaan fysikaalisuus. Lauseen $\forall xP(x)$ pätevyysalueesta luonnollisessa kielessä saa kiinni käyttämällä kvanttori-identiteettiä $\forall xP(x) \equiv \neg\exists x\neg P(x)$, joka sanoo ”ei ole niin, että olisi olemassa x siten, että x on ei-fysikaalinen” – mikä siis kieltää ei-fysikaalisten asioiden olemassaolon! Usein universaalikvanttorin yhteydessä (varsinkin luonnollisessa kielessä tehtävässä päättelyssä) unohtuu se, että täsmällinen käänös ilmaisulle $\forall x$ on ”kaikille olemassaoleville x ” – eli universaalikvanttori kvantifioi vain olemassaolevia entiteettejä.

Luonnollisessa kielessä ilmaistuna fysikalismien määritelmä ”filosofinen teoria, jonka mukaan ei ole olemassa ei-fysikaalista” on täsmällisempi kuin antamani määritelmä, mutta koska molempien määritelmien looginen sisältö on identtinen ja määritelmän tulee mahdollisuuksien mukaan olla positiivinen, antamani määritelmä – tämä huomautus huomioon ottaen – on pätevä ja siirtää huomion epifenomenaalisen ektoplasman olemassaolosta siihen, mikä on fysikaalista.

Fysikalismissa ja fysiikassa implisiittisesti oletetaan seuraavat kaksi lemmaa: (1) fysikaalinen todellisuus voidaan kuvata propositioilla täsmällisesti ja (2) fysikaalinen todellisuus on ristiriidaton. Fysiikan tutkiminen on mahdotonta ilman molempien olettamista.

Fysikalismi on tämän työn perusta – mikäli joku fysiikan viitekehyksessä työtä tai tutkimusta tekevä olettaa fysikalismien olevan väärä lähtökohta todellisuuden ymmärtämiselle, hänen on hedelmällisempää opiskella esimerkiksi astrologiaa tai joogalentämistä kuin fysiikkaa.

2. fysikaalinen: vuorovaikutuksessa oleva

Tämä on luultavasti fysikalismien kriittisin kohta. Epifenomenaalisen ektoplasman ongelma sai alkunsa sanojen *olla olemassa* löysästä käyttämisestä. Kuinka järkevää on olettaa olemassaoloa ilman minkäänlaista mahdollisuutta verifioida sitä? Edes ajatuskokeessa? Ajatuskokeethan ovat yleensä käteviä, kun tutkitaan fysikaalisen todellisuuden loogista tai muuten perustavaa laatua olevaa luonnetta, mutta niissäkin pitäisi olla reunaehtoina vähintään fysikaalisen todellisuuden loogiset rajat, muuten tulokset voivat olla omituisia. Tästä syystä määrittelen ”fysikaalisen” olevan sellainen, jon-

ka olemassaolon muu fysikaalinen todellisuus voi verifioida. Tämä tarkoittaa sitä, että fysikaalisen ”objektin” pitää vuorovaikuttaa ainakin jonkin muun fysikaalisen objektin kanssa. Tämä muistuttaa hieman aiemmin esiteltyä Berkeleyyn ratkaisuyritystä, jonka mukaan olemassaolo on havaituksi tulemista [20, 21].

Mikä on fysikaalista, kun fysikaalinen määritellään vuorovaikutuksessa olevaksi? Aika-avaruus, kaikki mikä sisältää energiaa, sillä energia kaareuttaa aika-avaruutta (yleisen suhteellisuusteorian ”gravitaatio”), vuorovaikutukset – epifenomenaalinen ektoplasma taas ei ole, koska se ei vuorovaikuta minkään kanssa. Jäljellä kuitenkin on yksi pienehkö ongelma, jota seuraava esimerkki kuvaa. Oletetaan, että ”on olemassa” N kappaletta hiukkasia a_i ja M kappaletta hiukkasia b_i . Hiukkaset a_i vuorovaikuttavat keskenään vuorovaikutuksella A ja hiukkaset b_i keskenään vuorovaikutuksella B . Yksikään hiukkanen a_i ei vuorovaikuta millään vuorovaikutuksella yhdenkään hiukkasen b_i kanssa. Mikä tässä asetelmassa on fysikaalista? ”Metatasolta” katsottuna systeemi koostuu kahdesta erillisestä fysikaalisesta todellisuudesta – yhdestä, joka sisältää hiukkaset a_i ja vuorovaikutuksen A , ja toisesta, joka sisältää hiukkaset b_i ja vuorovaikutuksen B . Sanomattakin on selvää, että kumpikin fysikaalinen todellisuus on omassa erillisessä aika-avaruudessaan. Mikäli asiaa tarkastellaan jommankumman fysikaalisen todellisuuden sisältä, vaikkapa sen, joka sisältää hiukkaset a_i , niin fysikaalista on kaikki se, mikä kyseinen fysikaalinen todellisuus sisältää. Hiukkaset, jotka ovat tyyppiä b_i , eivät kuulu tieteellisen tarkastelun piiriin, sillä niiden ”olemassaolo” ei koskaan vaikuta eikä koskaan tule vaikuttamaan yhtään mihinkään tarkastelun alla olevassa hiukkasten a_i fysikaalisessa todellisuudessa.

Edellä esitetty analyysi vastaa samalla myös kysymykseen, mikä on ”kaikki”. Kaikki on vuorovaikuttavien entiteettien verkosto.

Fysikalismista ja fysikaalisen määritelmästä voidaan johtaa seuraavia asioita: on olemassa fysikaalinen todellisuus, fysikaalinen tila, vuorovaikutuksia ja aikakehitys.

3. yksikäsitteisyys: ristiriidattomuus

Looginen järjestelmä on yksikäsitteinen, mikäli se ei sisällä ristiriitaa, eli yhdellekään propositiolle ϕ_i ei voida todistaa sekä ϕ_i että $\neg\phi_i$ ¹². Yksikäsitteisyys on melko vahva periaate, jolla on looginen hintansa (tai seurauksensa) – Gödelin epätäydellisyysteoreema

¹²Tässä yhteydessä en käytä perinteistä muotoilua, eli ”ristiriidattoman systeemin

[8, 32, 33] sanoo karkeasti ottaen, että mikäli ensimmäisen kertaluvun predikaattilogiikkaa rikkaammassa loogisessa systeemissä esiintyy systeemin omaa ristiriidattomuutta käsitteleviä propositioneja φ_i , ne ovat muotoa ” φ_i :tä ei voida todistaa”. Jotta proposition φ_i voisi todistaa, täytyy siirtyä korkeamman tason metalogiikkaan. Täten yksikäsitteistä systeemiä ei voida täysin kuvata systeemin sisältä.

Se, että jotain propositioneja ei voida todistaa, ei tarkoita sitä, että kyseisen proposition pitäisi olla epätosi tai jotenkin kummallinen. Kyseisessä propositionjärjestelmässä proposition φ_i on totta (koska propositionjärjestelmä on yksikäsitteinen), ja tämä on ainoa mahdollisuus, koska proposition φ_i on muotoa ”tätä propositioneja ei voida osoittaa todeksi”. Paradoksia tai ristiriitaa ei ole, vaan tulee pitää mielessä, että φ_i :n todistaminen edellyttää korkeamman kertaluvun metateoriaa – mikä taas tarkoittaa sitä, että juuri monimutkaisen propositionjärjestelmän ristiriidattomuus saa aikaan sen, että järjestelmän täydellinen kuvaaminen järjestelmän sisältä on loogisesti mahdotonta. Havainnollisuuden vuoksi kannattaa yrittää kuvitella, onko mahdollista, että fysikaalisessa todellisuudessa olisi sellainen laite, joka sisältäisi täydellisen kuvauksen fysikaalisesta todellisuudesta (mukaan lukien kuvauksen laitteesta itsestään). Laitteella on oltava vähintään yhtä monta vapausastetta kuin kyseisellä fysikaalisella todellisuudella!

Fysikaalisen todellisuuden oletetaan olevan yksikäsitteinen, sillä ristiriitaisessa fysikaalisessa todellisuudessa voisi loogisesti olla poikkeuksia fysikaalisiin ”sääntöihin”. Poikkeukset olisivat tavallaan epäfysikaalisia (ei fysikaalista selitystä poikkeukselle), joten yksikäsitteisyyden voidaan myös ajatella olevan sisäänrakennettu fysikaalisiin (aiheesta enemmän määritelmän 11 kohdalla). Ainakin tutkimuksellisista syistä sen erottaminen omaksi premissiksi auttaa

kaikille propositioneille ϕ_i vain joko ϕ_i tai $\neg\phi_i$ on todistettavissa”, ilmeisestä syystä: esimerkiksi kvanttilogiikassa superpositiota kuvaavasta lauseesta $(\phi_i \vee \neg\phi_i) = t$ ei voida päätellä, että $\phi_i = t \vee \neg\phi_i = t$. Tämän loogisen muotoilun sisältö havainnollistuu kaksoisrakokokeessa: $\phi_i = t$ tarkoittaa, että ”hiukkanen meni raosta A”, ja $\neg\phi_i = t$ tarkoittaa, että ”hiukkanen meni raosta B, eli ei mennyt raosta A”. Interferenssikuvion muodostuessa hiukkanen on päätynyt taustalevyille rakojen kautta, mutta aaltona eikä hyvin määriteltynä hiukkasena jommasta kummasta raosta.

Käyttämäni ristiriidattomuuden määritelmä soveltuu siis klassisen logiikan lisäksi kvanttilogiikkaan. Se on hieman heikompi periaate kuin perinteinen klassisen logiikan määritelmä, jossa yleisesti implisiittisesti käytetyn *kolmannen poissuljetun lain* seurauksena kaikilla propositioneilla on oltava totuusarvo. Käyttämäni määritelmä ei sisällä tätä vaatimusta, eli propositioneilla ei tarvitse olla totuusarvoa, mutta mikäli jokin propositioneja on totta, niin sen negaatio ei voi olla totta samanaikaisesti.

ymmärtämään yksikäsitteisyyden loogisia seurauksia. Yksikäsitteisyys on välttämätön ehto *kausalityetille* (määritelmä 11) ja *Noetherin periaatteelle* (määritelmä 13). Fysiikassa oletetaan fysikaalisen todellisuuden looginen rakenne sellaiseksi, että fysikaalista todellisuutta voidaan täsmällisesti kuvata propositioilla (katso määritelmä 1). Lisäksi fysikaalisen todellisuuden rakenne on erittäin todennäköisesti rikkaampi kuin ensimmäisen kertaluvun predikaattilogiikka, sillä esimerkiksi vuorovaikutusten looginen muoto on sama kuin relaatioilla, ja yksinkertaisetkin relaatiot ovan mahdollisia vasta toisen kertaluvun predikaattilogiikassa.

4. fysikaalinen todellisuus: entiteetti, joka koostuu kaikesta, mikä on fysikaalista

Fysikaalisen todellisuuden ulottuvuudet voivat olla äärettömiä tai äärellisiä, mutta fysikaalisen todellisuuden ja fysikalismin määritelmästä seuraa looginen rajoite: fysikaalinen todellisuus on suljettu systeemi. Todistukseksi käynee seuraava päättely: Mietitään avointa fysikaalista todellisuutta (siis sellaista fysikaalista todellisuutta, jolla on ympäristö, joka vuorovaikuttaa fysikaalisen todellisuuden kanssa). Ympäristöön kuuluva hiukkanen vuorovaikuttaa fysikaaliseen todellisuuteen kuuluvan hiukkasen kanssa. Koska kyseinen hiukkanen kuuluu ympäristöön, se ei ole osa fysikaalista todellisuutta, mutta koska se taas vuorovaikuttaa fysikaaliseen todellisuuteen kuuluvan hiukkasen kanssa, se on osa fysikaalista todellisuutta. Johdospäätöksenä voidaan päätellä, että avoin fysikaalinen todellisuus on ristiriitainen määritelmä.

Yleisessä kielenkäytössä fysikaalisesta todellisuudesta puhuttaessa käytetään usein termiä ”maailmankaikkeus”.

5. tila: olemassaolon muoto

Jonkin fysikaalisen tila on sellainen olemassaolon muoto, joka sisältää sen kaikki fysikaaliset aspektit, mukaan lukien kaikki epätiviaalit korrelaatiot. Tämä tarkoittaa, että tila on huomattavasti abstraktimpi olemisen muoto kuin se tapa, jolla jokapäiväisessä elämässämme kohtaamamme tavanomaiset fysikaaliset objektit ovat olemassa. Kvanttifiysiikassa *tilavektori* tai *aaltofunktio* ovat tilan matemaattisia abstraktioita. Tilat ja niiden matemaattiset abstraktiot ovat aallonkaltaisia entiteettejä (katso vaikkapa artikkeli IV); ne noudattavat superpositioperiaatetta (määritelmä 17), ja jonkin asian tilan matemaattisen abstraktion aikakehitys saadaan ratkaisemalla aaltoyhtälö.

6. fysikaalisen todellisuuden tila¹³

Fysikaalisen todellisuuden tila sisältää kaikkien vuorovaikuttavien entiteettien olemisen muodot, eli kaiken sen, mikä on olemassa. Sen matemaattinen abstraktio kvanttifysiikassa on *maailmankaikkeuden aaltofunktio* tai *maailmankaikkeuden tilavektori*.

7. aika-avaruus: ajan ja avaruuden muodostama entiteetti

Nykyisen fysikaalisen tietämyksen mukaan aika-avaruus on kaareutunut, yhden aikaulottuvuuden ja kolmen paikkaulottuvuuden muodostama. Aika-avaruuden kaareutuminen on kokeellisesti havaittu ilmiö (vaikkapa [34]), jonka Einsteinin yleinen suhteellisuusteoria ennustaa. Yleisessä suhteellisuusteoriassa energia kaareuttaa aika-avaruutta ja kaareutunut aika-avaruus vaikuttaa energian virtaamiseen (kuten massallisten objektien liikkeeseen). Kuitenkin on epäselvää, tuleeko aika-avaruutta kohdella erillisenä fysikaalisena entiteettinä vai tulisiko joidenkin sen aspektien sisältyä fysikaalisen todellisuuden tilaan (tämän kysymyksen luonnetta ihmettelevän kannattaa ajatuskokeena miettiä fysikaalisen todellisuuden perustilaa – onko aika-avaruus olemassa, mikäli kyseinen tila annihiloituu) ja toisten aspektien vuorovaikutukseen (aika-avaruuden kaareutuminen on energiaa omaavien entiteettien välistä gravitaatiovuorovaikutusta). Vilpittömästi toivon, että tulevaisuudessa tähän kysymykseen osataan vastata paremmin – vaikkapa toimivan kvanttigravitaatioteorian ja siitä johdettujen koejärjestelyjen kautta. Tätä ennen olen vielä taipuvainen pitämään aika-avaruutta ainakin osittain riippumattomana entiteettinä, jota selvyiden vuoksi on syytä kohdella fysikaalisen todellisuuden tilasta ja vuorovaikutuksesta erillisenä. Aika-avaruuden filosofisista kysymyksistä enemmän kiinnostuneelle lukijalle suosittelen tutustumista viitteeseen [35].

8. symmetria: invarianssi muunnosten ryhmän suhteen

Määritelmä on matemaattisesti eksakti¹⁴. Muunnosryhmä voi olla esimerkiksi Lorentzin ryhmä, spatiaalisten symmetrioiden ryhmä, Poincarén ryhmä, unitaarinen ryhmä [esimerkiksi $U(1)$, $SU(2)$, $SU(3)$, $SU(4)$]. Ulkoiset symmetriat liittyvät aika-avaruuteen ja sisäiset symmetriat fysikaalisen todellisuuden tilaan. Noetherin periaatteen avulla fysikaalisen todellisuuden havaittu symmetria voi-

¹³Käsitteelle ei ole kirjoitettu määritelmää, koska määritelmä on yksikäsitteisesti johdettavissa aikaisemmista käsitteistä. Samoin menetellään jatkossakin.

¹⁴”... invariance under a group of transformations” [36]: s. 427, [37].

daan linkittää johonkin säilyvään suureeseen. Aiheesta enemmän viitteissä [36, 37].

9. vuorovaikutus: prosessi, jossa kaksi tai useampia kappaleita vaikuttaa toisiinsa yhtä suurilla vastakkaissuuntaisilla voimilla

Tässä annettu määritelmä¹⁵ löytyy tieteen sanakirjasta [38]: Interaction. Vuorovaikutus on fysikaalinen tekijä, joka kytkee kappaleita toisiinsa aitojen ominaisuuksien¹⁶ välityksellä. Kytkeä aiheuttaa voiman, jonka vaikutus molempiin kappaleisiin on yhtä suuri, mutta vastakkaissuuntainen. Vuorovaikutuksen rooli voidaan myös ymmärtää siten, että se kytkee toisiinsa tiloja.

10. aikakehitys: prosessi, jossa tila kehittyy ajassa

Luonnossa havaittava aikakehityksen tyyppi on triviaali – nimittäin se, millä tavalla asiat aikakehittyvät fysikaalisessa todellisuudessa – mutta fysikaalista todellisuutta mallinnettaessa on monia keskenään yhtensovittamattomia tapoja valita *aikakehitysyhtälö*. Fysikaalisissa malleissa aikakehitysyhtälöstä (aikakehityksen tyypistä), vuorovaikutuksista ja aika-avaruuden ominaisuuksista saadaan aikakehitysoperaattori, joka on säännöstö (matemaattisesti kuvaus), joka kuvaa mielivaltaisen tilan mielivaltaisella ajanhetkellä toiseksi tilaksi toisena ajanhetkenä.

11. kausallinen aikakehitys: aikakehitys, joka on yksikäsitteinen

Kausaliteetti on seuraus fysikaalisen todellisuuden ristiriidattomuudesta. Yksikäsitteinen aikakehitys tarkoittaa sitä, että on olemassa vain yksi lopputila, joksi alkutila kuvautuu. Tämä idea on sisäänrakennettuna useimmissa fysiikan perusteorioissa, mutta harvemmin asia otetaan eksplisiittisesti esille seurauksineen. Kvanttifysiikan mallinnuksessa kausaliteetti tarkoittaa sitä, että aikakehitysoperaattori on unitaarinen operaattori.

Yksikäsitteisyys tarkoittaa, että aikakehityksen säännöt ovat yleis-pätevät eivätkä sisällä (alkutilasta riippuvia) poikkeuksia. Tarkasteltakoon esimerkinomaisesti yksinkertaista gravitaatioon liittyvää

¹⁵”a process in which two or more bodies exert mutual forces on each other”

¹⁶Objektien aidot ominaisuudet ovat säilyviä suureita (esimerkiksi spin). ”Epäaidot” ominaisuudet eivät säily (esimerkiksi punaisuus). Aitojen ja epäaitojen ominaisuuksien ero on lähes samankaltainen kuin Locken esittämä jako primaarisiin ja sekundaarisiin kvaliteetteihin [39]: luku VIII. Käyttämäni termi ”aito ominaisuus” on täsmällisempi ja tavoittaa paremmin kuvattavana olevan ilmiön kuin termi ”primaarinen kvaliteetti”. Objektien muut (epäaidot) ominaisuudet ovat johdettavissa aidoista ominaisuuksista, systeemin konfiguraatiosta, korrelaatioista ja aikakehityksestä.

ongelmaa: Kaikki massalliset objektit vuorovaikuttavat toistensa kanssa, ja vuorovaikutukset aiheuttavat sen, että massallisten objektien välillä on vetovoima. Yksikäsitteisen aikakehityksen ollessa kyseessä kaikki massalliset hiukkaset vetävät toisiaan puoleensa riippumatta siitä, mikä niiden massa tai sijainti on, tai mitä ajanhetkeä kello näyttää. Ei-yksikäsitteisessä aikakehityksessä voi olla poikkeuksia. Esimerkiksi mikäli sattuu olemaan torstai 14. heinäkuuta, ja tietyllä paikalla Maan gravitaatiokentässä on kilon massainen objekti ja toisella tietyllä paikalla kahden kilon massainen objekti, niin tällöin Maan ja kahden kilon massaisen objektin välillä onkin repulsiivinen voima. Repulsiivinen voima esiintyy vain tässä tapauksessa, eli mikäli esimerkiksi yhden kilon massainen objekti puuttuu tietyltä paikaltaan tai kahden kilon massaisen objektin tilalla onkin yhden kilon massainen objekti, niin kaikki tapahtuu ”normaalisti”. Kvanttifysiikkaalinen esimerkki ei-yksikäsitteisestä aikakehityksestä on Everettin puhelin [40].

Lisäksi on ilmeistä, että useat ei-yksikäsitteisen aikakehityksen sisältävät skenaariot rikkovat Noetherin periaatetta, ja selvästi ne rikkovat fysikalismien ajatusta vastaan: poikkeukset fysikaalisista säännöistä ovat erittäin epäfysiikkaisia. Tämän ajatuksen mukaan kausaaliiteetti on fysikalismien seuraus. Ei-yksikäsitteistä aikakehitystä sisältävät fysiikan teoriat saattavat olla hyödyllisiä efektiivisiä teorioita, mutta näistä teorioista johdettujen tulosten käyttöön kannattaa suhtautua varauksella yritettäessä vastata fysikaalista todellisuutta koskeviin perustavaa laatua oleviin kysymyksiin.

12. säilyvä suure: suure, jonka kokonaismäärä fysikaalisessa todellisuudessa pysyy vakiona ajan suhteen

Mikäli jonkin suureen kokonaismäärä ei muutu fysikaalisissa prosesseissa (vuorovaikutuksissa), niin tällöin kyseinen suure on säilyvä suure eli liikevakio. Usein sanotaan, että säilyvät suureet noudattavat säilymlakeja (esimerkiksi energian, spinin, sähkövarauksen tms. säilymlakeja). Määritelmässä oleva viittaus aikaan on sikäli redundantti, että aika on osa fysikaalista todellisuutta, mutta selvyden vuoksi aika on mainittu eksplisiittisesti.

13. Noetherin periaate: periaate, jonka mukaan tiettyjen fysikaalisen todellisuuden symmetrioiden ja säilyvien suureiden välillä on yksi yhteen -vastaavuus

Noetherin teoreema väittää, että Lagrangen funktion (operaattorin) invarianssi jatkuvien muunnosten ryhmästä implikoi jonkin suureen

säilymisen [41]. Tämä on teknisemmällä kielellä suunnilleen sama kuin esittämäni määritelmä. Fysikaalisen todellisuuden kuvaamisen onnistuminen Lagrangen formalismilla edellyttää kausaliteetin pätemistä, mikä taas edellyttää fysikaalisen todellisuuden yksikäsitteisyttä. Täten Noetherin periaate pätee ainoastaan yksikäsitteisissä systeemeissä.

14. säilymlaki: säilyvää suuretta koskeva laki, jonka mukaan kyseinen suure säilyy

Noetherin teoreema (tai periaate) ilmaisee vastaavuuden joidenkin säilyvien suureiden ja joidenkin fysikaalisen todellisuuden symmetrioiden välillä. Mikäli havaitaan symmetria, niin fysikaalisessa todellisuudessa pätee kyseistä symmetriaa vastaavan suureen säilymlaki.

15. indeterministinen aikakehitys: kausaalinen aikakehitys, jossa aidot todennäköisyysilmiöt ovat mahdollisia

Viitteissä [42, 43, 44] esitellystä koejärjestelystä ja havaintoaineistosta voidaan päätellä, että mittaustarkkuuden rajoissa fysikaalisessa todellisuudessa on aitoja todennäköisyysilmiöitä¹⁷. Tämä tarkoittaa, että determinismi falsifioituu (determinismi kieltää aidot todennäköisyysilmiöt), joten indeterminismi pätee fysikaalisessa todellisuudessa. Koejärjestely on näppärä ja paranneltu versio kaksoisrakokokeesta: fotoneja ammutaan kaksoisrakoon risteävillä radoilla. Deterministisistä teorioista (mm. Bohmin pilottiaaltoteoria, jonka kumoaminen oli tutkijoiden tavoitteena) johdetut propositiot väittävät, että kun kaksi detektoria on kaksoisraon symmetria-akseliin nähden samalla puolitasolla, kaksi ristiinamuttua fonia eivät aiheuta havaintoa molemmissa detektoreissa. Molemmissa detektoreissa kuitenkin havaittiin normaalin kvanttimekaniikan ennustama määrä yhteisesiintymiä.

16. fysiikan laki: fysikaalisessa todellisuudessa vallitseva objektiivinen säännönmukaisuus

Termi ”laki” on ongelmallinen fysiikassa: Onko olemassa ”lakeja”, joita fysikaalinen todellisuus ”noudattaa”, vai ovatko nämä oletetut ”lait” vain se tapa, jolla fysikaalinen todellisuus on? Vai ovatko ”lait” ja niihin liittyvät havaitut korrelaatiot vain ilmentymä siitä,

¹⁷Sklar [45] (s. 123) käyttää aidosta todennäköisyysilmiöstä ilmaisua ”pure chance without hidden variables”.

kuinka fysikaalista todellisuutta havaitaan? Termi ”laki” voi viitata neljään eri käsitteeseen: (1) objektiivinen säännönmukaisuus, (2) kaava, jonka tarkoitus on kuvata objektiivista säännönmukaisuutta, (3) lakiin perustuva sääntö (tai yhdenmukainen käytäntö), ja (4) periaate, joka koskee jotakin edellä mainittua [14]. Vain ensin mainittu on sisällöltään ontologinen, ja muut ovat epistemologisia, mistä syystä ensimmäinen vaihtoehto on ainoa sovelias kandidaatti ”lain” määritelmäksi (ontologisen) fysikaalisen todellisuuden mallissa. Fysiikan lain asema ei itse fysikaalisen todellisuuden mallissa ole keskeinen, koska vaikka nämä lait ovat objektiivisia ja fysikaalinen todellisuus ”noudattaa” niitä poikkeuksetta, niin fysikaalisen todellisuuden havaittu ”käytös” ei ole lakien seuraus vaan johtuu vuorovaikutusten ja aikakehityksen muodosta. Fysiikan ”laki” on ihmisen tapa yrittää etsiä säännönmukaisuuksia ja korrelaatioita fysikaalisesta todellisuudesta – hahmottaa vuorovaikutuksia ja aikakehitystä.

17. superpositioperiaate: periaate, jonka mukaan on olemassa superpositiotiloja

Superpositioperiaatteen mukaan yhtälön ratkaisujen lineaarikombinaatio on myös yhtälön ratkaisu. Se pätee kaikille lineaarisille differentiaaliyhtälöille (kuten Schrödingerin yhtälölle), ja koska kaikki fysiikan perusteoriat ovat lineaarisia, on syytä olettaa, että myös fysikaalisessa todellisuudessa on superpositiotiloja. Käytännössä esimerkiksi aaltoyhtälöille pätee, että mikäli A on aalto (aaltoyhtälön ratkaisu) ja B on aalto (aaltoyhtälön ratkaisu), niin tällöin myös $A + B$ on aalto (aaltoyhtälön ratkaisu). Superpositioperiaatetta on käsitelty laajemmin esimerkiksi viitteessä [46].

18. fysikaalinen objekti: hyvin määritelty kokoelma alkeishiukkasia ja/tai alkeishiukkasten välisiä korrelaatioita

Fysikaalinen objekti on jotain tuttua jokapäiväisestä elämästä. Hiukkasista koostuva fysikaalinen objekti voi olla tuoli, talo, hiukkasiihdytin, galaksi tai 60 W hehkulampun aikaansaama fotonikenttä. ”Eimateriaalisten”, pelkästään korrelaatioista koostuvien objektien, kuten raha pankkitilillä, tietokonepelissä olevat esineet tai roolipelissä heitettävä kuvitteellinen tulipallo, ”objektius” on hieman kyseenalaista, mutta ne ovat fysikaalisia – Ferrareja myyvässä liikkeessä saa aivan erilaista kohtelua riippuen pankkitilin saldosta, ja liveroolipe-laaja kaatuu ja huutaa tuskissaan, kun joku heittää häntä ”tulipallolla”. Fysikaalisten objektien määrittäminen hiukkasten avulla on

järkevää kahdesta syystä: ensinnäkin toisen kvantisoinnin mukaiset teorit kykenevät tavoittamaan fysikaalisen todellisuuden sen puolen, että kentät ovat hiukkaskenttiä, ja toiseksi vaikka fysikaalisen todellisuuden asiat voidaan kuvata käyttäen tiloja, ihmisillä on tapana ymmärtää hiukkaset helpommin, koska ihmiset eivät kykene näkemään suoraan esimerkiksi tuolin tilaa.

Huomautettakoon, että ihmisten tapa hahmottaa objekteja avaa ovet ja ikkunat monille filosofisille ongelmille. Näistä ongelmista merkittävin on *konventionaalisten (intensionaalisten) olioiden ongelma* [31]: VI.7, [47]. Osittain kyseinen ongelma liittyy objektin identiteettiin ja identiteetin säilymiseen ja osittain objektin rajoihin. Luultavasti tunnetuin esimerkki on varustamoyrittäjä Theseuksen laiva. Laiva sattuu olemaan korjauksen tarpeessa melko usein, ja lopulta kaikki laivan alkuperäiset osat on vaihdettu uusiin. Onko tämä korjattu versio sama Theseuksen laiva? Entä siinä tapauksessa, että joku kaatopaikan tonkija etsii kaatopaikalta kaikki Theseuksen laivan alkuperäiset osat ja kokoaa niistä itselleen laivan? Tai, mitä tapahtuu, kun chinchilla syö kukan. Missä kukka loppuu ja chinchilla alkaa? Erityisesti, kun jotkut hiukkaset, jotka aikoinaan olivat osa kukkaa, ovatkin myöhemmin osa chinchillaa? Antamassani määritelmässä nämä demarkaatio-ongelmat kohdataan ajatuksella ”hyvin määritellystä”. Hyvin määritelty ei ole yksikäsitteinen – se on vain niin hyvä kuin ihmiset osaavat tehdä. Vain harvoin fysikaalisessa todellisuudessa on teräviä rajoja olemassa juuri meitä varten, mutta kuitenkin fysikaaliset objektit ovat objektiivisesti olemassa – vaikkakin melko epämääräisiä.

19. fysikaalisen objektin tila

Esimerkiksi tuolin olemassaolon muoto ei ole niin triviaali kuin tuolia katsomalla voisi ajatella. Tuoli on kokoelma hiukkasia (nykyisen fysikaalisen tietämyksen mukaan pätevimmässä ja täsmällisimmässä hiukkaskuvauksessa kvarkkeja jne.) ja hiukkasten välisiä korrelaatioita. *Fysikaaliseen objektiin* liittyvä päättely paljasti, että esimerkin tuolin rajat ovat epämääräiset, mutta seuraavaksi osoittautuu, että koko tuoli rajoineen kaikkineen on erittäin epämääräinen. Tällä hetkellä olemassaolevan tuolin hiukkaset ovat korreloituneet useiden Maan ja Aurinkokunnan hiukkasten kanssa. Lisäksi tuolilla on (kvantti)korrelaatioita muiden tuolin olemassaolon vaihtoehtojen kanssa – jossain realisoitumattomassa vaihtoehdossa tuolin hiukkaset ovatkin osa peruskalliota tai mahdollisesti osa maailmankaikkeudessa olevaa fotonikenttää. Tuolin tila on periaatteessa lomittunut

superpositio kaikista tuolin mahdollisista olemisen tavoista. Koska fysikaalinen todellisuus on melko vanha (verrattuna meihin ihmisiin), fysikaalinen todellisuus on pullollaan epätriviaaleja kvanttikorrelaatioita. Vaikka fysikaalisen objektin tila on erittäin abstrakti ja normaalin elämän kokemuksista kaukana oleva käsite, niin se on tarpeellinen käsite kvanttifysiikassa – varsinkin silloin, kun tutkitaan fysikaalisen todellisuuden perustavaa laatua olevia piirteitä. Fysikaalisen todellisuuden mallinnuksessa tuolin tilan matemaattinen abstraktio on *tuolin aaltofunktio* tai *tuolin tilavektori*.

20. karkeistus: ilmiö, joka määrittelee fysikaalisen objektin koostumuksen

Kvanttifysikaalisessa mallinnuksessa karkeistus on yleinen termi, joka tarkoittaa prosessia, jossa fundamentaalista teoriasta tehdään efektiivinen teoria poistamalla epärelevantteja vapausasteita. Käytännössä tämä tarkoittaa systeemin tai alisysteemien rajojen ja sisällön määrittelemistä tai määrittelemisen keinoja. Samanlainen prosessi vaikuttaa tapahtuvan myös fysikaalisessa todellisuudessa. Fysikaalisessa todellisuudessa havaitaan harvoin tilan kaltaista käytöstä, ja objektin kaltainen käytös dominoi. Loppujen lopuksi on olemassa melko tarkkoja rajoja (esimerkiksi suljetun kirjan sivut pysyvät erillisinä), vaikka taustalla on kvanttifysikaalinen tiloihin liittyvä epämääräisyys. Tämä fysikaalisessa todellisuudessa tapahtuva karkeistus on yksikäsitteinen ja objektiivinen. Oletan, että sen taustalla ovat kvanttikorrelaatiot ja dekoherenssi. Teoreettinen koherenssitutkimus käyttäen riittävän monimutkaista ja realistista fysikaalisen todellisuuden mallia saattaa auttaa ymmärtämään karkeistusta paremmin.

21. fysikaalisen todellisuuden mahdollinen tila

Fysikaalisen todellisuuden tila on kaikkien fysikaalisen todellisuuden mahdollisten tilojen summa (superpositio). Bekensteinin reunaehtojen [48, 49, 50] mukaan (suljetulla) fysikaalisella todellisuudella voi olla vain äärellinen määrä mahdollisia tiloja. Äärellisyyttä on käsitelty tarkemmin alaluvussa 5.1.

22. korrelaatio: kahden tai useamman ilmiön yhdessä esiintyminen

Havainnollistetaan korrelaatiota klassisella esimerkillä: aamulla töihin lähtiessäsi otatkin vahingossa vain yhden hansikkaan ja tunget sen taskuusi. Mikäli löydät taskustasi vasemman käden hansikkaan, niin oikean käden hansikas on kotona hattuhyllyllä. Vasemman ja

oikean käden hansikkaiden välillä on tässä tapauksessa korrelaatio. Vuorovaikutukset ja aikakehitys saavat aikaan korrelaatioita eri objektien (ja tilakuvauksessa mahdollisten tilojen) välille. Korrelaatio on täydellinen, mikäli kahden ilmiön yhteisesiintymisen todennäköisyys on 1. Mietitään seuraavaksi 10^9 :n kaappikellon korrelaatioita. Kaappikellot näyttävät satunnaista aikaa, ja niiden aikayksikön suuruus on satunnainen, mutta kuitenkin melko lähellä ”standardoitua” aikayksikköä. Seuraavaksi valitaan satunnaisesti kaksi kaappikelloa ja lasketaan niiden välinen korrelaatio kellon näyttämästä ajasta ja heilurin heilahdusajasta ja vaiheesta. On hyvin mahdollista, että olemme valinneet sellaiset kellot, jotka ovat täydellisesti korreloituneet, vaikka niillä ei ole keskenään muuta tekemistä kuin että ne ovat kaappikelloja, joilla on satunnaiset alkuehdot. Kahden korreloituneen ilmiön välillä ei tarvitse olla minkäänlaista vuorovaikutusta menneisyydessä, mutta todennäköisyys, että ilmiöt liittyvät toisiinsa, kasvaa korrelaatioiden kasvaessa.

23. kvanttikorrelaatio: kvanttifysikaalisiin superpositiotiloihin liittyvä korrelaatio

Kvanttikorrelaatioita ei voida selittää klassisten korrelaatioiden viitekehityksessä. Lomittuneiden tilojen ja eri mahdollisuuksien välillä olevien superpositiotilojen ajatellaan yleisesti olevan kvanttikorreloituneita. Tarkastelen seuraavaksi pintapuolisesti spin $1/2$ -hiukasta selventääkseni kvanttikorrelaatioiden olemusta. Olkoon spin $1/2$ -hiukkanen superpositiotilassa

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_z\rangle + |\downarrow_z\rangle). \quad (2.1)$$

Tilan tiheysmatriisi on

$$\rho_q = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}_z. \quad (2.2)$$

Tiloista spin ylös ja spin alas muodostetun statistisen sekatiilan (ei poikkea klassisesta kolikonheitosta mitenkään, mikäli kolikonheitto on aito todennäköisyysilmiö) tiheysmatriisi on

$$\rho_c = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}_z. \quad (2.3)$$

Suoritettaessa mittaus spin x -kannassa saadaan tulos \uparrow_x todennäköisyydellä 1, mikäli mitattava systeemi on ρ_q , ja mikäli mitattava

systemi on ρ_c , niin tulos on \uparrow_x todennäköisyydellä 0.5 ja \downarrow_x todennäköisyydellä 0.5. Täten on järkevää olettaa superpositiotilalla olevan jonkinlaisia (kvantti)korrelaatioita, jotka aiheuttavat havaittavia seurauksia.

24. lomittuminen: kvanttikorrelaatio kahden tai useamman hiukkasen välillä

Palataan määritelmässä 22 esitettyyn hansikasesimerkkiin, missä toinen hansikas jäi kotiin ja toinen oli taskussa. Esimerkki kertoi klassisista korrelaatioista, mutta entä jos hansikkaiden välillä olisi kvanttikorrelaatioita? Tämä edellyttää sitä, että hansikkaat voidaan preparoida superpositiotilaan, jossa toinen hansikas on kotona ja toinen taskussa. Tämä tila on muodoltaan

$$|\psi_g\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|l_p r_h\rangle + |r_p l_h\rangle), \quad (2.4)$$

missä l (r) viittaa vasemman (oikean) käden hansikkaaseen ja alaindeksi p (h) taskuun (kotiin). Kahden toistensa kanssa korreloitumattoman hansikkaan superpositiotila on

$$|\psi_G\rangle = \frac{1}{2}(|l_p\rangle + |r_p\rangle) \otimes (|l_h\rangle + |r_h\rangle). \quad (2.5)$$

Vastaavat tiheysmatriisit ovat

$$\rho_g = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

ja

$$\rho_G = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Lomittuneen systeemin redusoitu tiheysmatriisi vaikkapa vasemman käden hansikkaalle on

$$\rho_l = \text{Tr}_r \rho_g = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.8)$$

mikä vaikuttaa kolikonheitolta, kun taas luonnollisesti ρ_G :n redusoitu tiheysmatriisi on superposition tiheysmatriisi. Katsotaan seuraavaksi, miltä eri tiheysmatriisien entropiat (katso luvut 5.2.1 ja 5.3)

näyttävät:

$$S_{id,G} = 0, \quad (2.9)$$

$$S_{id,g} = 0, \quad (2.10)$$

$$S_{re,G} = 0, \quad (2.11)$$

$$S_{re,g} = S_l + S_r = 2\ln 2. \quad (2.12)$$

Tapauksessa ρ_g koko systeemin ja alisysteemien yhteenlasketun entropian eron selittää se, että hansikkaiden väliset korrelaatiot sisältävät informaatiota, kun taas tapauksessa ρ_G hansikkaiden välisten korrelaatioiden informaatio sisältö on 0 (mikä on luonnollinen tulos, koska kyseisessä tapauksessa hansikkaiden välillä ei ole korrelaatioita). Kvanttisysteemin, joka on korreloitunut samalla tavalla kuin ρ_g , sanotaan olevan lomittunut systeemi. Lomittuneiden sistemien välisiä korrelaatioita on kokeellisesti havaittu (katso esimerkiksi [51]), eikä niitä voida mitenkään selittää klassisten korrelaatioiden avulla. Lomittuminen on erittäin tärkeä käsite kvantti-informaatioteoriassa. Aiheesta enemmän viitteissä [40, 52].

25. koherenssi: aallonkaltaisten entiteettien korrelaatio

Aihetta on käsitelty tarkemmin luvussa 5.

26. kvanttikoherenssi: kvanttikorrelaatioiden voimakkuuden mitta

Kvanttikohereenssi on säilyvä suure. Noetherin teoreeman mukaan fysikaalisen todellisuuden symmetrioiden ja säilyvien suureiden välillä on vastaavuus. Matemaattisesti koherenssia vastaava symmetria on tiheysmatriisin invarianssi kantavektoreiden valinnan suhteen. Käsitteellisellä tasolla vastaava symmetria on tilan invarianssi kantavektoreiden valinnan suhteen.

Määrittelen tiheysmatriisin ρ kvanttikoherenssiksi $\Xi = \frac{N}{N-1} (\lambda_{max} - N^{-1})$, missä $N = \text{Dim}(\rho)$ ja λ_{max} tiheysmatriisin ρ suurin ominaisarvo. Kvanttikohereenssi on intensiivinen suure Aihetta käsitellään tarkemmin luvussa 5 ja sen alaluvuissa.

27. dekoherenssi: koherenssin väheneminen

Aihe ongelmineen on käsitelty luvussa 5 ja sen alaluvuissa.

28. rekoherenssi: koherenssin lisääntyminen

Aihe on käsitelty alaluvussa 5.1.

29. entropia: mahdollisten tilojen määrän ja niitä vastaavien todennäköisyyksien ekstensiivinen mitta

Entropia on säilyvä suure. Entropiaa on käsitelty alaluvussa 5.2.

Luku 3

Tunnetuista ja havaituista koherenssi-ilmiöistä

Suotakoon minun edetä tieteellisen edistyksen mukaan kronologisesti ja olla vielä puuttumatta tarkemmin siihen, mitä koherenssi oikeastaan on. Edellisessä luvussa esitetyille määritelmille löytyy tarkempia perusteluja luvuista 4 ja 5. Tässä luvussa keskityn lähinnä kokeellisempaan koherenssitutkimukseen, sen historiaan ja viimeaikaisiin tuloksiin.

Vaikka kvanttifysikaaliset koherenssi-ilmiöt ovat erittäin yleinen ilmiötyyppi fysikaalisessa todellisuudessa, niin varsinkin puhtaiden koherenssi-ilmiöiden havaitseminen on erittäin työlästä, sillä suurin osa fysikaalisesta todellisuudesta on melko epäkoherentissa tilassa, minkä lisäksi dekoherenssi (koherenssi-ilmiö sekin) pyrkii vähentämään yksittäisen alisysteemin koherenssia. Tästä syystä degeneroituneiden kvanttikaasujen (Bose-kondensaatit ja ultrakylmät fermionisysteemit) teoreettinen ja kokeellinen tutkimus muodostavat soveliaan ”laboratorion” koherenssi-ilmiöiden ihmettelyyn.

Lukijan kannattaa pitää mielessä, että käytän tässä teoksessa sanaa ”koherenssi” kahdella eri tavalla. Toinen näistä tavoista on niin sanotun fysiikan normaalin paradigman mukainen. Toinen tapani käyttää sanaa ”koherenssi” perustuu tässä teoksessa esittelemääni koherenssiteoriaan. Valitsemani tapa johtuu siitä, että yleisesti asioilla, joihin sanalla ”koherenssi” on totuttu viittaamaan, on jotain tekemistä esittämäni eksaktin koherenssin määritelmän kanssa, mistä syystä en ole nähnyt tarpeellisena keksiä uutta termiä. Käytäntöni saattaa tuntua ristiriitaiselta ja sekavalta, mutta asiayhteyksistä pitäisi selvitä, mihin sana ”koherenssi” kyseisessä kohdassa viittaa. Esittämäni eksaktin tavan hahmottaa koherenssia on tarkoitus lisätä ymmärrystä koherenssi-ilmiöinä pidetyistä ilmiöistä, koota yhteen aikaisempaa tietoa kyseisistä ilmiöistä ja toimia kyseisiä il-

miöitä selittävänä yleisenä teoreettisena periaatteena.

Sanalla ”koherenssi-ilmio” viitataan yleensä ilmiöihin, joita tapahtuu systeemeissä, jonka koherenssi on suuri tai ilmiöihin, joissa koherenssia siirtyy alisysteemistä toiseen tai systeemin ja sen ympäristön välillä. Ensin mainittujen koherenssi-ilmioiden yksi tunnusomainen piirre on se, että kyseisissä systeemeissä on hyvin vähän entropiaa.

3.1 Yleistä teoriaa Bose-kondensaateista

Fysikalisessa todellisuudessa olevat hiukkaset voidaan spinin mukaan jakaa kahteen kategoriaan: bosoneihin (kokonaislukuspinilliset hiukkaset) ja fermioneihin (puolilukuspinilliset hiukkaset). Bosonien ja fermionien ero on, että bosonit noudattavat Bose-Einsteinin statistiikkaa ja fermionit Fermi-Diracin statistiikkaa¹. Ero tulee siitä, että Fermi-Diracin statistiikkaa noudattaville hiukkasille pätee Paulin kieltoääntö, eli kahdella fermionilla kaikki kvanttitilat eivät voi olla identtisiä². Bosoneilla tätä rajoitusta ei ole, joten ne voivat pinoutua sankoin joukoin samaan kvanttitilaan.

Bosoneilla ja fermioneilla vaikuttaa olevan erilaiset roolit fysikaalisessa todellisuudessa. Alkeishiukkaset (tällä sanalla viitataan tässä yhteydessä kvarkkeihin ja leptoneihin) ovat fermioneja, ja kaikki arkinen ”kova” aine koostuu niistä. Toisen kvantituksen mukaisissa teorioissa (kvanttikenttäteoriat) ”perusvuorovaikutukset” toimivat siten, että fermionit, reaaliset ja virtuaaliset bosonit vaihtavat keskenään virtuaalisia bosoneja. Vuorovaikutusten aiheuttamat voimat ovat seurausta säilyvien suureiden säilymisistä näissä vuorovaikutuksissa ja voimat välittyvät virtuaalisten

¹Ajatellaan identtisten hiukkasten muodostamaa systeemiä. Systeemin aaltofunktion $\Psi(r_1, r_2 \dots r_i \dots r_j \dots r_N)$ todennäköisyystiheys on $|\Psi(r_1, r_2 \dots r_i \dots r_j \dots r_N)|^2$. Koska ”et voi merkitä elektronia, et voi maalata sitä punaiseksi” [53], todennäköisyystiheys ei muutu, vaikka identtisiä hiukkasia kuinka vaihdettaisiin keskenään, eli $|\Psi(r_1, r_2 \dots r_i \dots r_j \dots r_N)|^2 = |\Psi(r_1, r_2 \dots r_j \dots r_i \dots r_N)|^2$. Tämä saadaan kahdella tavalla, eli symmetrisessä tapauksessa $\Psi(r_1, r_2 \dots r_i \dots r_j \dots r_N) = \Psi(r_1, r_2 \dots r_j \dots r_i \dots r_N)$, ja antisymmetrisessä tapauksessa $\Psi(r_1, r_2 \dots r_i \dots r_j \dots r_N) = -\Psi(r_1, r_2 \dots r_j \dots r_i \dots r_N)$. Osoitetaan, että hiukkasilla, joiden aaltofunktio on symmetrinen, on kokonaislukuspin, ja hiukkasilla, joiden aaltofunktio on antisymmetrinen, on puolilukuspin.

²Tämä on luonnollinen seuraus aaltofunktion antisymmetrisyydestä. Kahden korreloitumattoman identtisen hiukkasen aaltofunktio voidaan kirjoittaa kahdella eri tavalla: $\Psi_1(r_1, r_2) = \psi_a(r_1)\psi_b(r_2)$ ja $\Psi_2(r_1, r_2) = \psi_a(r_2)\psi_b(r_1)$. Koska fysikaalinen todellisuus ei erota edellä mainittuja kuvauksia toisistaan, tämä on yhtäpitävää sen kanssa, että systeemin kuvaus olisi superpositio näistä kahdesta vaihtoehdosta, eli $\Psi(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) - \psi_a(r_2)\psi_b(r_1))$ [miinus tulee antisymmetrisyydestä]. Nyt, mikäli $a = b$, on $\Psi = 0$.

bosonien avulla. Koska spin on ainoa merkittävä tekijä hiukkasen bosoniuden tai fermioniuden suhteen, niin alkeishiukkasista kootun hiukkasen spin määrittää, onko kyseinen hiukkanen bosoni vai fermioni. Protoni ja neutroni koostuvat kolmesta kvarkista, joten ne ovat fermioneja, ja ^3He -atomi koostuu kahdesta protonista, kahdesta elektronista (leptoni, joka on fermioni) ja yhdestä neutronista, joten sekin on fermioni, mutta taas ^4He -atomi tai vaikkapa ^{87}Rb -atomi on bosoni, koska se koostuu parillisesta määrästä fermioneja. Nämä fermioneista kootut bosonit eivät yleensä päädy samaan kvanttitilaan, sillä se edellyttäisi, että niiden aaltofunktiot peittäisivät toisiaan, mikä taas tarkoittaisi niiden avaruudellisten todennäköisyysjakaumien olevan päällekkäin, eli ne olisivat termisen de Broglie -aallonpituuden $\lambda_T = h/\sqrt{2\pi m_{87\text{Rb}}kT}$ tarkkuudella samassa paikassa. Keskimääräisen ^{87}Rb -atomin de Broglie -aallonpituus ”normaalissa” lämpötilassa $T \sim 300$ K on $\lambda_T \sim 1.1 \times 10^{-11}$ m, mutta atomin säde taas $r_{87\text{Rb}} \sim 2 \times 10^{-10}$ m, eli aineaalto on erittäin lokalisoitunut. Täten kaksi lähekkäistä atomia kokevat toisensa kimppuina keskenään vuorovaikuttavia fermioneja eikä yhtenä bosonina. Edellisen perusteella vaikuttaa, että teoriassa ^{87}Rb -atomeja voitaisiin pinota samaan kvanttitilaan, mikäli lämpötilaa lasketaan riittävästi, jolloin terminen de Broglie -aallonpituus olisi riittävän pitkä mahdollistamaan päällekkäiset aineaalto.

Ennen kuin tutustutaan tarkemmin mahdollisuuteen kasata bosonia-
tomeja samaan kvanttitilaan, niin tarkastellaan hieman bosonien ja fermionien statistiikkaa. Oletetaan, että ennalta kiinnittämätön määrä keskenään vuorovaikuttamattomia ja identtisiä hiukkasia on potentiaalissa, jonka energiatasot ovat ϵ_l , missä $0 \leq l \leq L$ siten, että probleeman korkein mahdollinen energiataso on ϵ_L . Tällöin monihiukkassysteemin Hamiltonin operaattorin esitys Fockin avaruudessa on

$$H = \sum_l \epsilon_l n_l, \quad (3.1)$$

missä $n_l = a_l^\dagger a_l$ on tilan l miehityslukuoperaattori. Bosoneille pätevät kommutaatio säännöt

$$[a_l, a_{l'}] = [a_l^\dagger, a_{l'}^\dagger] = 0, \quad (3.2)$$

$$[a_l, a_{l'}^\dagger] = \delta(l, l') \quad (3.3)$$

ja fermioneille antikommutaatio säännöt

$$[a_l, a_{l'}]_+ = [a_l^\dagger, a_{l'}^\dagger]_+ = 0, \quad (3.4)$$

$$[a_l, a_{l'}^\dagger]_+ = \delta(l, l'). \quad (3.5)$$

Käytetään Fockin avaruuden kantavektorijoukkoa $\{|\{n_l\}\rangle\}$, missä luku-
joukko $\{n_l\}$ ilmoittaa mahdollisten energiatilojen miehitykset. Tässä kan-
nassa ominaisenergia on $E = \sum_l \epsilon_l n_l$ ja hiukkasluvun ominaisarvo $N =$
 $\sum_l n_l$. Täten suurkanoninen tilasumma bosoneille on

$$\begin{aligned} Z_{G,BE} &= \sum_{\{n_l\}} \exp(-\beta \sum_l n_l (\epsilon_l - \mu)) \\ &= \prod_l \left(\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n (\epsilon_l - \mu)} \right) = \prod_l \frac{1}{1 - e^{-\beta (\epsilon_l - \mu)}} \end{aligned} \quad (3.6)$$

ja fermioneille

$$Z_{G,FD} = \prod_l \left(\sum_{n=0}^1 e^{-\beta n (\epsilon_l - \mu)} \right) = \prod_l (1 + e^{-\beta (\epsilon_l - \mu)}), \quad (3.7)$$

missä μ on kemiallinen potentiaali ja $\beta = \frac{1}{kT}$. Sekä bosoneille että fermio-
neille monihiukkastilan $|\{n_l\}\rangle$ todennäköisyys on

$$P(|\{n_l\}\rangle) = \frac{1}{Z_G} \exp\left(-\beta \sum_l n_l (\epsilon_l - \mu)\right). \quad (3.8)$$

Nyt miehitysluvun odotusarvo on

$$\langle n_l \rangle = \frac{1}{Z_G} \sum_{\{n_k\}} n_l \exp\left(-\beta \sum_l n_l (\epsilon_l - \mu)\right) = \frac{1}{e^{\beta (\epsilon_l - \mu)} \mp 1}, \quad (3.9)$$

missä miinus on Bose-Einsteinin statistiikalle ja plus Fermi-Diracin statis-
tiikalle. Miehityslukujen jakauma riippuu kemiallisesta potentiaalista μ .
Yhtälöstä (3.9) huomataan, että ideaaliselle bosonisysteemille $\mu \leq 0$, kos-
ka voidaan aina valita, että $\epsilon_0 = 0$. Fermioneille tällaista rajoitetta ei ole,
mutta mikäli $\mu \gg kT$, niin tällöin fermionisysteemi on erittäin degeneroi-
nut ja sen kuvaamisessa kvanttifysiikka on välttämätöntä järkevien
tulosten saamiseksi.

Bosisysteemien hiukkas määrä on

$$N = \sum_l \frac{1}{e^{\beta (\epsilon_l - \mu)} - 1}. \quad (3.10)$$

Arvioidaan hieman systeemin ominaisuuksia muuttamalla summa inte-
graaliksi olettamalla vapaat hiukkaset, eli $\epsilon = \frac{p^2}{2m}$:

$$\sum \rightarrow \frac{V}{h^3} \int_{\Omega} d\Omega \int p^2 dp = \frac{V 2\pi (2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^{\infty} \sqrt{\epsilon} d\epsilon. \quad (3.11)$$

Nyt,

$$\rho = \frac{N}{V} = \frac{2\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\epsilon}}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1} d\epsilon. \quad (3.12)$$

Tiheyden pitäminen vakiona on mahdotonta, kun lämpötilaa lasketaan riittävästi. Asettamalla yhtälöstä (3.12) $\mu \rightarrow 0$ saadaan ratkaistua kriittinen lämpötila

$$T_c = \frac{h^2}{2\pi m k} \left(\frac{\rho}{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)} \right)^{2/3}, \quad (3.13)$$

missä ζ on Riemannin zetafunktio³ ja $\zeta\left(\frac{3}{2}\right) \sim 2.612$. Kriittisen lämpötilan T_c alittumisen jälkeen systeemin bosonit alkavat joukolla kerääntyä alimmalle energiatilalle $\epsilon_0 = 0$, $\mathbf{p} = 0$. Tätä kutsutaan Bose-kondensaatioksi. Kriittinen lämpötila antaa rajan sille, kuinka alhainen lämpötilan täytyy olla, jotta yksittäisten bosonien aaltofunktiot alkavat olla merkittävästi päällekkäin. Luonnollisesti tilanteessa $T < T_c$ yhtälö (3.12) ei anna enää oikeaa kuvausta koko bosonisysteemistä, vaan tila ϵ_0 pitää käsitellä erikseen.

Tässä yhteydessä en puutu tämän enempää yleiseen Bose-kondensaateja käsittelevään teoriaan, vaan seuraavaksi kerron lyhyesti, miksi nämä kondensaatit ovat mielestäni kiinnostavia. Ensinnäkin se, että yksittäisten mikroskooppisten hiukkasten aaltofunktiot ovat päällekkäin muodostaen makroskooppisen aaltofunktion, antaa mahdollisuuden tutkia kvantti-ilmiöitä makroskooppisessa mittakaavassa. Toiseksi, Bose-kondensaatteja on kyetty menestyksekkäästi tekemään vuodesta 1995 alkaen eri alkuaineista (⁷Li [54], ⁸⁷Rb [55], ²³Na [56], spin-polarisoitu vety [57], metastabiili ⁴He-kaasu [58, 59], ⁴¹K [60], ⁸⁵Rb [61], ¹³³Cs [62], ¹⁷⁴Yb [63] ja dipolaarinen ⁵²Cr [64]). Kolmanneksi, koska kondensoituneen atomiryppään entropia on hyvin alhainen, niin Bose-kondensaateissa saattaa esiintyä mielenkiintoisia koherenssi-ilmiöitä, kuten kondensaattien välistä interferenssiä [65], kollektiivisia oskillaatioita (esim. Rabi-oskillaatioita) eri kondensaattitilojen välillä [66, 67, 68], vortekseja [69, 70, 71] ja solitoneja [72, 73] – muutamia teoreettisia ja kokeellisia tutkimuksia mainitakseni.

Erityisen mielenkiintoisen koherenssi-ilmiöperheen muodostavat kahden eri kondensaattitilan välillä tapahtuvat ilmiöt, joista jatkossa keskityn lähinnä atomi- ja molekyylikondensaattitiloihin, koska bosonimolekyyleistä muodostunut kondensaatti on jo itsessään mielenkiintoinen. Vielä vajaa kymmenen vuotta sitten tiedeyhteisössä väännettiin kättä, onko molekyylikondensaatti ylipäänsä mahdollista saada käytännössä aikaan, ja jos

³ $\int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{e^x - 1} dx = \int_0^\infty dx \sqrt{x} (e^{-x} + e^{-2x} + e^{-3x} + \dots) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} (1 + 2^{-3/2} + 3^{-3/2} + \dots) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \zeta\left(\frac{3}{2}\right)$

on, niin kuinka sen voisi havaita [74]. Sittemmin molekyylikondensaattien olemassaolo onnistuttiin verifioimaan epäsuorasti teoreettisen työn ja kokeellisen havaitsemisen yhteistyönä [4, 66, 67, 68, 72, 75, 76, 77, 78]. Molekyylikondensaatin tuottamiseen on kaksi metodologisesti erilaista lähestymistapaa: fotoassosiaatio, jossa laser(e)illa kytketään toisiinsa atomi- ja molekyylikondensaattitilat [66, 67, 68, 72, 75], ja magnetoassosiaatio, jossa magneettikenttää adiabaattisesti muuttamalla siirretään systeemin tasapainotila degeneroitunutta atomitilaa suosivalta puolelta Feshbachin resonanssin läpi molekyylikondensaattia suosivalle puolelle [4, 76, 77, 78]. Vaikka käytännössä kyse on aivan erilaisista lähestymistavoista, niin teoreettisesti ajateltuna (ja yhtälöitä katsomalla) mekanismi on pohjiltaan sama (artikkeli I).

Erittäin degeneroitunut fermionisysteemi on pääosin keskittynyt faasiavaruudessa fermienergian (tai -liikemäärän) rajaamaan alueeseen, eli fermienergiaa alemmat energiatasot ovat harvoja poikkeuksia lukuunottamatta täynnä. Mitä tapahtuu, kun fotoassosiaatiota tai magnetoassosiaatiota sovelletaan degeneroituneeseen fermionisysteemiin? Mikäli alkutilana on kaksi degeneroitunutta fermionisysteemiä, niin tuloksena saadaan molekyylikondensaatti [4, 76, 77, 78], ja jos taas degeneroituneen fermionisysteemin parina on atomikondensaatti, niin päädytään degeneroituneeseen fermionimolekyylylisyhteeseen (artikkelit I ja II). Näiden eri tilojen välillä voi tapahtua aivan samanlaisia kollektiivisia koherenssi-ilmiöitä kuin atomi- ja molekyylikondensaattitilojen välillä, vaikka toisiinsa kytkettyjen tilojen hiukkaset noudattavatkin eri statistiikkaa.

Seuraavaksi tarkastelen hieman yksityiskohtaisemmin muutamia mielenkiintoisia koherenssi-ilmiöitä.

3.2 Atomi- ja molekyylikondensaateista, Rabi-oskillaatioista ja fotoassosiaatiosta

Tarkastellaan N :n bosonin systeemiä, jolla on kaksi mahdollista tilaa $|A\rangle$ ja $|B\rangle$, joiden välinen energiaero eli viritys on $\hbar\delta$. Mikäli systeemin Hamiltonin operaattori on muotoa

$$\frac{H}{\hbar} = \delta b^\dagger b - \frac{\kappa}{2}(b^\dagger a + a^\dagger b), \quad (3.14)$$

missä a ja b ovat tiloihin $|A\rangle$ ja $|B\rangle$ operoivat hävitysoperaattorit, $\hbar\kappa$ tilojen välinen kytkentä ja $N = a^\dagger a + b^\dagger b = n_a + n_b$, niin huomataan, että systeemin hiukkaset oskilloivat näiden kahden tilan välillä. Mielivaltainen alkutila $\Psi = |n_a\rangle \otimes |n_b\rangle$ voidaan kirjoittaa hiukkasluvun säilymisen vuoksi

muotoon

$$|\Psi\rangle = |n_b\rangle \otimes |N - n_b\rangle = |N_b\rangle, \quad (3.15)$$

jonka jälkeen Schrödingerin yhtälön

$$i\hbar\partial_t\Psi(t) = H\Psi(t) \quad (3.16)$$

ratkaisuksi saadaan kytkettyjen differentiaaliyhtälöiden ryhmä ($\{|N_b\rangle\}$ -kannassa):

$$\begin{aligned} i|\dot{0}\rangle &= -\frac{\kappa}{2}\sqrt{N}|1\rangle \\ &\vdots \\ i|\dot{n}\rangle &= \delta n|n\rangle - \frac{\kappa}{2}\sqrt{(n+1)(N-n)}|n+1\rangle - \frac{\kappa}{2}\sqrt{n(N-n+1)}|n-1\rangle \\ &\vdots \\ i|\dot{N}\rangle &= \delta N|N\rangle - \frac{\kappa}{2}\sqrt{N}|N-1\rangle. \end{aligned}$$

Havainnollistuksen vuoksi esitän tilan $|N_b = 0\rangle$ aikakehityksen, kun $N = 1$:

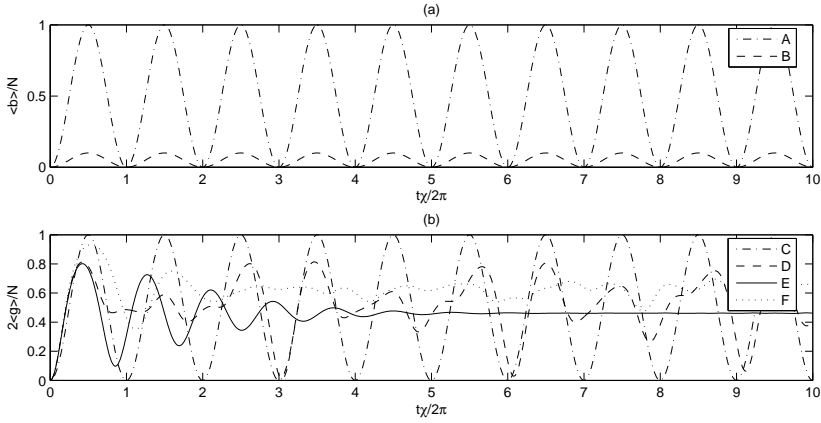
$$|0(t)\rangle = e^{-i\delta t/2}(Ae^{i\sqrt{\delta^2+\kappa^2}t/2} + Be^{-i\sqrt{\delta^2+\kappa^2}t/2})|0(t_0)\rangle. \quad (3.17)$$

Ratkaisu oskilloi virityksen lisäksi taajuudella $\chi = \sqrt{\delta^2 + \kappa^2}$, jota kutsutaan yleistetyksi Rabi-taajuudeksi [79]. Mikäli viritys δ asetetaan nolaksi, niin tällöin systeemi on resonanssissa. Ratkaisun Rabi-taajuudesta riippuva muoto pysyy samana suuremmillakin N :n arvoilla. Kuva 3.1(a) havainnollistaa asiaa.

Mikäli taas tarkasteltavana on tilanne, jossa atomeista tehdään molekyyliä (ja päinvastoin), niin ilmiö pääpiirteissään säilyy samana mutta oskillaatioihin tulee enemmän rakennetta. Fotoassosiaatiossa atomeja yhdistetään molekyyliksi soveliaassa fotonikentässä. Mikäli vapaiden atomien muodostaman perustilan ja molekyylin jonkin sidotun tilan energiaero täsmää fotonikentän fotonin energian kanssa, atomit absorboivat fotonin ja muodostavat sidotun molekyylin [66, 67, 68, 75, 80, 81, 82, 83, 84, 85]. Yksinkertaisimmillaan fotoassosiaatiovuorovaikutusta kuvaava Hamiltonin operaattori on pääpiirteissään samanmuotoinen kuin yhtälön (3.14) ilmaisema:

$$\frac{H_{A-M}}{\hbar} = \delta g^\dagger g - \frac{\kappa}{2}(g^\dagger a a + a^\dagger a^\dagger g), \quad (3.18)$$

missä g on molekyyliin operaava hävitysoperaattori. Hiukkasluvun säilymisen $N = 2g^\dagger g + a^\dagger a$ avulla mielivaltainen alkutila $\Psi = |n_a\rangle \otimes |n_g\rangle$



Kuva 3.1: Rabi-oskillaatioita (a) kahden atomikondensaattitilan ja (b) atomi- ja molekyylikondensaattitilojen välillä parametrien arvoilla (A): $N = 1$, $\delta = 0$ ja $\kappa = 10$, (B): $N = 10$, $\delta = 30$ ja $\kappa = 10$, (C): $N = 2$, $\delta = 0$ ja $\kappa = 10$, (D): $N = 10$, $\delta = 0$ ja $\kappa = 10$, (E): $N = 100$, $\delta = 30$ ja $\kappa = 10$ ja (F): $N = 100$, $\delta = 0$ ja $\kappa = 10$. Aika on skaalattu yleistetyn Rabi-taajuuden χ mukaisesti, joka on kuvassa (a) $\chi = \sqrt{\delta^2 + \kappa^2}$ ja (b) $\chi = \sqrt{\delta^2 + N\kappa^2}$. Kahden atomikondensaatin välisessä vuorovaikutuksessa (a) hiukkasluku N ei vaikuta oskillaatioiden taajuuteen. Viritys δ vaikuttaa oskillaatioiden amplitudiin ja taajuuteen. Atomi- ja molekyylikondensaatin välisessä vuorovaikutuksessa (b) tilanne muuttuu hieman: hiukkasluku N vaikuttaa oskillaatiotaajuuteen sekä oskillaatioiden rakenteeseen. Rakenne on yksinkertainen, kun $N = 2$ (molekyylikondensaattitilassa korkeintaan 1 molekyyli), jolloin oskillaation muoto ja suhde yleistettyyn Rabi-taajuuteen on sama kuin atomikondensaattien välisessä vuorovaikutuksessa (vertaa käyrät (A) ja (C)).

voidaan ilmaista pelkästään käyttäen molekyyllilukuja muodossa $\Psi = |N - 2n_g\rangle \otimes |n_g\rangle$. Hamiltonin operaattorista (3.18) saatavien Heisenbergin likeyhtälöiden

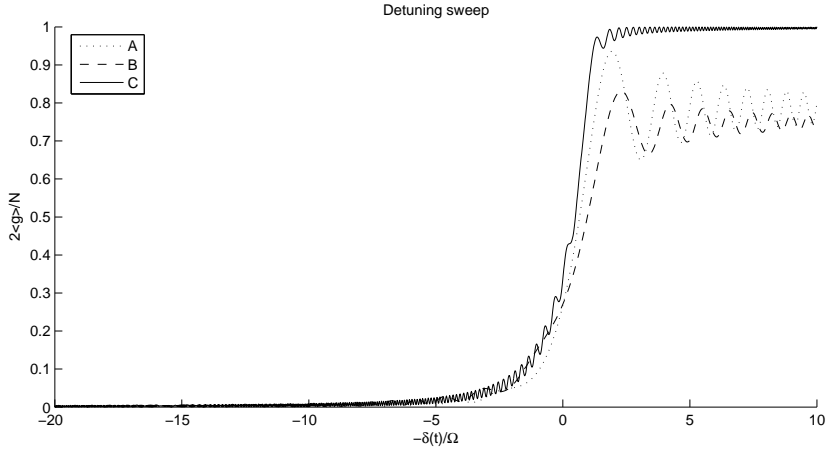
$$i\dot{a} = -\kappa a^\dagger g \quad (3.19)$$

$$i\dot{g} = \delta g - \frac{\kappa}{2} a a \quad (3.20)$$

perusteella huomataan helposti, että taajuus

$$\Omega = \sqrt{N\kappa} \quad (3.21)$$

on systeemin käytöstä kuvaava karakteristinen taajuus [66]. Nyt virituksen δ huomioon ottava yleistetty Rabi-taajuus on muotoa $\chi = \sqrt{\delta^2 + \Omega^2} = \sqrt{\delta^2 + N\kappa^2}$. Kuvassa 3.1 on verrattu keskenään atomi-atomi- ja atomi-molekyylikondensaattien välisiä oskillaatioita suhteutettuna yleistettyyn



Kuva 3.2: Molekyylijen osuus kokonaishiukkasmäärästä, kun atomi- ja molekyyli-tilan välistä viritystä muutetaan lineaarisesti ja adiabaattisesti ajan funktiona $\delta(t) = -\xi\Omega^2 t$. (A): $N = 2$, $\xi = 1$, (B): $N = 10$, $\xi = 1$ ja (C): $N = 10$, $\xi = 0.1$. Kuvan aikayksikkönä on käytetty dimensiotonta virituksen muutoksen ja karakteristisen taajuuden suhdetta, eli $-\delta(t)/\Omega$. Mikäli adiabaattinen pyyhkäisy (sweep) tehdään riittävän hitaasti, saadaan lähes koko atomipopulaatio muutettua molekyyleiksi (C).

Rabi-taajuuteen. Yksityiskohtaisemmat tulokset löytyvät esimerkiksi viitteestä [68]. Atomi-molekyyli-tapaus on yhtenevä atomi-atomi-tapauksen kanssa vain, mikäli atomi-molekyyli-tapauksen hiukkasluku $N = 2$. Atomi-atomi-tapauksessa kaikki hiukkasluvut käyttäytyvät identtisesti, mutta atomi-molekyyli-tapauksessa oskillaatioihin tulee hiukkasluvun lisääntymisestä enemmän rakennetta. Tämä johtuu atomien ja molekyylien välisen vuorovaikutuksen epäsymmetriasta: tarvitaan kaksi atomia muodostamaan yksi molekyyli. Molekyyli- (ja atomi-) luvussa tapahtuvat romahdukset ja paluut aiheutuvat tämän epälinearisuuden aiheuttamasta ominaisarvojen epätasaisesta jakautumisesta.

Aiemmin kävi ilmi, että molekyylikondensaatin tuottaminen on tavoiteltava asia. Toki (ainakin osittaisen) molekyylikondensaatin saisi asettamalla kondensaattisysteemin resonanssiin (eli $\delta = 0$) ja katkaisemalla fotoassosiaation tietyllä tarkkaan määrättyllä ajanhetkellä, mutta systeemin pitäminen resonanssissa voi olla hankalaa, koska kondensaattisysteemin tilan energia riippuu atomien ja molekyylien määrästä (johtuen atomi-atomi- ja molekyyli-molekyyli-vuorovaikutuksista) [66]. Yksinkertaisempi metodi tuottaa molekyylikondensaatti on muuttaa adiabaattisesti atomi- ja molekyylikondensaattitilojen välistä viritystä⁴, vaikkapa

⁴Tätä kutsutaan tilan adiabaattiseksi seuraamiseksi/siirtämiseksi (adiabatic fol-

karakteristisen taajuuden avulla ilmoitettuna tavalla

$$\delta(t) = -\xi\Omega^2 t, \quad (3.22)$$

missä ξ on ”adiabaattisuuskerroin”, eli virityksen muuttaminen on adiabattista, mikäli $\xi \ll 1$ [66].

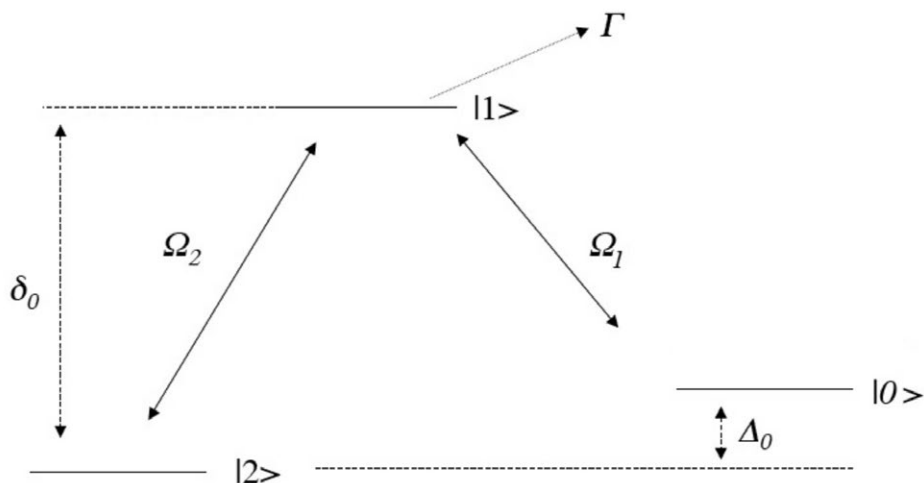
Kuvasta 3.2 huomataan, että virityksen adiabattisella pyyhkäisyllä saadaan lähes koko atomipopulaatio muutettua molekyyleiksi, mikäli adiabattinen pyyhkäisykerroin on riittävän pieni. Vaikkakin kuva 3.2 on tehty käyttäen pientä hiukkaslukua, niin sama ilmiö tapahtuu yhtä voimakkaana suuremmillakin hiukkasluvuilla [66].

3.3 Makroskooppinen superpositio atomi- ja molekyylikondensaattitilojen välillä

Tässä alaluvussa esitetty skeema on vähän kuin fyysikon vastaus vedonvälittäjän kysymykseen, mikä hevonen voittaa laukkakilpailut: ”Helppoa. Aluksi oletetaan pistemäinen hevonen ja että laukkakilpailut tapahtuvat tyhjiössä...” Eli katsotaan, mitä voitaisiin tehdä unitaarisella dynamiikalla, kun säädetään kaikki ei-toivotut efektit nolaksi. Tutkitaan siis, onko tietty ilmiö ylipäänsä mahdollinen teorian puitteissa. Ansiokas tutkimus [88] vastaa, että makroskooppinen superpositio atomi- ja molekyylikondensaattitilojen välillä on ainakin idealisoidun teoreettisesti mahdollinen. Seuraava kysymys onkin, onko se vähemmän idealisoidun teoreettisesti mahdollinen, ja jos on, niin onko se käytännössä havaittavissa, ja millaisia vaatimuksia todellisuuden rajat koejärjestelylle asettavat (artikkeli III)?

Alkutilana on atomikondensaatti. Atomien yhdistäminen molekyyleiksi tapahtuu fotoassosiaatiolla (luku 3.2). Atomien ja molekyylien välinen fotoassosiaatiovuorovaikutus on muodoltaan identtinen epälineaarissa optiikassa paljon tutkitun toisen harmonisen sukupolven vuorovaikutushamiltonianin $V = \hbar\epsilon (b^\dagger aa + a^\dagger a^\dagger b)$ kanssa [89]. Atomien ja molekyylien väliset s-aaltotörmäysvuorovaikutukset puolestaan vastaavat epälineaarisen optiikan amplitudidisversiota [90, 91], eli formaalisti tutkimusongelman lähtökohdat on tutkittu hyvin. Epälineaarisuus lomittaa hiukkasia keskenään ja mahdollisesti luo makroskooppisen superpositiotilan.

lowing/transfer) [66, 86, 87]. Prosessiin yleensä viitataan kirjainyhdistelmällä STIRAP, joka tulee sanoista ”stimulated Raman adiabatic passage”. Prosessi on ”stimuloi-tu”, koska käytetään koherentteja fotonilähteitä (lasereja), ”Ramanin”, koska kyseessä on epäelastinen fotonien sironta, ”adiabaattinen”, koska prosessi on riittävän hidlas,



Kuva 3.3: Energiatasokaavio kahden laserin fotoassosiaatiosta. Alussa N atomia ovat Bose-kondensoituneet tilaan $|0\rangle$. Ensimmäinen laser hävittää tästä tilasta kaksi atomia ja luo tilaan $|1\rangle$ elektronisella viritystilalla olevan molekyylin. Sitten kaksi sidottua molekyyliä kytkevä laser hävittää virittyneen molekyylin tilasta $|1\rangle$ ja luo tilaan $|2\rangle$ elektronisella perustilalla olevan stabiilin molekyylin. Vapaa-sidottu- ja sidottu-sidottu-Rabi-taajuudet ovat Ω_1 ja Ω_2 . Elektronisesti virittyneen molekyyliä tilan spontaani hajoamistekijä on Γ , ja tilojen väliset kaksifotoniviritykset ovat δ_0 ja Δ_0 .

Koejärjestelyssä luodaan soveliaista atomeista Bose-kondensaatti, johon kohdistetaan koherentteja fotoneja (laser), joiden energia on juuri sopiva fotoassosiaatiota ajatellen. Kaksi atomia absorboivat fotonin ja siirtyvät sidotulle molekyyliä tilalle. Koska tämä fotonin absorptioprosessi tuo kahden atomin systeemiin lisää energiaa, muodostunut molekyyliä tila on virittynyt rotaatio- ja/tai vibraatiotila, jolla on taipumuksena hajota. Tämä hajoaminen ei välttämättä tapahdu takaisin atomikondensaattiin, vaan on mahdollista, että atomeille jää liike-energiaa ja ne poistuvat kondensaattisysteemistä. Tätä puolta käsittelem tarkemmin luvussa 4.3 – tässä vaiheessa riittää tietää, että kyseessä on ongelma, jonka kiertämiseen tarvitaan ratkaisua. Yleinen ratkaisu on, että virittynyt molekyyliä tila kytetään toisella laserilla stabiilimpaan, alemman energian molekyyliä tilaan. Kuvassa 3.3 esitetty energiatasokaavio selventää asiaa.

Perusnotaatiosta vielä sen verran, että merkitään atomikondensaattiin $|0\rangle$, virittyneeseen molekyylikondensaattiin $|1\rangle$ ja stabiiliin molekyyli-

jotta systeemin tila säilyy hitaasti muuttuvan Hamiltonin operaattorin ominaistilana ja ”ohikulku” (passage), koska systeemin tila siirretään resonanssin toiselle puolen.

likondensaattiin $|2\rangle$ operoivia hävitysoperaattoreita kirjaimilla a , b ja g , ja atomi-molekyyli- ja molekyyli-molekyyli-siirtymiä aiheuttavia vuoro-vaikutuksia kuvataan käyttäen vastaavia Rabi-taajuuksia Ω_1 ja Ω_2 . Yksi- ja kaksifotoniviritykset ovat Δ_0 ja $\delta = \delta_0 - i\frac{1}{2}\Gamma$, missä Γ on viritetyn molekyylin spontaania hajoamista kuvaava termi.

Mikäli $\delta_0 \gg \Gamma$, niin populaatiohävikin aikaskaala on hidas verrattuna populaatiokonversion aikaskaalaan, ja vielä kun viritetyllä molekyylitilalla oleva populaatio on mahdollisimman pieni, niin näissä suotuisissa olosuhteissa populaatiohävikki voidaan jättää pois laskuista. Ja koska viritetyn molekyylitilan populaatio on pieni, niin virittyneiden molekyyliin törmäykset muiden hiukkasten kanssa voidaan jättää huomiotta. Merkitään jäljelle jäävien törmäysvuorovaikutusten suuruuksia λ_{aa} (atomi-atomi), λ_{gg} (molekyyli-molekyyli) ja λ_{ag} (atomi-molekyyli). Näillä tiedoilla voidaan kirjoittaa systeemin Hamiltonin operaattori pyörivän aallon approksimaatiossa:

$$\begin{aligned} \frac{H_3}{\hbar} &= -\Delta_0 g^\dagger g + \delta b^\dagger b - \frac{1}{2} (\Omega_1 b^\dagger a a + h.c.) - (\Omega_2^* g^\dagger b + h.c.) \\ &+ 2\lambda_{ag} a^\dagger a g^\dagger g + \lambda_{gg} g^\dagger g^\dagger g g + \lambda_{aa} a^\dagger a^\dagger a a. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Koska suurimman taajuuuden oletetaan olevan δ , Heisenbergin liikeyhtälöistä

$$i\dot{a} = -|\Omega_1|e^{-i\phi_1}a^\dagger b + 2\lambda_{ag}ag^\dagger g + 2\lambda_{aa}a^\dagger aa, \quad (3.24)$$

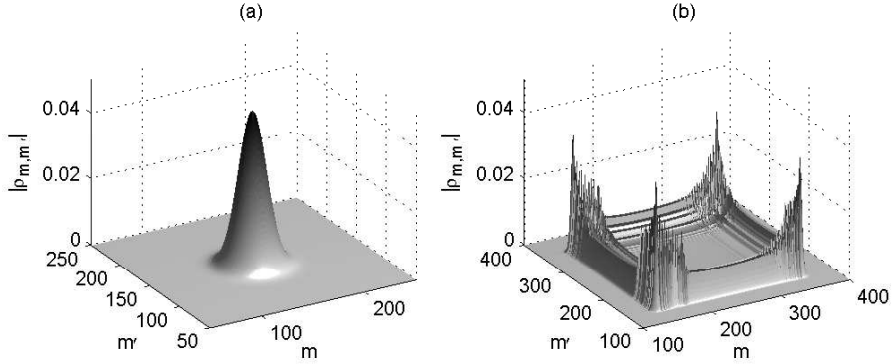
$$i\dot{b} = \delta b - \frac{1}{2}|\Omega_1|e^{i\phi_1}aa - |\Omega_2|e^{i\phi_2}g, \quad (3.25)$$

$$i\dot{g} = -\Delta_0 g - |\Omega_2|e^{-i\phi_2}b + 2\lambda_{ag}a^\dagger ag + 2\lambda_{gg}g^\dagger gg, \quad (3.26)$$

missä on käytetty merkintää $\Omega_j = |\Omega_j|e^{i\phi_j}$, voidaan adiabaattisesti eliminoida viritettyyn molekyylitilaan operoivat operaattorit, koska $\dot{b}/\delta \sim 0$, jolloin $b = \frac{1}{2\delta}|\Omega_1|e^{i\phi_1}aa + |\Omega_2|e^{i\phi_2}g/\delta$. Merkitsemällä lasereiden suhteellista vaihetta $\phi = \phi_2 - \phi_1$, ja kirjoittamalla $\chi = |\Omega_1||\Omega_2|/\delta$, ja $\lambda'_{aa} = \lambda_{aa} - |\Omega_1|^2/4\delta$, ja $\Delta = \Delta_0 + |\Omega_2|^2/\delta - 2\lambda'_{aa} + \lambda_{gg}$ ja $\lambda = 2\lambda'_{aa} - \lambda_{ag}$, ja lisäämällä saatuun yhtälöön termi $\lambda'_{aa}(N - N^2)$ ja asettamalla $\lambda_{gg} - 4\lambda'_{aa} = 0$, saadaan kaksitasohamiltonianiksi:

$$H_2 = -\Delta g^\dagger g - \frac{1}{2}\chi (e^{-i\phi}a^\dagger a^\dagger g + h.c.) - 2\lambda a^\dagger a g^\dagger g. \quad (3.27)$$

Tässä yhteydessä en näe tarpeellisena esitellä päättelyaskelia yksityiskohtaisesti, koska sama esitellään myöhemmin hieman mutkikkaammin monimutkaisemman mallin kanssa luvussa 4.3.



Kuva 3.4: Tiheysmatriisin aikakehitys (molekyylidikannassa) hetkillä (a) $\lambda t_1 = 8.6 \times 10^{-5}$, jolloin vaihe I päättyy, ja (b) $\lambda t_2 = 1.0486 \times 10^{-2}$, jolloin superpositio on muodostunut. Hiukkasluku simulaatiossa on $N = 1000$ atomia.

Valitaan alkutilaksi puhdas atomikondensaatti, ja jaetaan systeemin aikakehitys kahteen osaan siten, että aluksi fotoassosiaatiovuorovaikutus on vahva ja törmäykset heikkoja, käyttäen parametrien arvoja

$$\Delta = 0, \quad (3.28)$$

$$\chi = 10\sqrt{N}\lambda, \quad (3.29)$$

$$\phi = \pi/2, \quad (3.30)$$

ja hetken t_1 kuluttua siirrytään vahvasta fotoassosiaatiosta törmäyksien dominoimalle alueelle

$$\Delta = \sqrt{N}\chi = 0.1N\lambda, \quad (3.31)$$

$$\chi = 0.1\sqrt{N}\lambda, \quad (3.32)$$

$$\phi = 0. \quad (3.33)$$

Osoittautuu, että systeemi on saatu atomi- ja molekyylidikondensaattien muodostamaan makroskooppiseen superpositioon [88]. Hetki t_1 saadaan yhtälöstä $N/4 = (N/2) \tanh^2(\sqrt{N}\chi t_1)$, joka on lainaa toisen harmonisen generaation fotoneista [92]. Kuvassa 3.4 on kuvattu tiheysmatriisin aikakehitystä. Totean, että mielenkiintoista, ja palaan asiaan myöhemmin hie-man realistisemman, mutta kuitenkin ensimmäisen approksimaation mal-lin kanssa. Makroskooppinen superpositio on erittäin herkkä koherenssi-ilmiö. Mitähän sille tapahtuu *ympäristössä* – luku 4.3 kertoo tästä.

3.4 Degeneroituneiden fermionisysteemien kollektiivisesta käytöksestä

Yleisesti ajatellaan, että luvussa 3.2 esitellyt kollektiiviset ilmiöt (Rabi-oskillaatiot, atomitilan adiabaattinen pyyhkäisy molekyyliatilaksi) johtuvat Bose-Einstein-statistiikasta – värikkäämmiin ilmaistuna bosonit käyttäytyvät kollektiivisesti ja fermionit ovat individualisteja. Tämänkaltaisten ilmiöiden kyseessä ollessa puhutaan myös koherentista käyttäytymisestä, eli annetaan ymmärtää, että kyseessä olisi koherenssi-ilmiö. Mutta mikäli kyseessä on koherenssi-ilmiö, niin tällöin hiukkasstatistiikalla ei pitäisi olla mitään tekemistä asian kanssa (katso määritelmä 25 ja luku 5).

Seuraavaksi siirrytään miettimään degeneroituneen fermionisysteemin kollektiivisen käytöksen mahdollisuutta. Alaluvun (luku 3.2) pitkäkhön bosonien avulla tapahtuneen johdattelun tarkoituksena oli esittää yksinkertaisia esimerkkejä kollektiivisesta käytöksestä, mitä kautta saa hyvän vertailukohteen fermionitutkimuksen tuloksille (itse asiassa tästä syystä olen käyttänyt esimerkiksi kuvissa tiettyjä parametrien arvoja).

Kokeellisesti on onnistuttu luomaan bosoni- ja fermioniatomeista koostuvia degeneroituneita yhdistelmäsystemejä (esim. [93, 94, 95]), joten on luonnollista miettiä, onko (teoreettisesti) mahdollista tuottaa tästä lähtökohdasta degeneroituneita fermionimolekyylejä kytkemällä atomitila molekyyliin joko Feshbachin resonanssilla tai fotoassosiaatioresonanssilla (artikkelit I ja II sekä viite [5]). Seuraavaksi esitän yksinkertaisen tarkastelun fermionimolekyylien luomisesta. Yksinkertaisuuden vuoksi käytän pyörivän aallon approksimaatiota liikemäärävaruudessa. Koska kollektiivisen assosiaation aikaskaala on paljon lyhyempi kuin hiukkasten liikkeen aikaskaala, voidaan ensimmäisen approksimaation teoreettisessa tarkastelussa jättää hiukkasten liike loukussa (Hamiltonin operaattorin kineettiset termit) huomiotta. Lisäksi bosonisysteemin tarkastelussa riittää ottaa huomioon pelkkä kondensaatti (tila, jossa $\mathbf{k} = 0$), koska Bose-stimulaation⁵ takia kytkentä kondensaattitiloihin on voimakkaampi kuin kondensaatin ulkopuolella oleviin bosonitiloihin ($\mathbf{k} \neq 0$). Lisäksi oletetaan systeemin Fermi-energian olevan Wignerin kynnysarvon lähistöllä, joten atomi- ja molekyyli-tilojen välisen kytkennän κ voidaan olettaa olevan sama kaikille moodeille \mathbf{k} .⁶ Nyt voidaan kirjoittaa kaksitilayhtälöä

⁵Bose/Bosonic stimulation. Bose-stimulaatio tarkoittaa koherenttia aineaallon vahvistumista (coherent matter-wave amplification) [96].

⁶Wignerin kynnysarvolain (Wigner threshold law) [81, 97, 98] mukaan vaikutusala riippuu pelkästään kynnysarvon ylittävästä energiasta, eli tässä tapauksessa kynnysarvofunktio jokaisen lopputilan absorption vaikutusalalle on askelfunktio. Kun kaikkien

(3.18) mukaillen vastaava Hamiltonin operaattori Bose-kondensaatile ja degeneroituneille fermioneille:

$$\frac{H}{\hbar} = \sum_{\mathbf{k}} \left[\delta b_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}} - \frac{1}{2} \kappa (b_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} c + c^{\dagger} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} b_{\mathbf{k}}) \right], \quad (3.34)$$

missä δ on atomi- ja molekyyli-tilojen välinen viritys, κ tilojen välinen kytkentä (foto- ja magnetoassosiaatiolla yhtälön muoto sama), ja hiukastiloihin operoivat hävitysoperaattorit ovat seuraavat: c hävittää atomin Bose-kondensaatista, ja $a_{\mathbf{k}}$ ($b_{\mathbf{k}}$) hävittää fermioniatomin (fermionimolekyylin), jonka aaltolukuvektori on \mathbf{k} .

Mallin aikaskaalan näkee Heisenbergin liikeyhtälöistä:

$$i\dot{c} = -\frac{1}{2}\kappa \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}}, \quad (3.35)$$

$$i\dot{b}_{\mathbf{k}} = -\delta b_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2}\kappa a_{\mathbf{k}}^{\dagger} c, \quad (3.36)$$

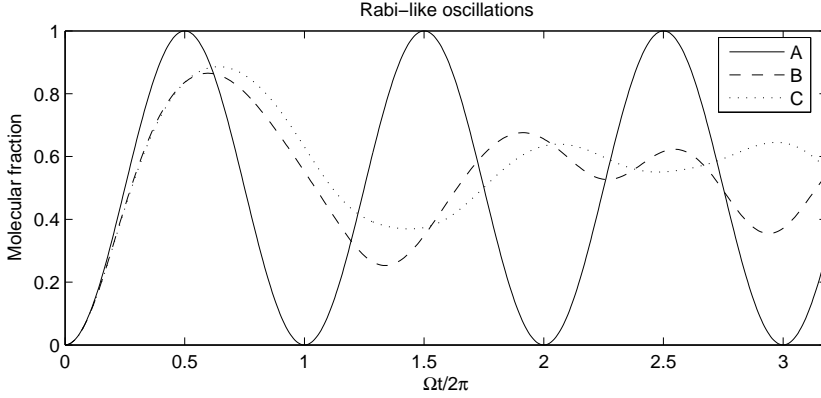
$$i\dot{a}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2}\kappa b_{\mathbf{k}} c. \quad (3.37)$$

Verrattaessa Heisenbergin liikeyhtälöitä (3.35–3.37) atomi- ja molekyylikondensaattien välisen vuorovaikutuksen tapaukseen (3.19–3.20) huomataan, että fermioneja käsittelevien termien merkit ovat vaihtuneet. Tämä on luonnollinen seuraus Fermi-Diracin statistiikasta: fermioneja mahtuu korkeintaan yksi tiettyyn kvanttitilaan. Muuten liikeyhtälöt ovat samannäköisiä. Kondensaattiin operoivan operaattorin c karakteristinen koko on $\sqrt{N_B}$. Alussa olevien fermionien määrä N_F näkyy liikeyhtälöissä (3.35–3.37) liikemäärävaruudessa fermionitilojen yli laskettavana summana. Mikäli $N = N_F = N_B$, Bose-kondensaatin ja degeneroituneiden fermioniatomien välisen (foto- tai magneto-)assosiaation karakteristinen taajuus on $\Omega = \sqrt{N}\kappa$.

Resonanssitapauksessa $\delta = 0$ degeneroituneiden fermionimolekyylien ja -atomien ja Bose-kondensaatin välisten vuorovaikutusten tulokset (kuva 3.5) muistuttavat atomi- ja molekyylikondensaattitilojen välisten vuorovaikutusten tuloksia (kuva 3.1). Vertaa myös viitteessä [68] laajemmin esitettyihin tuloksiin. Vaikuttaa siltä, että degeneroituneiden fermionien tapauksessakin esiintyy Rabi-oskillaatioiden kaltaisia oskillaatioita⁷. Tämä osoittaa hyvin, että Bose-Einstein-statistiikkaan yleisesti yhdistetty

tilojen energiat ovat tämän kynnysenergian alueella, kaikki tilat ovat siis oleellisesti yhtä mahdollisia. Vaikutusalan energiariippuvuus alkaa dominoida kynnysenergia-alueen ulkopuolella.

⁷Kutsun jatkossa myös näitä Rabi-oskillaatioiksi, koska käsittääkseni Rabi-oskillaatioiden määritelmä ei ota fundamentaalilla tasolla kantaa oskilloivan systeemin koostumukseen.

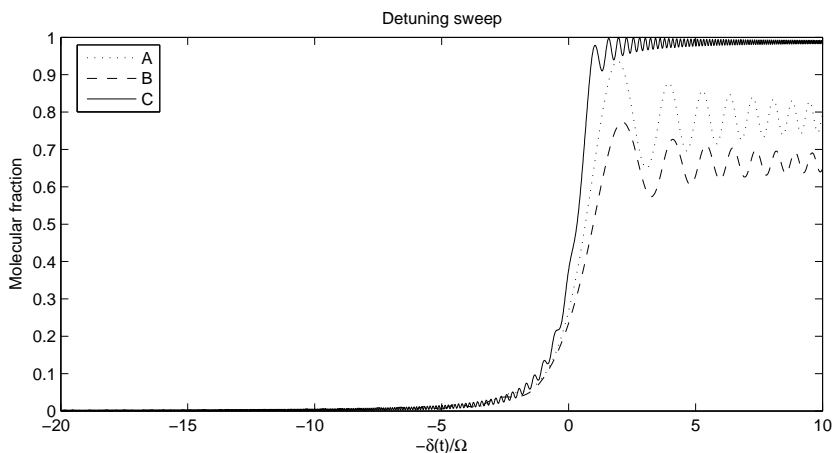


Kuva 3.5: Rabi-oskillaatioita Bose-kondensaatin, degeneroituneiden fermioniatomien ja degeneroituneiden fermionimolekyylien välillä. Alkutilassa olevien bosonien ja fermionien määrä on sama $N = N_F = N_B$. Molekyyli- ja atomitilojen välinen viritys $\delta = 0$ ja tilojen välinen kytkentä $\kappa = 1$. Simulaatioaika on ilmoitettu karakteristisen taajuuden $\Omega = \sqrt{N}\kappa$ avulla. (A): $N = 1$, (B): $N = 5$, ja (C): $N = 10$. Huomataan, että oskillaatiot ovat olemukseltaan samannäköisiä kuin atomi- ja molekyylikondensaattitilojen välillä.

systemin kollektiivinen käytös ei johdukaan statistiikasta, vaan yleisesti ottaen degeneroituneet systeemit käyttäytyvät kollektiivisesti. Bosoneilla statistiikan osuus näkyy pelkästään siinä, että degeneroitunut bosonisysteemi vain sattuu olemaan kondensaatti. Fermionit eivät voi kondensoitua, mutta voivat kyllä käyttäytyä kollektiivisesti.

Koska esittelemässäni bosoni-fermioni-systeemissä esiintyy Rabi-oskillaatioita, on luonnollista olettaa, että kyseinen systeemi voitaisiin adiabattisella virityksen muuttamisella saattaa alkutilan atomeista degeneroituneiksi fermionimolekyyleiksi. Kuva 3.6 havainnollistaa tämän mahdolliseksi (huomaa lähes samanlaisen kuvion toistuminen kuin Bose-kondensaatin virityksen adiabattisesta muutoksesta kertovassa kuvassa 3.2). Kollektiivinen assosiaatio toimii myös, mikäli alkutilana on degeneroituneet fermioniatomit ja lopputilana bosonimolekyylit. Tämä on käytännössä havaittu (magnetoassosiaatiota käyttäen, esim. [76, 77, 78, 99, 100]) ja teoreettisesti tutkittu (esim. [4]).

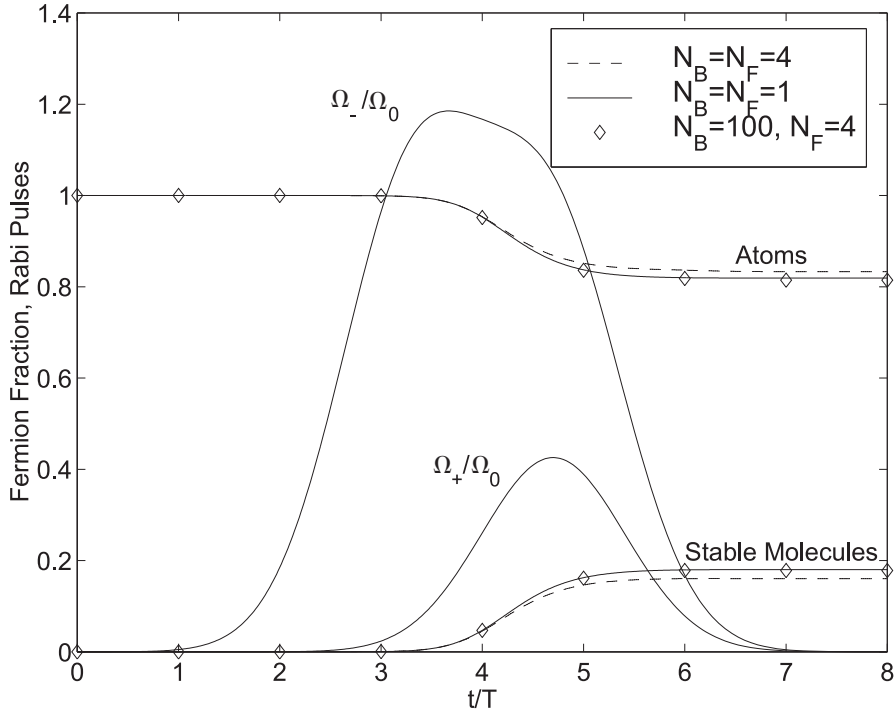
On myös mahdollista vaikuttaa siihen, kuinka suuri osa atomipopulaatiosta muutetaan molekyyleiksi. Tämän myötä voi olla mahdollista tuottaa sellainen suprajohtava systeemi, jossa Cooperin parit muodostuvat keskenään erilaisten kemiallisten entiteettien (eli fermioniatomien ja -molekyylien) välille. Yleisesti Cooperin parit muodostuvat samanaisten entiteettien välille. Nykyisillä teknisillä ratkaisuilla degeneroituneen fermionisysteemin lämpötilaksi saadaan parhaimmillaan $T \sim 0.05T_F$



Kuva 3.6: Molekyylien osuus kokonaishiukkasmäärästä, kun atomi- ja molekyytililan välistä viritystä muutetaan lineaarisesti ja adiabattisesti ajan funktiona $\delta(t) = -\xi\Omega^2 t$. Bosoni- ja fermioniatomien lukumäärä on $N = N_F = N_B$. (A): $N = 1$, $\xi = 1$, (B): $N = 5$, $\xi = 1$ ja (C): $N = 5$, $\xi = 0.1$. Kuvan aikayksikkönä on käytetty dimensiotonta virityksen muutosta suhteessa karakteristiseen taaajuuteen, eli $-\delta(t)/\Omega$. Mikäli adiabattinen pyyhkäisy tehdään riittävän hitaasti, saadaan lähes koko atomipopulaatio muutettua molekyyleiksi (C) huolimatta siitä, että molekyylejä muodostavana toisena osapuolena on fermioniatomit.

[99, 100], mikä on melkein suuruusluokan verran liian suuri suprajuoksevan tilan aikaansaamiseksi (artikkeli II). Tosin suprajuoksevan tilan korkeellisen realisaation toteutumisen voidaan saada lähemmäs käyttämällä tiukkaa anharmonista loukkua ja mahdollisimman suurta fermioniatomien ja -molekyylien välistä siron tapituu (artikkeli II). Joka tapauksessa teoreettinen tarkastelu on vapaa käytännön teknisistä rajoitteista, ja (mikäli oletetaan aikaisemmin esitelty pistemäinen hevonen ja että laukakakilpailut järjestetään tyhjiössä) välttämätön edellytys tämän fermioniatomien ja -molekyylien välisen suprajuoksevan tilan aikaansaamiselle on se, että yhdistelmäsystemissä on sovelias määrä sekä fermioniatomeja että -molekyylejä tilan aikaansaamista varten (tarkoitus on, että fermioniatomien ja -molekyylien aaltoluku olisi sama). Tämä sovelias määrä tosin on riippuvainen systeemin parametreista, mutta voidaan osoittaa, että käyttämällä osittaista STIRAP:ia [101, 102] saadaan haluttu määrä atomeja muutettua fermionimolekyyleiksi. Seuraavaksi esittelen lyhyesti taustalla olevan mallin (artikkeli II), sillä se on taas hieman monimutkaisempi kuin aikaisemmin esitelty mallit.

Mallinnuksessa on tarpeen käyttää kaksiväri-fotoassosiaatiota, jossa ensimmäinen laser (vastaava Rabi-taajuus Ω_+) kytkee atomitilan virittyne-



Kuva 3.7: Halutun atomi-molekyyli-suhteen aikaansaaminen osittaisella STIRAPilla. Taajuusyksikkönä on käytetty $\Omega_0 = 2\pi$ MHz = 1, ja Raman-pulssien parametrit ovat $\alpha = 0.14\pi$, $T = 5 \times 10^3$ ja $\tau = 0.7T$. Tapauksilla $N_B = N_F = 1$, ja $N_F = 4$ ja $N_B = 100$ ei ole havaittavaa eroa, kun taas $N_F = N_B = 4$ poikkeaa edellisistä ja havainnollistaa, että muutaman kappaleen ilmiöt rajoittavat konversiotehokkuutta.

seen molekyylitilaan ja toinen laser (Ω_-) virittyneen molekyylitilan stabiiliin molekyylitilaan. Stabiiliin (virittyneen) molekyylitilan viritys on Δ (δ) suhteessa fotodissosiaatiokynnykseen. Oletetaan myös, että hiukkas-ten liikkeen aikaskaala on pitkä verrattuna tarkasteltavan ilmiön aikaskaalaan. Näin saadaan yksinkertaistetuksi Hamiltonin operaattoriksi

$$\begin{aligned}
\frac{H_0}{\hbar} &= -\Delta \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}-}^\dagger a_{\mathbf{k}-} + (\delta - \Delta) \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}e}^\dagger a_{\mathbf{k}e} \\
&+ \lambda_{+-} \sum_{\{\mathbf{k}_i\}} a_{\mathbf{k}_1+}^\dagger a_{\mathbf{k}_2-}^\dagger a_{\mathbf{k}_3-} a_{\mathbf{k}_4+} \\
&+ \sum_{\sigma, \mathbf{k}} \lambda_{0,\sigma} a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger a_0^\dagger a_0 a_{\mathbf{k},\sigma}
\end{aligned} \tag{3.38}$$

$$\frac{H_I}{\hbar} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} [(\Omega_+ a_{\mathbf{k}e}^\dagger a_{\mathbf{k}+} + \Omega_- a_{\mathbf{k}e}^\dagger a_{\mathbf{k}-}) + \text{h.c.}], \tag{3.39}$$

missä stabiiliin (virittyneeseen) molekyyli-tilaan operoiva hävitysoperaattori on $a_{\mathbf{k}-}$ ($a_{\mathbf{k}e}$), fermioni- (bosoni-)atomin hävittävä operaattori on $a_{\mathbf{k}+}$ (a_0), ja summausindeksi $\sigma = +, -, e, 0$. Koska virittyneellä molekyyli-tilalla ei ole koskaan suurta populaatiota, se voidaan unohtaa törmäyksistä. Olettamalla molekyyli-tilojen välinen resonanssi voidaan mallintaa virittyneen tilan kautta tapahtuvaa merkittävää populaatiohävikkiä asettamalla $\delta = -\frac{1}{2}i\Gamma$. Ratkaisun yleispätevyyden kärsimättä voidaan edelleen valita, että $\Delta = 0$. Laskennallisista seikoista tosin joudutaan rajoittumaan vain yksinkertaisten törmäysten mallintamiseen, eli $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4$ siten, että $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_3$ ja $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_4$. Tilojen välistä kytkentää muutetaan käyttämällä laserpulsseille profileja [102]:

$$\Omega_+(t) = \Omega_0 \sin \alpha \exp[-(t - \tau)^2/T^2] \quad (3.40)$$

$$\begin{aligned} \Omega_-(t) &= \Omega_0 \exp[-(t - \tau)^2/T^2] \\ &+ \Omega_0 \cos \alpha \exp[-(t - \tau)^2/T^2] \end{aligned} \quad (3.41)$$

Mikäli tarkastelun alla on vaikkapa $N_B = 1.3 \times 10^6$ ^{87}Rb -atomia loukussa, jonka radiaalinen ja aksiaalinen kulmataajuus ovat $\omega_r = 100 \times 2\pi$ Hz ja $\omega_a = 10 \times 2\pi$ Hz (tiheys $\rho_B = 5 \times 10^{20} \text{ m}^{-3}$), niin atomi-molekyylilytkennän huippuarvo olisi $\Omega_+ \sim \Omega_0 = 2\pi$ MHz ja tyypillinen virittyneen molekyyli-tilan spontaanin hajoamisen parametri $\Gamma = 10 \times 2\pi$ MHz. Degeneroituneita ^{40}K -fermioneja olisi samassa loukussa $N_F = 5 \times 10^3$ (tiheydessä $1.1 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$), jolloin fermioniatomien ja -molekyyliden välinen törmäysvuorovaikutus olisi $\lambda_{+-} = 5.81 \times 2\pi$ MHz (artikkeli II).

Koska simulaatioihin kuuluva aika skaalautuu $\tau_{sim} \sim 16^{N_F}$, tyydyn suurimpana fermionilukuna tarkastelemaan tilannetta $N_F = 4$, mutta bosonien määrällä ei ole vaikutusta simulaatioaikaan. Atomi-molekyylitörmäykset eivät kontribuoi merkittävästi tuloksiin ennen kuin $\lambda_{+-}/\Omega_0 > 10^{-5}$, eli osittainen STIRAP tuottaa halutun atomi-molekyylisuhteen törmäyksistä huolimatta. Kuvasta 3.7 näkyvät oleelliset tulokset. Tapauksessa $N_F = N_B = 4$ monen kappaleen vuorovaikutukset heikentävät molekyyliksi muuttamisen tehokkuutta (suhteessa haluttuun), mutta tällä ei ole mitään tekemistä Fermi-Diracin statistiikan kanssa, vaan ilmiö on tuttu yhden laserin fotoassosiaatiosta Bose-kondensaateissa [66, 68]. Kuten lähes ehtymättömän bosonikentän tapauksessa, systeemi hiukkasluvulla $N_F = 4$ ja $N_B = 100$ tuottaa saman tuloksen kuin yhden hiukkasen tapauksessa $N_F = N_B = 1$.

Luku 4

Dekoherenssi

Tämän kirjan määritelmäosiossa (luku 2.3) määrittelin dekoherenssin ilmiöksi, joka vähentää kvanttikoherenssia. Määritelmä on riittävä ja pätevä. Mutta mitä kvanttikoherenssi on? Vielä ei ole tarpeen ottaa kantaa tähän asiaan, koska tarkastelun alla ovat dekoherenssitutkimuksen varhaisvaiheet – kvanttikoherenssiin liittyviä kysymyksiä ja ongelmia on analysoitu tarkemmin luvussa, joka käsittelee koherenssiteoriaa (luku 5).

Aluksi dekoherenssitutkimuksessa kiinnostuttiin avoimista ja äärettömistä kvanttisysteemeistä (katso esimerkiksi [103, 104, 105, 106, 107], ja niiden lähdeviitteet). Tällaisten systeemien käytöksen tutkiminen tapahtuu tiheysmatriisiformalismia käyttäen siten, että jaetaan *koko systeemi* mielenkiinnon kohteena olevaksi *systeemiksi* ja vähemmän mielenkiintoiseksi *ympäristöksi*, minkä jälkeen lasketaan systeemin tiheysmatriisin liikeyhtälö siten, että ympäristön vapausasteet on redusoitu pois laskemalla osittainen jälki ympäristön vapausasteiden yli. Tätä redusoidun tiheysmatriisin liikeyhtälöä kutsutaan mestariyhtälöksi¹. Ympäristön vapausasteiden poistamista kutsutaan *karkeistukseksi*, ja juuri karkeistus on se, mikä tuottaa epäunitaarisen aikakehityksen (mielenkiintoiselle) osasysteemille.

Tiheysmatriisiformalismi on siitä ystävällinen tapa tutkia kvanttifysiikkaa, että todennäköisyydet ovat tiheysmatriisin lävistäjällä ja lävistäjän ulkopuoliset elementit kertovat siitä, kuinka voimakkaasti kvanttilmiöt näkyvät systeemin käytöksessä. Mikäli tiheysmatriisin nollostapoikkeavat elementit ovat pelkästään lävistäjällä, niin tällöin systeemin kuvaamiseen riittää sellainen klassisen mekaniikan versio, jossa aidot todennäköisyysilmiöt ovat mahdollisia. Yleisesti diagonaalien ulkopuolisten elementtien vähenemistä kutsutaan dekoherenssiksi, ja dekoherenssi puolestaan on vastaus kysymykseen, miksi kvanttidynamiikka tuottaa (melkein)

¹master equation

klassisella fysiikalla kuvattavissa olevan maailman.

Jo aikaisessa vaiheessa havaittiin, että dekoherenssi ja entropian kasvaminen ovat samankaltaisia dynaamisia ilmiöitä (esim. [104], artikkeli IV). Täten on ymmärrettävää, että entropian olemukseen liittyvät sadan vuoden takaiset ongelmat tulevat uudelleen esille dekoherenssiin liittyen. Käsittelen tätä asiaa tarkemmin luvussa 5.2. Yleensä kvanttikorrelaatioelementtien väheneminen tapahtuu monotonisesti ja eksponentiaalisesti, mutta nämä kaksi seikkaa ovat mallinnustavasta riippuvaisia. Monotonisuus on seurausta systeemin avoimuudesta ja äärettömyydestä. Jo varhain tajuttiin, että maailmankaikkeus on periaatteessa suljettu systeemi (esim. [104, 105, 108, 109], artikkeli IV), joten jos tutkitaan maailmankaikkeutta kokonaisena systeeminä, aikakehitys on unitaarinen eikä dekoherenssia tapahdu. Dekoherenssi kuitenkin on havaittu ilmiö maailmankaikkeudessamme [110, 111]. Miten tehdä kvanttikosmologiaa? Kuinka tulee mallintaa suljetun systeemin dekoherenssiä?

Suljettujen systeemien dekoherenssitutkimuksen päälinjoina ovat olleet dekoherenttien historioiden lähestymistapa [112, 113, 114, 115, 116] ja itseaiheutetun dekoherenssin skeema² [117, 118, 119, 120, 121]. Oman koherenssiteoriani lähtökohtana ei kuitenkaan ole kumpikaan näistä, vaan tutkimuksessani tarkastelen dekoherenssiä redusoitujen tiheysmatriisien kautta. Kannattaa huomata, että tiheysmatriiseihin liittyvä dekoherenssikäsitys ei ole yhtenevä dekoherenttien historioiden lähestymistavan dekoherenssikäsityksen kanssa [113]. Valintani johtuu siitä, että tiheysmatriiseihin perustuva kuvaus on kvanttifysiikassa luonnollinen ja perustavaa laatua oleva kuvaustapa, eikä siihen myöskään liity ristiriitoja tuottavia ongelmia, kuten muihin lähestymistapoihin. On siis tavallaan hämmästyttävää, ettei sitä ole tähän asti juurikaan käytetty suljettujen systeemien tutkimiseen. Oletan, että tiheysmatriisiformalismia käyttävä perusteellisesti tutkittu koherenssiteoria selventää dekoherenssin käsitettä suljetuissa systeemeissä.

Dekoherenttien historioiden ongelmia tutkitaan tarkemmin alaluvussa 4.1 ja itseaiheutetun dekoherenssin skeemaa alaluvussa 4.2. Alaluvussa 4.3 analysoidaan tiheysmatriisiformalismien keinoin alaluvussa 3.3 esiteltyä idealisoitua voimakasta koherenssi-ilmiötä yksinkertaisessa ja realistisessa dekoherenssia aiheuttavassa ympäristössä (avoin ja ääretön systeemi). Muistutan (kuten artikkeleissa III ja IV, ja myöhemmin luvussa 4.3), että vaikka avoimet ja äärettömät systeemit eivät ole fysikaalisessa todellisuudessa minkään asian täsmällisiä kuvauksia (katso määritelmä 4 ja luku 5.1), ne voivat olla käyttökelpoisia malleja, mikäli niiden rajoitukset

²self-induced decoherence scheme

ja heikkoudet tiedostetaan.

4.1 Monihistoriatulkinta ja sen ongelmat

Monihistoriatulkinnan³ synty liittyy kvanttifysiikan mittausingelman⁴ ympärillä velloneeseen keskusteluun. Kööpenhaminalainen tulkinta oli tuonut kvanttifysiikkaan aaltofunktion romahduspostulaatin (aaltofunktion romahdusta ei voi mallintaa kvanttifysiikassa käytettävällä unitaarisella dynamiikalla), mutta oli järkevää olettaa, että kvanttifysiikka pätee mittausingeloiden lisäksi myös mittalaitteisiin ja mittalaitteiden antamien tulosten tulkitsijoihin (ihmisiin). Kvanttifysiikan monimaailmatulkinnan [128, 129, 130, 131, 132] johtoajatus on, että *formaali teoria (ja todellisuus) käyttäytyy objektiivisen jatkuvasti ja kausaalisesti, mutta subjektiivisesti se näyttää käyttäytyvän epäjatkovasti ja todennäköisesti*⁵. Tätä Everettin esittämää muotoilua on tulkittu ja muokattu monin eri tavoin. Yhdessä suosittussa tulkinnassa todellisuus koostuukin monista rinnakkaisista deterministisistä toistensa kanssa vuorovaikuttamattomista maailmankaikkeuksista, missä kaikki erilaiset kvanttifysikaaliset mahdollisuudet ovat reaalisesti olemassa [130, 131].

Mittausingelmaan monimaailmatulkinta toki vastaa tyydyttävästi, mutta vastaus itsessään sisältää monia tieteenfilosofisia ja fysikaalisia ongelmia. Pahin tieteenfilosofinen ongelma on, että monimaailmatulkinta ei näytä täyttävän tieteellisen teorian tunnusmerkkejä – ”teoria” väittää, että on olemassa monia rinnakkaisia maailmankaikkeuksia, mutta ne eivät

³Syntaktisen selvyuden vuoksi käytän suomenkielistä termiä *monihistoriatulkinta* (many histories interpretation). Termi on muodoltaan samanlainen kuin *monimaailmatulkinta*, joka jo jossain määrin on vakiintunut suomen kieleen.

⁴Mittausingelma [1, 19, 22, 122, 123, 124, 125, 126] itsessään on mielenkiintoinen ja ongelmallinen kvanttifysiikkaan liittyvä tutkimusaihe, jota en voi käsitellä tässä yhteydessä yksityiskohtaisesti. On järkevää ajatella, että myös mittalaitteet ja havaitsijat ovat kvanttifysiikan lakien alaisia. Karkeasti ottaen mittausingelma koostuu kolmesta erillisestä kysymyksestä, joihin pitäisi kyetä vastaamaan silloin, kun kaikki (mukaan lukien mittalaitteet ja havaitsijat) mallinnetaan kvanttifysikaalisesti: (1) miksi superposition mittaustulos ei ole mittaustulosten superpositio [1, 122, 125], (2) miksi mittauksen tuloksena saadaan yksi tietty mittaustulos [122, 123, 125], ja (3) miksi systeemin käytös on erilainen mittauksen kanssa ja ilman sitä [22, 123, 124, 125]. Kohta (3) liittyy aaltofunktion reduktiopostulaattiin, jonka voi tiivistää ajatukseen ”Fysiikan pitäisi toimia myös tilanteessa, jossa mittauksia ei ole tehty” [22]. Aaltofunktion reduktioon liittyen Schrödinger itse ilmaisi voimakkaasti mielipiteensä, että jos kvanttihypyt ovat tulleet jäädäkseen, niin hän on pahoillaan siitä, että ylipäänsä sotkeutui kvanttiteoriaan [127]: s. 57.

⁵... the formal theory is objectively continuous and causal, while subjectively discontinuous and probabilistic [129]: s. 9.

vuorovaikuta keskenään. Occamin periaatteiden soveltaminen johtaa seuraavaan tulokseen: todistustaakka on eksistenssiväitteen esittäjällä – monien maailmojen kannattajan on siis todistettava niiden olemassaolo. Koska rinnakkaisia maailmankaikkeuksia ei voida havaita (ne eivät vuorovaikuta keskenään), niin Occamin partaveitsen mukaisesti tieteellinen teoria on huomattavasti parempi ja yksinkertaisempi ilman niiden olettamista⁶. Fysikaalisista ongelmista mainittakoon seuraavat: Monimaailmatulkinnan mukaan jokainen rinnakkainen maailma on deterministinen, mutta kuten aikaisemmin on todettu, on kyetty osoittamaan, että fysikaalisessa todellisuudessa on olemassa aitoja todennäköisyysilmiöitä [42, 43, 44]. On olemassa interferenssi, ja interferenssiä voidaan havaita peräti yksittäisen hiukkasen käytöksessä. Tästä syystä tunnettu monimaailmatulkinnan puolestapuhuja, David Deutsch on lisännyt teoriaansa apuoletuksen, että vaikka rinnakkaiset maailmankaikkeudet eivät voisikaan vuorovaikuttaa keskenään, ne voivat interferoida keskenään [131]. Deutsch selittää havaittuja interferenssiefektejä siten, että kun hiukkanen on menossa kaksoisrakoon (tai on tapahtumassa jotain muuta, jonka tuloksena on interferenssi), raossa on tungosta rinnakkaisten maailmankaikkeuksien hiukkasten tullessa omissa maailmankaikkeuksissaan samaan rakoon. Kun ne hieman tönivät siinä toisiaan, tuloksena on havaittu interferenssikuvio. Jos tämä on oikea kuvaus tilanteesta, niin miksi me aina elämme siinä maailmankaikkeudessa, jossa interferenssikuvio näyttää ”oikealta”, emmekä koskaan siinä, jossa nämä estävät hiukkaset päätyvät niihin kohtiin taustalevyä, joissa traditionaalisesti ajatellen on erittäin tyhjää? Loogisesti ajateltuna tällaisia maailmankaikkeuksia pitäisi olla olemassa paljon, mikäli monimaailmatulkinta olisi pätevä. Kolmas ongelma liittyy dekoherenssiin, eli kuinka voidaan selittää se, että aluksi koherentisti käyttäytyvä kvanttifysikaalinen systeemi pikkuhiljaa lähestyy statistista sekatilaa. Interferenssiin ja dekoherenssiin liittyvät ongelmat johtuvat *etuoikeutetun kannan ongelmasta*⁷ [108, 132] eli siitä, että todellisuuden käyttäytymisen riippuu siitä, missä kannassa sitä tarkastellaan. Tähän merkittävään ongelmaan palataan tarkemmin monihistoriatulkinnan ongelmassa.

Kvanttifysiikan monihistoriatulkinta perustuu Everettin teorialle. Tulkinnan kehittymiseen on vaikuttanut myös Feynmanin polkuintegraaliformalisi, jossa jokainen polku⁸ voidaan tulkita omaksi historiakseen.

⁶Deutschin näkemys ”Multiuniversumin teorian hedelmällisyys pitkään eläneiden filosofisten ongelmien ratkaisussa on niin merkittävä, että tämä maailmankuva kannattaisi omaksua, vaikkei sillä olisi minkäänlaisia fysikaalisia todisteita” [131] (s. 310) vaikuttaa pikemminkin uskonnolliselta kuin tieteelliseltä suhtautumiselta asiaan.

⁷preferred-basis problem

⁸Tähän liittyen olen kuullut kerrottavan kaskua, jossa elektronilta kysytään, kuin-

Tulkinnan mukaan on olemassa yksi todellisuus, jossa on monia erilaisia historioita. Monihistoriatulkinnasta on erilaisia versioita, joista merkittävimmät voidaan kategorisoida seuraavasti (1) Griffiths [133], (2) Omnès [19, 134], ja (3) Gell-Mann ja Hartle [113, 135]. Griffithsin versio oli ensimmäinen, Omnès lähestyi asiaa logiikan keinoin ajatuksenaan, että ristiriidattomat tarinat tuottavat klassisella logiikalla kuvattavissa olevan tilanteen, ja Gell-Mannin ja Hartlen versio on näistä paranneltu versio.

Dekoherenssin etsiminen (ja löytyminen) johtui siitä, että piti kyetä selittämään, miksi kvanttifysiikan lait tuottavat pääosin erittäin klassisen kaltaisen havaittavan todellisuuden. Monihistorioatulkinnan lähtökohtana on, että koko todellisuutta pitää kyetä kuvaamaan siten, että kuvaus sisältää mittalaitteet ja havaitsijatkin. Näiden symbioosina on syntynyt *dekoherenttien historioiden lähestymistapa*⁹. Se onkin saavuttanut suuren suosion suljetun kvanttimekaanisen systeemin dekoherenssin tutkimisessa [112, 113, 114, 115, 116, 135]. Dekoherenteissa historioissa on yksinkertaistettuna kyse siitä, että historioita pitkin tapahtuvat projektiot tuottavat efektiivisen karkeistuksen, joka aiheuttaa dekoherenssin.

Olkoot α ja α' kaksi mahdollista historiaa. Yksi mahdollinen historia voidaan kuvata projektioperaattoreilla S seuraavasti:

$$C_\alpha = S_{\alpha_n}^n(t_n) \otimes \dots \otimes S_{\alpha_2}^2(t_2) \otimes S_{\alpha_1}^1(t_1) \quad ; \quad S_{\alpha_i}^i(t_i) = |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|\delta_{t_i,t}, \quad (4.1)$$

missä t_i on mittausaika ja α_i mittaustulos. Tietynä kiinteänä ajanhetkenä propositiot voidaan kuvata projektioperaattorijoukolla $\{S_\alpha\}$. Kyseiset propositiot ovat toisensa poissulkevia ja $\sum_\alpha S_\alpha = 1$. Projektioperaattorin sanotaan olevan *tarkennettu*¹⁰, mikäli tilajoukko $\{|\alpha\rangle\}$ muodostaa täydellisen joukon. Muussa tapauksessa projektioperaattori on karkeistettu.

Tiheysmatriisiin ρ dekoherenssifunktionaali D määritellään seuraavasti:

$$D(\alpha, \alpha') = \text{Tr}(C_\alpha \rho C_{\alpha'}^\dagger). \quad (4.2)$$

Tietyn historian todennäköisyys saadaan laskemalla $P(\alpha) = D(\alpha, \alpha)$. Kahden historian välillä on korrelaatioita, mikäli $D(\alpha, \alpha') \neq 0$. Mikäli historioiden α ja α' välillä ei ole korrelaatioita, niin historioiden yhteenlaskettu todennäköisyys on erillisten historioiden todennäköisyyksien summa $P(\alpha \vee \alpha') \equiv \text{Tr}((C_\alpha + C_{\alpha'})\rho(C_\alpha + C_{\alpha'})^\dagger) = P(\alpha) + P(\alpha') =$

ka se tuli huoneeseen. Elektroni vastaa, että helpoimmalla tavalla – sekä ovesta että ikkunasta.

⁹Decoherent histories approach. Griffiths käyttää siitä nimitystä ”ristiriidattomien historioiden lähestymistapa” (consistent histories approach) [133].

¹⁰fine-grained

$D(\alpha, \alpha) + D(\alpha', \alpha')$, missä $C_{\{\alpha\}} = C_\alpha + C_{\alpha'}$ on karkeistettu historia. Vaikka karkeistettu historia $C_{\{\alpha\}}$ on projektioketjujen summa, niin se ei itse välttämättä ole projektioketju. Yleisesti karkeistettu historia $C_{\{\alpha\}}$ on historioiden summa. Heikoksi dekoherenssiksi käsitetään tapahtuma, joka aiheuttaa kahden karkeistetun historian dekoherenssifunktionaalin reaali-osan häviämisen, eli

$$\operatorname{Re}D(\{\alpha\}, \{\alpha'\})|_{\{\alpha\} \neq \{\alpha'\}} = 0. \quad (4.3)$$

Tämä on välttämätön ja riittävä ehto sille, että historioiden todennäköisyyksiä voidaan laskea klassisella tavalla yhteen. Keskipahvaksi dekoherenssiksi kutsutaan sellaista, jolle pätee

$$D(\{\alpha\}, \{\alpha'\})|_{\{\alpha\} \neq \{\alpha'\}} = 0. \quad (4.4)$$

Monihistoriatulkinnassa dekoherenssi ymmärretään dynaamisena prosessina, joka tuottaa sellaisen tuloksen, että dekoherenssifunktionaali (tai sen reaaliosa) lähestyy nollaa. Yllä esitetyt ehdot ovat historioiden asettavia ristiriidattomuusehtoja. Mikäli lukija on lähemmin kiinnostunut historiatulkinnasta, niin kannattaa tutustua esimerkiksi viitteisiin [19, 112, 113, 114, 116] (asiaankuuluvalla varovaisuudella).

Dekoherenttien historioiden lähestymistavasta tunnetaan seuraavat suuret ongelmat:

1. Dekoherenssin käsitteet dekoherenttien historioiden lähestymistavassa ja tiheysmatriisiformalismissa eivät ole yhtenevät (tai palautettavissa toisiinsa) [113].

Syy siihen, miksi (ainakin minun mielestäni) tämä on iso ongelma (dekoherenttien historioiden lähestymistavalle), on se, että tiheysmatriisiformalismissa käytettäessä ei (yleensä) tarvitse tehdä viljeljiä arvauksia (tai tulkintoja) kvanttifysiikan metateoriasta ennen kuin voi alkaa laskea, mitä systeemissä tapahtuu. Monihistoriatulkinta itsessään on jo oletus, joka tehdään ennen laskemista.

2. Dekoherenttien historioiden lähestymistapa rikkoo yhtä kvanttifysiikan peruseriaa vastaan, jonka mukaan *periaatteessa aaltofunktio (täsmällisemmin: tilavektori) on perustavaa laatua oleva (täydellinen) kuvaus fyysisestä systeemistä* (esim. [22, 126]).

Kuten huomattiin, monihistoriatulkinnassa historiat eivät ole aaltofunktioiden historioita vaan observaabelien historioita. Aaltofunktion rooliksi jää olla teoreettinen apuväline muodostettaessa aikakehityslakeja observaabeleille historioihin liittyvien todennäköisyyksien avulla, minkä perusteella filosofisesti ajateltuna historioilla on

aaltofunktiota täydellisemmän ja perustavampaa laatua olevan systeemin tilan kuvauksen rooli. [126]

3. Etuoikeutetun kannan ongelma

Dekoherenttien historioiden lähestymistavassa dekoherenssin vaikutus systeemiin riippuu valitusta historioiden joukosta [136, 137]. Historioiden joukon valinta voidaan suorittaa mielivaltaisesti, ja se johtaa keskenään ristiriitaiseen propositiojoukkoon¹¹ [138]. Tämän takia ajassa eteen- ja taaksepäin tapahtuvassa ennustamisessa saattaa sattua kaikenlaista outoa: Tutkitaan kvanttimekaanista systeemiä nimeltä Maa (mukaan lukien se relevantti osa kosmoksesta, jolla on ollut merkittävää vaikutusta siihen, kuinka asiat ovat Maassa tapahtuneet). Käytettäessä dekoherenttien historioiden tulkintaa Maan tilan aikakehityksen laskemiseen alkaen tietystä päivästä vaikkapa 100 miljoonaa vuotta sitten on mahdollista päätyä siihen tilaan, missä Maa on nyt, mikäli ristiriidattomien historioiden joukkoa valittaessa on ollut sopivasti onnea matkassa. Kuitenkin on erittäin todennäköistä, että onnea ei ole ollut niin paljoa, ja Maan nykyisessä tilassa ravintoketjun huipulla ovatkin stratosfäärissä lentävät lihaa syövät vaaleanpunaiset valaat...

Viitteessä [139] esitellään eräs dekoherenttien historioiden kummallinen piirre: Oletetaan fysikaalinen todellisuus, jossa dekoherentit historiat pätevät. Tämän fysikaalisen todellisuuden objektiiviset ominaisuudet eivät olekaan objektiivisia, vaan riippuvat valitusta historioiden joukosta (perheestä)!

Todellisuudessaan fysikaaliset tapahtumat eivät ole riippuvaisia (ihmisen tekemästä) historioiden joukon valinnasta.

4.2 Itseaiheutetun dekoherenssin skeema

Itseaiheutetun dekoherenssin skeemassa [117, 118, 119, 120, 121] dekoherenssi syntyy jakamattoman suljetun systeemin sisällä – ympäristöä ei tarvita dekoherenssin lähteeksi. Dekoherenssimekanismi perustuu siihen, että odotusarvon $\langle M \rangle$ kvanttikorrelaatiot jatkuvassa energiaspektrissä ovat verrannollisia integraaliin

$$\langle M \rangle \sim \int dE \int dE' M(E, E') \exp(-i(E - E')t/\hbar), \quad (4.5)$$

¹¹contrary propositions

joka Riemannin-Lebesquen teoreeman [140] mukaan häviää, mikäli integrandi on L^1 integroitava ja $t \rightarrow \infty$ -mistä siis aiheutuu odotusarvon diagonalisoituminen. Tämän ajatuksen taustalla on kolme kriittistä premissiä [109]:

1. Jatkuva energiaspektri.

Jatkuva energiaspektri tarkoittaa sitä, että oletetaan systeemin olevan ääretön.

2. Operaattorin M termit ovat energian ominaiskannassa integroituvia energian funktioita.

Äärellisille systeemeille (diskreetti energiaspektri) tämä ei luonnollisesti päde.

3. Tarkastelun aikaskaala on ääretön.

Viitteessä [109] tehdyn tarkastelun mukaan avoimelle ja äärelliselle systeemille pitkän, mutta äärellisen ajan aikana tätä diagonalisaatiota ei tapahdu. Huomautettakoon tässä, että osa viitteen [109] itseaiheutetun dekoherenssin skeemaa vastaan esitetystä kritiikistä menee ohi kohteen, sillä avoin ja äärellinen malli poikkeaa fundamentaalilla tasolla suljetusta ja äärettömästä mallista, kuten käy ilmi alaluvusta 5.1. Tosin joka tapauksessa itseaiheutetun dekoherenssin skeemassa esitelty koherenssin määritelmän alkuaste ei ole kovinkaan yleispätevä, sillä se soveltuu vain äärettömiin systeemeihin.

4.3 Dekoherenssi avoimessa systeemissä: ”rois-todekoherenssin” vaikutus makroskooppisen superpositiotilan syntymiseen atomi- ja molekyylikondensaattitilojen välille

Mahdollisuus makroskooppisiin puhtaisiin koherenssi-ilmiöihin dekoherentissa ympäristössä on mielenkiintoinen. Fysikaalisessa todellisuudessa ainakin jonkinlaiset monen kappaleen koherenssi-ilmiöt vaikuttavat mahdollisilta, sillä niitä on havaittu – esimerkkejä löytyy luvusta 3. Mutta entä makroskooppinen, lomittunut superpositiotila? Oletettavasti se on huomattavasti herkempi ympäristön vaikutuksille kuin lähes koherentisti oskilloiva kondensaatti. Luvussa 3.3 esittelin lyhyesti teoreettisen mahdollisuuden luoda makroskooppinen atomi- ja molekyylikondensaattitilojen välinen superpositio. Tässä luvussa käsiteltävä realistisen ympäris-

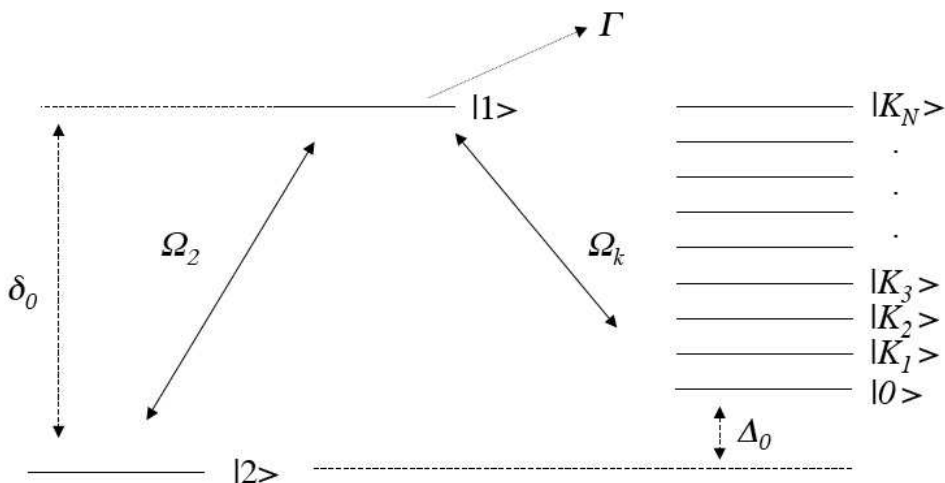
tön aiheuttaman ”roistodekoherenssin”¹² vaikutus aikaisemmin esiteltyyn idealistiseen malliin perustuu artikkeliin III. Millaisia vaikutuksia dekoherenssilla on esimerkin makroskooppiseen superpositioon, ja millä ehdoilla? Mikä tämä ympäristö on?¹³ Havainnollistan käyttämällä ⁸⁷Rb-atomeja esimerkkinä samoin kuin viitteessä [88] ja artikkelissa III.

Fotoassosiaatioissa laserilla yhdistetään nollaliikemäärän tilassa ($\mathbf{k} = 0$) olevia kondensaatin $|0\rangle$ atomeja virittyneen molekyylikondensaatin $|1\rangle$ molekyyleiksi. Toinen laser kytkee tämän virittyneen molekyylikondensaattitilan stabiilin molekyylikondensaattitilan $|2\rangle$ kanssa. Merkitään atomikondensaattiin, virittyneeseen molekyylikondensaattiin ja stabiiliin molekyylikondensaattiin operoivia hävitysoperaattoreita kirjaimilla $a_0 \equiv a$, b ja g . Tilassa $|1\rangle$ olevan molekyylin ei ole välttämätöntä hajota takaisin atomikondensaattiin $|0\rangle$, vaan se voi myös hajota kahdeksi atomiksi, joiden liikemäärät $\pm\mathbf{k}$ ovat vastakkaisiin suuntiin, eli tilaan $|\mathbf{K}\rangle \equiv |\mathbf{k}, -\mathbf{k}\rangle$. Nämä tilat ovat tutkimuksen kohteena olevan systeemin ympäristö – merkitään näihin tiloihin operoivia hävitysoperaattoreita $a_{\mathbf{k}}$ ($a_0 \equiv a$ on atomikondensaatti). Atomi-molekyyli- ja molekyyli-molekyyli-siirtymiä aiheuttavia vuorovaikutuksia kuvataan käyttäen vastaavia Rabi-taajuuksia $\Omega_{\mathbf{k}} = \Omega_1 f_{\mathbf{k}}$ ja Ω_2 , missä $f_{\mathbf{k}}$ ilmaisee atomi-molekyyli-kytkennän riippuvuuden aaltolukuvektorista \mathbf{k} . Yksi- ja kaksifotoniviritykset ovat Δ_0 ja $\delta = \delta_0 - i\frac{1}{2}\Gamma$, missä Γ on viritetyn molekyyli-tilan spontaania hajoamista kuvaava termi. Kuva 4.1 havainnollistaa tilanteen. Hiukkasten välisten törmäysvuorovaikutusten oletetaan noudattavan s-aaltosirontaa. Viritytyllä molekyylikondensaattitilalla olevien hiukkasten määrä on pieni, mikäli oletetaan suuret tilojen väliset viritykset. Täten törmäykset viritetyllä tilalla olevien hiukkasten kanssa voidaan jättää huomiotta, kuten myös ei-kondensaattitilojen kanssa. Merkitään jäljelle jäävien törmäysvuorovaikutusten suuruuksia λ_{aa} , λ_{gg} , ja λ_{ag} . Nyt, edellä esitellyn systeemin Hamiltonin operaattori pyörivän aallon approksimaatioissa on

$$\begin{aligned} \frac{H_3}{\hbar} &= -\Delta_0 g^\dagger g + \delta b^\dagger b + \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left(\Omega_1 f_{\mathbf{k}} b^\dagger a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} + h.c. \right) - \left(\Omega_2^* g^\dagger b + h.c. \right) \\ &\quad + 2\lambda_{ag} a^\dagger a g^\dagger g + \lambda_{gg} g^\dagger g^\dagger g g + \lambda_{aa} a^\dagger a^\dagger a a. \end{aligned} \quad (4.6)$$

¹²Englanniksi rogue decoherence. Nimetty ”roistofotodissosiaation” (rogue photodissociation) [75, 83, 88, 141, 142] mukaan. Atomi- ja molekyylikondensaattisysteemin populaatiomenetyksiä on tutkittu myös viitteissä [84, 85, 142].

¹³Viitteessä [143] esitellään samantyyppinen tutkimus, mutta molekyylikondensaattitila saadaan siinä aikaan magnetoassosiaatiolla käyttäen Feshbachin resonanssia, ja dekoherenssi aiheutuu sähkömagneettisen tyhjiön ja atomien välisestä vuorovaikutuksesta.



Kuva 4.1: Energiatasokaavio kahden laserin fotoassosiaatiosta. Alussa N atomia ovat Bose-kondensoituneet tilaan $|0\rangle$. Ensimmäinen laser hävittää tästä tilasta kaksi atomia ja luo molekyylin elektronisella viritystilalla olevaan tilaan $|1\rangle$. Kaksi sidottua molekyyliä kytkevä laser hävittää virittyneen molekyylin tilasta $|1\rangle$ ja luo elektronisella perustilalla olevan stabiilin molekyylin tilaan $|2\rangle$. Kondensaatin ulkopuolisten dissosiaatiomoodien kvasijatkumo N_{qc} on myös kuvassa esitettyinä; siinä liikemäärän $\pm\hbar\mathbf{k}$ ja energian $\hbar\epsilon_k = \hbar^2k^2/2m$ omaava atomipari miehittää tilan $|\mathbf{K}\rangle \equiv |\mathbf{k}, -\mathbf{k}\rangle$. Vapaa-sidottu- ja sidottu-sidottu-Rabi-taajuudet ovat $\Omega_k = \Omega_1 f_{\mathbf{k}}$ ja Ω_2 , missä $f_{\mathbf{k}}$ kuvaa vapaa-sidottu-kytkennän energiariippuvuutta. Elektronisesti virittyneen molekyyliä spontaani hajoamistekijä on Γ ja tilojen väliset viritykset ovat δ_0 ja Δ_0 .

Kirjoitetaan yksinkertaisuuden vuoksi $f_0 = f_0^* = 1$, $\Omega_j = |\Omega_j|e^{i\phi_j}$ ja $f_{\mathbf{k}} = f_{\mathbf{k}}^*$. Oletetaan myös, että hiukkaset ovat vapaita, eli $\epsilon_k = \hbar k^2/m$, missä m on atomin massa. Atomikondensaatin moodit $a_0 \equiv a$ kirjoitetaan selvyuden vuoksi eksplisiittisesti näkyviin.

Soveltamalla Hamiltonin operaattorista (4.6) saatavia Heisenbergin liikeyhtälöitä

$$i\dot{a} = -|\Omega_1|e^{-i\phi_1}a^\dagger b + 2\lambda_{ag}ag^\dagger g + 2\lambda_{aa}a^\dagger aa, \quad (4.7)$$

$$i\dot{a}_{\mathbf{k}} = \epsilon_k a_{\mathbf{k}} - \frac{1}{2}|\Omega_1|e^{-i\phi_1}f_{\mathbf{k}}a_{-\mathbf{k}}^\dagger b, \quad (4.8)$$

$$i\dot{b} = \delta b - \frac{1}{2}|\Omega_1|e^{i\phi_1}\sum_{\mathbf{k}}f_{\mathbf{k}}a_{\mathbf{k}}a_{-\mathbf{k}} - |\Omega_2|e^{i\phi_2}g, \quad (4.9)$$

$$i\dot{g} = -\Delta_0 g - |\Omega_2|e^{-i\phi_2}b + 2\lambda_{ag}a^\dagger ag + 2\lambda_{gg}g^\dagger gg \quad (4.10)$$

voidaan vähentää systeemin kuvaamiseen tarvittavia vapausasteita siirtymällä efektiiviseen kuvaukseen adiabaattisesti eliminoimalla viritetty

molekyylitila yhtälön (4.6) kuvaamasta Hamiltonin operaattorista. Tämä tapahtuu olettamalla δ :n olevan tutkittavan ongelman suurin taajuus, jolloin $\dot{b}/\delta \sim 0$. Täten

$$b = \frac{|\Omega_1|e^{i\phi_1}}{2\delta} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} + \frac{|\Omega_2|e^{i\phi_2}}{\delta} g. \quad (4.11)$$

Kun tämä sijoitetaan kolmen energiatason Hamiltonin operaattoriin (4.6), saadaan efektiivisesti kahden energiatason Hamiltonin operaattori. Yksinkertaistetaan vielä yhtälöitä merkitsemällä lasereiden suhteellista taajuutta $\phi = \phi_2 - \phi_1$ ja kirjoittamalla $\chi = |\Omega_1||\Omega_2|/\delta$. Tulokseksi saadaan

$$\begin{aligned} \frac{H_2}{\hbar} &= -\Delta' g^\dagger g + \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{2} \Delta_0 + \epsilon_k \right) a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \\ &\quad - \frac{\chi}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left(e^{i\phi} g^\dagger f_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} + \text{h.c.} \right) \\ &\quad + 2\lambda_{ag} a^\dagger a g^\dagger g + \lambda'_{aa} a^\dagger a^\dagger a a + \lambda_{gg} g^\dagger g^\dagger g g, \end{aligned} \quad (4.12)$$

missä $\Delta' = \Delta_0 + |\Omega_2|^2/\delta$ ja $\lambda'_{aa} = \lambda_{aa} - |\Omega_1|^2/4\delta$. Tuloksena saadaan täsmälleen samanmuotoinen Hamiltonin operaattori kuin yhden laserin siirtymissä, mutta kahden fotonin Rabi-taajuus on korvannut yhden fotonin Rabi-taajuuden Ω_1 .

Seuraavaksi johdan mestariyhtälön [144, 145, 146, 147] stabiilille molekyyliekondensaatille käyttäen samankaltaisia ideoita kuin viitteessä [141]. Ongelma ratkaistaan toisen kertaluvun häiriöteoriaa käyttäen vuorovaiikutuskuvassa. Nimetään atomi- ja molekyyliekondensaatit systemiksi ja kondensaattien ulkopuoliset vapausasteet ympäristöksi, jolloin Hamiltonin operaattori (4.12) voidaan kirjoittaa muodossa

$$\frac{H_2}{\hbar} = \frac{H_S}{\hbar} + \frac{H_R}{\hbar} - \left(\frac{\chi}{2} e^{i\phi} g^\dagger \sum_{\mathbf{k} \neq 0} f_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} + \text{h.c.} \right). \quad (4.13)$$

Liikevakion $\lambda'_{aa}(N - N^2)$ lisääminen H_2 :een ei muuta dynamiikkaa, joten laskennallisista syistä tehdään niin. Täten (kun $H_S = H_0 + H_I$),

$$\frac{H_0}{\hbar} = -\Delta g^\dagger g, \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned} \frac{H_I}{\hbar} &= -\frac{1}{2} \chi \left(e^{-i\phi} a^\dagger a^\dagger g + e^{i\phi} g^\dagger a a \right) \\ &\quad - 2\lambda g^\dagger a^\dagger g a + (\lambda_{gg} - 4\lambda'_{aa}) g^\dagger g g^\dagger g, \end{aligned} \quad (4.15)$$

$$\frac{H_R}{\hbar} = \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \epsilon_k a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}, \quad (4.16)$$

missä $\Delta = \Delta' - 2\lambda'_{aa} + \lambda_{gg}$, ja $\lambda = 2\lambda'_{aa} - \lambda_{ag}$. Tämän jälkeen sovelletaan Bornin approksimaatiota vuorovaikutuskuvassa ilmaistun mestariyhtälön laskemiseen. Systeemi $|n_m\rangle|n_a\rangle$ ja ympäristö $\prod_{\mathbf{k}\neq\mathbf{0}}|l_a\rangle_{\mathbf{k}}$ eivät alussa ole korreloituneet, eli $\rho_{tot} = \rho_s \otimes \rho_e$. Täydellisen kuvauksen tiheysmatriisin liikeyhtälö vuorovaikutuskuvassa on

$$\dot{\rho}_{tot} = -\frac{i}{\hbar} [H_{int}, \rho_{tot}]. \quad (4.17)$$

Integroinnin, jäljen ottamisen ympäristön yli ja toista kertalukua korkeampien termien huomioon ottamatta jättämisen jälkeen saadaan

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_s &= -\frac{i}{\hbar} \text{Tr}_e [H_{int}(t), \rho_s(0) \otimes \rho_e] \\ &- \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt_1 \text{Tr}_e [H_{int}(t), [H_{int}(t_1), \rho_s(0) \otimes \rho_e]] \\ &= \dot{U}_1(t) + \dot{U}_2(t). \end{aligned} \quad (4.18)$$

Hamiltonin operaattori (4.13) on vuorovaikutuskuvassa

$$H_{int} = -\hbar (A^\dagger \Gamma + \Gamma^\dagger A), \quad (4.19)$$

missä on käytetty lyhennysmerkintöjä

$$\Gamma = \sum_{\mathbf{k}\neq\mathbf{0}} f_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} e^{-i(\epsilon_{\mathbf{k}} - \Delta)t}, \quad (4.20)$$

$$A = \frac{\chi}{2} e^{-i\phi} g. \quad (4.21)$$

Laskemalla yhtälössä (4.18) oleva jälki saadaan ensimmäisen kertaluvun termiksi

$$\dot{U}_1(t) = i \left(\langle \Gamma(t) \rangle [A^\dagger, \rho_s(0)] + \langle \Gamma^\dagger(t) \rangle [A, \rho_s(0)] \right), \quad (4.22)$$

ja toisen kertaluvun termi on

$$\begin{aligned} \dot{U}_2(t) &= -\int_0^t dt_1 \left(\langle \Gamma(t) \Gamma(t_1) \rangle [A^\dagger, [A^\dagger, \rho_s(0)]] + \langle \Gamma^\dagger(t) \Gamma(t_1) \rangle [A, [A^\dagger, \rho_s(0)]] \right) \\ &+ \langle \Gamma(t) \Gamma^\dagger(t_1) \rangle [A^\dagger, [A, \rho_s(0)]] + \langle \Gamma^\dagger(t) \Gamma^\dagger(t_1) \rangle [A, [A, \rho_s(0)]] \right). \end{aligned} \quad (4.23)$$

Seuraavat kuusi integraalia jäävät laskettavaksi:

$$I_1 = \langle \Gamma(t) \rangle, \quad (4.24)$$

$$I_2 = \langle \Gamma^\dagger(t) \rangle = I_1^*, \quad (4.25)$$

$$I_3 = \int_0^t dt_1 \langle \Gamma(t) \Gamma(t_1) \rangle, \quad (4.26)$$

$$I_4 = \int_0^t dt_1 \langle \Gamma^\dagger(t) \Gamma^\dagger(t_1) \rangle, \quad (4.27)$$

$$I_5 = \int_0^t dt_1 \langle \Gamma^\dagger(t) \Gamma(t_1) \rangle, \quad (4.28)$$

$$I_6 = \int_0^t dt_1 \langle \Gamma(t) \Gamma^\dagger(t_1) \rangle. \quad (4.29)$$

Integraalit

$$I_1 = I_2 = I_3 = I_4 = 0, \quad (4.30)$$

koska termisessä tasapainossa olevan korreloitumattoman lämpökylvyn korrelaatiofunktio $\langle a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} \rangle$ on nolla. Muulla tavalla korreloituneita ympäristöjä on käsitelty esimerkiksi viitteessä [141]. Korreloitumattoman lämpökylvyn olettaminen mallinnuksessa on ensimmäisenä approksimaationa perusteltua, koska ympäristönä on kondensaatin ympärillä oleva terminen pilvi. Toki todelliset termiset pilvet kondensaattien ympärillä voivat sisältää epätriviaaleja korrelaatioita. Oletetaan myös, että termisessä pilvessä olevien hiukkasten määrä ja energia ovat lähes vakioita ajan suhteen, kuten myös kondensaateissa olevien hiukkasten määrä. Nyt nollostapoikkeavat korrelaatiot ovat muotoa

$$\langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} a_{-\mathbf{k}'} \rangle = 4\pi n_k^2 \delta_{k,k'}. \quad (4.31)$$

Lasketaan vaikkapa I_5 :

$$\begin{aligned} I_5 &= \int_0^t dt_1 \langle \Gamma^\dagger(t) \Gamma(t_1) \rangle \\ &= \int_0^t dt_1 \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} f_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}'} 4\pi n_k^2 \delta_{k,k'} e^{i(\epsilon_k - \Delta)t} e^{-i(\epsilon_{k'} - \Delta)t_1} \\ &= 4\pi \int_0^t dt_1 \sum_k f_k^2 n_k^2 e^{i(\epsilon_k - \Delta)(t-t_1)}. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Summa voidaan muuttaa integraaliksi olettamalla, että suurin mahdollinen liikemäärä on hyvin suuri, eli ääretön. Kuitenkin tällä approksimaatiolla on seurauksia, joita alkuperäisen ongelmanasettelun (äärellinen suurin mahdollinen liikemäärä) mukaisessa systeemissä ei ole, eli irreversiibeli dynamiikka. Tämä tarkoittaa sitä, että koherenssi häviää systeemistä monotonisesti. Summien integraaleiksi muuttamiseen liittyviä filosofisia ja fysikaalisia kysymyksiä käsitellään tarkemmin alaluvussa 5.1. Jos loukku halutaan ottaa mukaan analyysiin, integraaliksi muuttamisessa pitää ottaa huomioon loukun tilatiheys. Yksinkertaisuuden vuoksi kuitenkin oletetaan, että hiukkaset ovat vapaita, koska ensimmäisessä approksimaatiossa

haluan pitää asiat mahdollisimman yksinkertaisina unohtamatta kuitenkaan mitään oleellista. Loukun huomiotta jättämistä voidaan perustella sillä, että dekoherenssin aikaskaala on yleensä huomattavasti nopeampi kuin loukun aikaskaala.

Seuraavaksi siirrytään taajuusesitykseen: $k = \sqrt{m\epsilon/\hbar}$, $d\epsilon = (2\hbar/m)kdk$, jolloin

$$I_5 = \frac{m^{3/2}V}{\pi\hbar^{3/2}} \int_0^t dt_1 \int_0^\infty d\epsilon \sqrt{\epsilon} f^2(\epsilon) n^2(\epsilon) e^{i(\epsilon-\Delta)(t-t_1)}. \quad (4.33)$$

Oletetaan myös, että Markovin approksimaatio pitää paikkansa, eli Δ on riittävän suuri ja että $\sqrt{\epsilon} f^2(\epsilon) n^2(\epsilon)$ on hitaasti muuttuva funktio pisteen $\epsilon = \Delta$ läheisyydessä, jolloin korrelaatioaikaskaala on niin lyhyt, että voidaan asettaa $t \rightarrow \infty$ integraalissa I_5 . Ehdot täyttyvät, kun $\hbar\Delta \sim kT$. Tämä johtaa pääarvointegraaliin

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t e^{i(\epsilon-\Delta)(t-t_1)} = \pi\delta(\epsilon - \Delta) + i \frac{PV}{\Delta - \epsilon}. \quad (4.34)$$

Siispä

$$I_5 = \frac{m^{3/2}V}{\hbar^{3/2}} \sqrt{\Delta} f^2(\Delta) n^2(\Delta) + i\Delta_*, \quad (4.35)$$

missä

$$\Delta_* = \frac{Vm^{3/2}}{\pi\hbar^{3/2}} PV \int_0^\infty d\epsilon \frac{\sqrt{\epsilon}}{\epsilon - \Delta} f^2(\epsilon) e^{i(\epsilon-\Delta)(t-t_1)} n^2(\epsilon). \quad (4.36)$$

Teknisesti ottaen termi Δ_* liittyy Lambin siirtymään, mutta sellainen esiintyy aina, mikäli sidottu tila kytketään jatkumoon. Siirtymää on tutkittu teoreettisesti [148, 149] ja kokeellisesti [150, 151, 152]. Oletan, että siirtymä voidaan jättää huomiotta tässä tutkimuksessa – käytännössä sen voisi sisällyttää viritukseen Δ . Samalla tavalla saadaan ratkaistua I_6 :

$$I_6 = \frac{m^{3/2}V}{\hbar^{3/2}} \sqrt{\Delta} f^2(\Delta) [n(\Delta) + 1]^2. \quad (4.37)$$

Täten mestariyhtälö vuorovaikutuskuvassa on

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{int} &= -I_5 [A, [A^\dagger, \rho]] - I_6 [A^\dagger, [A, \rho]] \\ &= (I_5 + I_6)(A\rho A^\dagger + A^\dagger\rho A - AA^\dagger\rho - \rho A^\dagger A), \end{aligned}$$

ja vastaava mestariyhtälö Schrödingerin kuvassa

$$\dot{\rho}_s = -\frac{i}{\hbar} [H_0 + H_I, \rho_s] + \dot{\rho}_{int}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{i}{\hbar} \left[\Delta(g^\dagger g \rho - \rho g^\dagger g) + \frac{1}{2} \chi e^{-i\phi} (a^\dagger a^\dagger g \rho - \rho a^\dagger a^\dagger g) + \frac{1}{2} \chi e^{i\phi} (g^\dagger a a \rho - \rho g^\dagger a a) \right. \\
&\quad \left. - (\lambda_{gg} - 4\lambda'_{aa})(g^\dagger g g^\dagger g \rho - \rho g^\dagger g g^\dagger g) + 2\lambda(g^\dagger a^\dagger g a \rho - \rho g^\dagger a^\dagger g a) \right] \\
&\quad + (I_5 + I_6)(A \rho A^\dagger + A^\dagger \rho A - A A^\dagger \rho - \rho A^\dagger A), \tag{4.38}
\end{aligned}$$

missä H_I :tä kohdellaan häiriönä.

Tarkoituksena on tutkia ”roistodissosiaation” aiheuttamaa dekoherenssia. On huomion arvoista, että vahvan kahden laserin fotoassosiaation käytännön toteuttamista Bose-kondensaatissa pidetään kiistanalaisena [153]. Työoletukseni on, että vahva kahden laserin fotoassosiaatio Bose-kondensaatissa on mahdollista, ja lisäksi on mahdollista ottaa kohteeksi energetisesti riittävän alhainen elektroninen perustila, jotta vibraatiotilojen relaksaatiosta aiheutuva hävikki voidaan jättää huomiotta [154].

Simulaatiot koostuvat kahdesta osasta. Ensiksi, törmäysvuorovaikutuksia paljon voimakkaampaa fotoassosiaatiota käyttäen, luodaan soveltuva atomi- ja molekyylikondensaattien yhdistelmä (vaihe *I*). Tämän jälkeen fotoassosiaation voimakkuutta vähennetään, ja dominoivien törmäysvuorovaikutusten johdosta atomi- ja molekyylikondensaattien yhdistelmä kehittyy makroskooppiseksi atomi- ja molekyylikondensaattien superpositioksi (vaihe *II*).

Sovelias vaiheen *I* atomi- ja molekyylikondensaattien yhdistelmä saadaan parametreilla [88]

$$\Delta = 0, \tag{4.39}$$

$$\chi = 10\sqrt{N}\lambda, \tag{4.40}$$

$$\phi = \pi/2. \tag{4.41}$$

Sovelias tarkoittaa, että yhdistelmä-kondensaatin todennäköisyysamplitudi on reaalin [88], mistä syystä suhteelliseksi vaiheeksi valitaan $\phi = \pi/2$. Vahvan resonantin kaksifotonifotoassosiaatiolaserpulssin kesto τ voidaan laskea semiklassisesta approksimaatiosta molekyyille [88]: $N/4 = (N/2) \tanh^2(\sqrt{N}\chi\tau)$ – tulos on lainattu fotonien toisen harmonisen generoitumisen teoriasta [92]. Ehto $\Delta = 0$ tarkoittaa, että systeemi on Stark-siirrettyssä resonanssissa, jolloin Markovin approksimaatio muuttuu epäilyttäväksi. Resonanssissa vuorovaikutusten voimakkuuden suhde aikaskaalaan kasvaa, jolloin on myös oletettavaa, että dekoherenssin rooli muuttuu enemmän dominoivaksi. Täten on pakko käyttää riittävän suurta kaksifotoniviritystä $\hbar\Delta > kT$, jotta voidaan välttää resonanssi ja täyttää Markovin approksimaation ehdot¹⁴. $\Delta = 0.1N\lambda$ on riittävä, kun tiheys on $\rho = 1.88 \times 10^{19} \text{m}^{-3}$. On tärkeää huomata, että Δ :n arvo vaikuttaa

¹⁴On huomionarvoista, että viitteessä [88] annettu parametrin arvo $\Delta = 0$ ei tar-

superpositiopiikkien tasapainoon, ja sitä kautta vaiheen I päättymisajan-kohtaan τ .

Toinen vaihe on törmäysvuorovaikutusten dominoima:

$$\Delta = \sqrt{N}\chi = 0.1N\lambda, \quad (4.42)$$

$$\chi = 0.1\sqrt{N}\lambda, \quad (4.43)$$

$$\phi = 0. \quad (4.44)$$

Törmäysvuorovaikutukset ovat

$$\lambda_{aa} = \frac{4\pi\hbar a_{aa}}{mV}, \quad (4.45)$$

$$\lambda_{ag} = \frac{3\pi\hbar a_{ag}}{mV}, \quad (4.46)$$

$$\lambda_{gg} = \frac{2\pi\hbar a_{gg}}{mV}, \quad (4.47)$$

missä atomi-atomi-törmäysten sirontapituus on $a_{aa} = 5.4$ nm [155, 156], atomi-molekyyli-törmäysten sirontapituus $a_{ag} = -9.346$ nm [155, 156], tuntematonta molekyyli-molekyyli -sirontapituutta approksimoidaan olettamalla $a_{gg} = a_{aa}$, ^{87}Rb -atomin massa on $m = 1.443 \times 10^{-25}$ kg, ja V on kvantisointitilavuus, joka riippuu kontekstista (kuutiolaatikko, pallo, harmoninen loukku tms.). Virittämällä atomi-atomi-sirontapituutta optisesti [148, 149, 157, 158, 159, 160] simulaatioissa käytettävien parametrien määrää voidaan vähentää asettamalla $\lambda_{gg} - 4\lambda'_{aa} = 0$, mikä tarkoittaa, että $a'_{aa} = a_{gg}/8$. Mikäli $|\delta| \gg \Gamma$, niin spontaania hajoamista kuvaavan termin $\Gamma = 12 \times 2\pi$ MHz [156] vaikutuksen pitäisi olla riittävän pieni jätettäväksi huomiotta, joten valitaan $|\delta| \sim 10^3 \times 2\pi$ MHz. Tätä viritystä käyttämällä (ja estämällä omituisen suuret molekyyli-molekyylisirontapituudet) laserilla aikaan saatavan sirontapituuden muuttamisen pitäisi olla mahdollista. Edellä mainittua λ'_{aa} :n arvoa käyttäen saadaan törmäysvuorovaikutuksen voimakkuudeksi $\lambda = (\rho/N) \times 7.67715 \times 10^{-17}$ Hz, missä $[\rho] \equiv \text{m}^{-3}$. Lisäksi oletetaan ensimmäisen kertaluvun approksimaationa tasainen kytkentäprofiili $f(\Delta) = 1$ kondensaatissa olevien molekyylien ja kondensaatin ulkopuolisten moodien välillä.

koita, että kyseinen parametri olisi tässä tutkimuksessa pieni verrattuna muihin parametreihin. Δ :n arvon tulee täyttää ainoastaan Markovin approksimaation pätevyyden edellytykset. Tämä kiinnittää suhteen T/ρ , sillä kuten myöhemmin tulee ilmi, $\lambda = (\rho/N) \times 7.67715 \times 10^{-17}$ Hz, missä $[\rho] \equiv \text{m}^{-3}$. Ongelma pysyy yksinkertaisena ja yleisenä, mikäli valitaan $\Delta \sim N$, ja Δ :n arvo annetaan yksiköissä λ . Nyt kirjoittamalla $\Delta = xN\lambda$ saadaan Markovin approksimaation ehdoksi $x\hbar/k \times 7.67715 \times 10^{-17}$ Hz $> T/\rho$.

Laskut suoritetaan molekyyliiluvun kannassa $\rho = |m\rangle\langle m'|$, missä m ja m' ovat molekyyliilukuja ja N on hiukkasten yhteenlaskettu määrä. Täten ratkaistavana olevat kytketyt yhtälöt ovat

$$\begin{aligned}
\dot{\rho}_{m,m'} = & \rho_{m,m'} \{ i\Delta(m-m') + i2\lambda[(N-2m)m - (N-2m')m'] \\
& - \frac{\chi^2}{4}(I_5 + I_6)m' \} & ; \forall m, m' \\
& - \rho_{m,m'} \frac{\chi^2}{4}(I_5 + I_6)(m+1) & ; m < N/2 \\
& + \rho_{m-1,m'} \frac{i\chi}{2} e^{-i\phi} \sqrt{(N-2m+1)(N-2m+2)m} & ; m > 0 \\
& - \rho_{m,m'+1} \frac{i\chi}{2} e^{-i\phi} \sqrt{(N-2m')(N-2m'-1)(m'+1)} & ; m' < N/2 \\
& + \rho_{m+1,m'} \frac{i\chi}{2} e^{i\phi} \sqrt{(N-2m)(N-2m-1)(m+1)} & ; m < N/2 \\
& - \rho_{m,m'-1} \frac{i\chi}{2} e^{i\phi} \sqrt{(N-2m'+1)(N-2m'+2)m'} & ; m' > 0 \\
& + \rho_{m-1,m'-1} \frac{\chi^2}{4}(I_5 + I_6)\sqrt{mm'} & ; m, m' > 0 \\
& + \rho_{m+1,m'+1} \frac{\chi^2}{4}(I_5 + I_6)\sqrt{(m+1)(m'+1)}. & ; m, m' < N/2
\end{aligned} \tag{4.48}$$

Matriisielementin $\dot{\rho}_{m,m'}$ laskemiseen liittyvät ehdot on eksplisiittisesti ilmaistu yhtälössä (4.48) puolipisteen jälkeen. Mikäli ehto ei täyty, kyseisen yhtälön osan kontribuutio on nolla. Liiketytälöt (4.48) käyttäytyvät hyvin termodynaamisella rajalla $V \rightarrow \infty$, koska fotoassosiaatiolle tyypillisesti $\chi \sim 1/\sqrt{V}$ [66, 75], $I_5 + I_6 \sim V$ ja $\rho_{m,m'} \sim 1/N$.

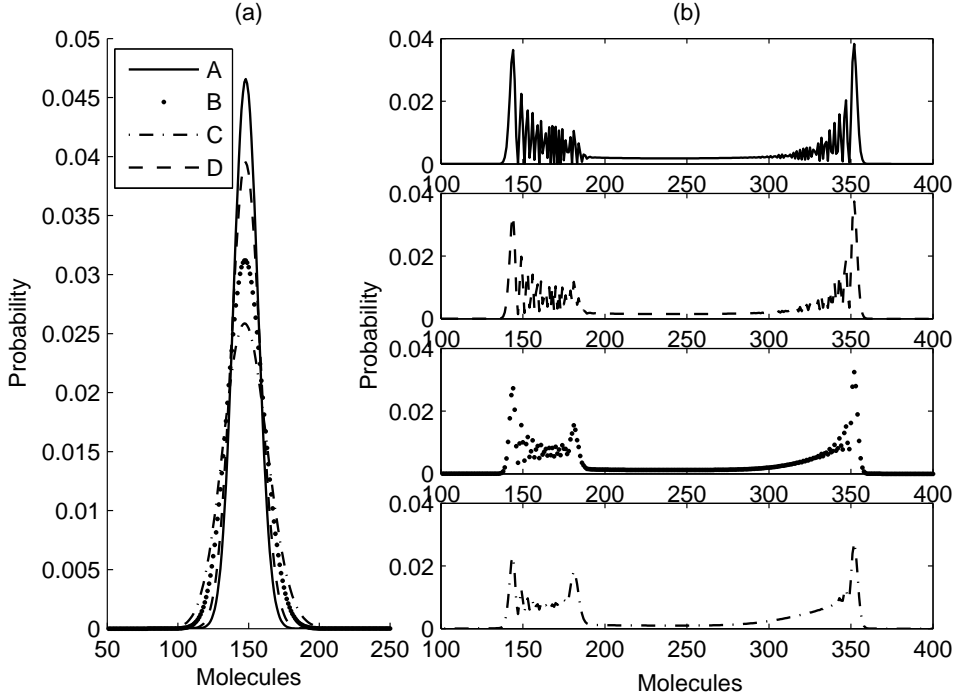
Tavanomainen koherenssin vähenemisprofiili on muotoa e^{-t/τ_d} , mitä kautta määritellään dekoherenssiaika τ_d [104, 105]. Vaihe I noudattaa tätä normaalia kaavaa, ja sen dekoherenssiaika on

$$\tau_{d,\text{off}} = \frac{4}{\chi^2(I_5 + I_6)} = \frac{4\hbar^{3/2}\rho}{m^{3/2}\chi^2\sqrt{\Delta}N(2n^2 + 2n + 1)}, \tag{4.49}$$

missä N on kondensaattimodeissa olevien hiukkasten kokonaislukumäärä ja $n = 1/[\exp(\hbar\Delta/kT) - 1]$ on kondensaatin ulkopuolisten moodien hiukkasmäärä. Koska fotoassosiaatio dominoi vaihetta I , dekoherenssiaikaskaalaa pitää verrata fotoassosiaation aikaskaalaan $\tau_{pa} = (\sqrt{N}\chi)^{-1}$. Dekoherenssin voimakkuutta voidaan kuvata yhtälöllä

$$\xi_{d,I} = \frac{\tau_d}{\tau_{pa}} = \frac{2.712057 \times 10^{10}}{\sqrt{\rho[\text{m}^3]}(2n^2 + 2n + 1)}, \tag{4.50}$$

missä on käytetty viritystä $\Delta = 0.1N\lambda$. Useimmissa simulaatioissa on käytetty pientä mutta realistista lämpötilaa $T = 10^{-9}\text{K}$, jolloin Markovin approksimaatio edellyttää, että $\Delta > 131\text{Hz}$. Resonanssiin verrattuna nolasta poikkeava viritys vaiheessa I ei vaikuta kovinkaan paljoa hetkeen τ , jolloin vaihe I päättyy. Yleistettyä Rabi-taajuutta $\chi_{gen} = \sqrt{N\chi^2 + \Delta^2} =$



Kuva 4.2: Skenaarioiden A (ei dekoherenssia), B (maltillinen dekoherenssi), C (vahva dekoherenssi) ja D (heikko dekoherenssi) todennäköisyysjakaumat hetkellä (a) $\lambda t_1 = 8.6 \times 10^{-5}$, jolloin vaihe I päättyy, ja hetkellä (b) $\lambda t_2 = 1.0486 \times 10^{-2}$, jolloin superpositiopiikkien pitäisi ilmestyä. Dekoherenssi vaikuttaa todennäköisyysjakauman muotoon siten, että mitä vahvempi dekoherenssi, sitä matalammat ja leveämmät todennäköisyyspiikit.

$N\lambda\sqrt{100 + 0.01}$ [79] käyttäen saadaan tarkempi aika-arvio semiklassisesta approksimaatiosta $N/4 = (N/2) \tanh^2(\sqrt{N}\chi\tau)$, mutta sen käyttö ei ole tarpeellista. Sen sijaan voidaan optimoida atomi- ja molekyylikondensaattien superpositiopiikkien etäisyyttä toisistaan mahdollisimman suureksi. Optimaalinen superposition koko mahdollisimman samansuuruisilla todennäköisyyspiikeillä saadaan, kun vaihe I päättyy hetkellä τ , jolloin $\text{Tr}\rho g^\dagger g \sim 0.296N/2$. Tämä hetki on erittäin herkkä – molekyylien suhteellisen osuuden tarkkuuden tulee olla $\sim \pm 0.001$, jotta samankokoiset todennäköisyyspiikit ovat mahdollisia. Hetki τ riippuu myös hiukkasluvusta N . Edellä mainittu ehto on pätevä, kun $N = 1000$.

Vaihe II käyttäytyy samalla tavalla, ja formaalisti sen dekoherenssiaika on sama kuin yhtälön (4.49) vaiheelle I ilmaisema. Koska törmäykset ovat nyt hallitseva vuorovaikutus, verrataan dekoherenssiaikaskaalaa törmäysaikaskaalaan $\tau_c \sim (2N\lambda)^{-1}$. Täten dekoherenssin voimakkuudeksi

saadaan

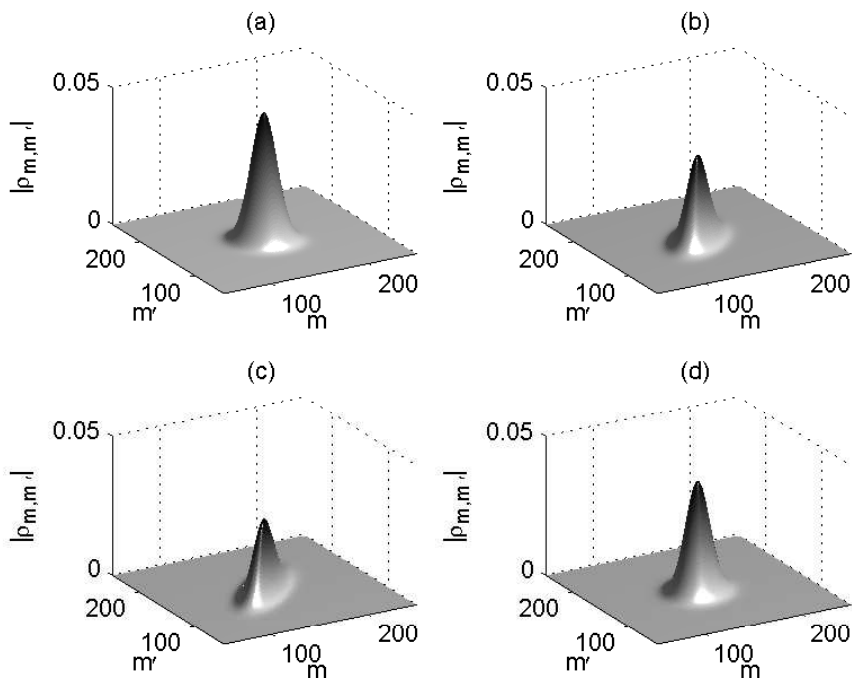
$$\xi_{d,II} = \frac{\tau_d}{\tau_c} = \frac{2.408246 \times 10^{10}}{\sqrt{\rho[\text{m}^3]}(2n^2 + 2n + 1)}. \quad (4.51)$$

Mikäli vaiheen I lopputuloksena on sovelias tila makroskooppisen atomimolekyylisuperposition luomiseen, niin vaiheessa II törmäykset aikaansaavat ne korrelaatiot, jotka tuottavat halutun superpositiotilan. Dekoherenssi puolestaan vähentää näitä korrelaatioita. Jos dekoherenssin aikaskaala on lyhyempi kuin fotoassosiaation vaiheessa I ja törmäysten vaiheessa II , makroskooppista superpositiota ei synny. Superposition syntyminen ehto on, että $\xi_{d,II} \gg 1$.

Laskennallisista syistä rajoitutaan tutkimaan $N = 1000$ hiukkasen systeemiä neljässä erilaisessa relevantissa skenaariossa. Skenaario A :ssa dekoherenssi on kytketty pois, eli $\xi_{d,I} = \xi_{d,II} \approx \infty$. Skenaariossa B parametrien arvot $\rho = 1.88 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$ ja $T = 10^{-9} \text{ K}$ aiheuttaa maltillisen dekoherenssin, eli $\xi_{d,I} = 3.44$ ja $\xi_{d,II} = 3.05$. Skenaario C on rajatapaus, jolla $\xi_{d,I} = \xi_{d,II} = 1$. Dekoherenssin voimakkuutta kuvaavaa termiä hyväksi käyttäen yhtälöistä (4.50) ja (4.51) saadaan tarvittaessa laskettua ehdon toteuttavat tiheyden ja lämpötilan arvot. Skenaariossa D oletetaan lämpötilaksi $T = 10^{-10} \text{ K}$ ja tiheydeksi $\rho = 1.88 \times 10^{18} \text{ m}^{-3}$, jolloin $\xi_{d,I} = 10.88$ ja $\xi_{d,II} = 9.65$. Oleelliset tulokset ovat havaittavissa kuvista 4.2–4.4. Kuvassa 4.2 on esitetty kaikkien skenaarioiden todennäköisyysjakaumat kahtena ajankohtana. Ensimmäisenä ajankohtana (t_1) vaihe I päättyy, ja reaalisen todennäköisyysamplitudin omaava yhdistelmä-kondensaatti syntyy. Tämä yhdistelmä-kondensaatti on paras mahdollisuus makroskooppisen superposition aikaansaamiseen vaiheessa II . Toinen ajanhetki (t_2) on silloin, kun superpositiopiikkien pitäisi ilmestyä. Kuvassa 4.3 esitellään kaikkien skenaarioiden tiheysmatriisit hetkellä t_1 ja kuvassa 4.4 tiheysmatriisit hetkellä t_2 .

Mikäli dekoherenssi on riittävän voimakas, kvanttikorrelaatiot vaimenevat ja terävät huiput todennäköisyysjakaumassa tasoittuvat. Dekoherenssi vaikuttaa myös maltillisen dekoherenssin alueella $1 < \xi_d < 6$ olevan riittävän voimakas estämään makroskooppisen superposition syntyminen. Vahvan dekoherenssin alueella $\xi_d < 1$ efekti on huomattavasti voimakkaampi ja nopeampi. Jotta makroskooppisen superposition luominen olisi mahdollista, parametrien pitää mahdollistaa turvallisesti heikon dekoherenssin alueella pysyminen, eli $\xi_d > 10$. Tämä kuitenkin ei ole mahdollista nykyteknologian mahdollistamilla parametreilla. Kondensaatin kylmyysennätys haihdutusjäähdytyksellä¹⁵ on natriumille noin $T = 5 \times 10^{-10} \text{ K}$ [161]. Toinen mahdollisuus on, että käytetään paramet-

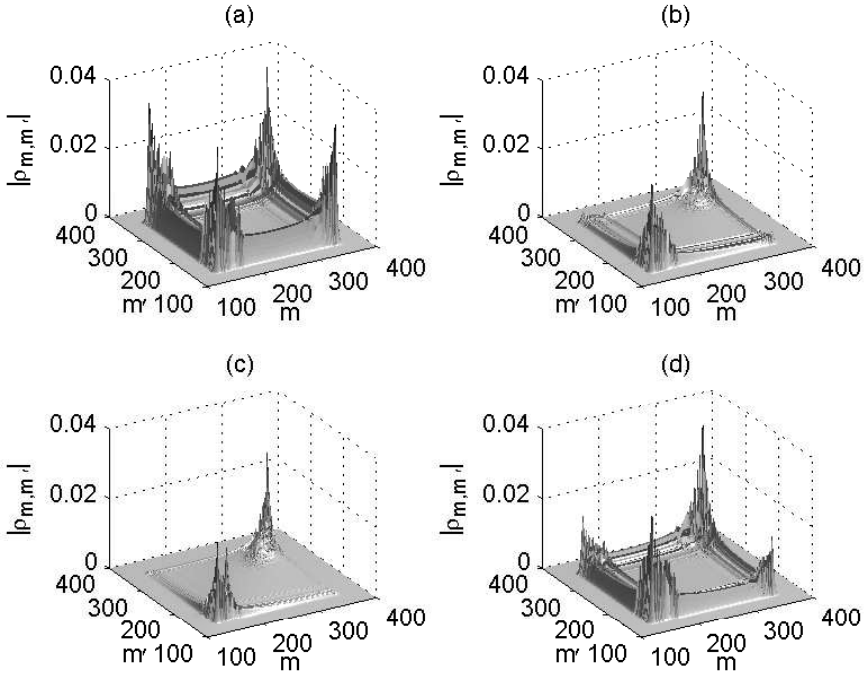
¹⁵evaporative cooling



Kuva 4.3: Skenaarioiden A [(a) ei dekoherenssia], B [(b) maltillinen dekoherenssi], C [(c) vahva dekoherenssi] ja D [(d) heikko dekoherenssi] tiheysmatriisit vaiheen I lopussa. Dekoherenssin vaikutus on selvästi havaittavissa skenaarioissa B ja C , joissa ei-diagonaalelementtien vaimeneminen on aiheuttanut ellipsimäisen gaussisen aaltopakettin.

rien arvoja, jotka johtavat systeemin ei-markoviselle alueelle. Tällöin voi hyvinkin olla mahdollista, että dekoherenssin vaikutusta kuvaavaa lukua ξ_d saadaan parannettua ainakin vaiheessa I . Ei-markovisen alueen käytöksen miettiminen on kuitenkin vain spekulointia, sillä käyttämälläni mallilla sitä ei voida (luotettavasti) mallintaa, joten se jääköön jatkotutkimuksen aiheeksi. On myös mahdollista manipuloida joko ympäristöä tai kondensaattien vuorovaikutusta kondensaatin ulkopuolisten vapausasteiden kanssa. Ympäristön symmetrisointi, jota käytettiin viitteessä [162] vähentämään huomattavasti dekoherenssin vaikutusta, saattaa olla atomimolekyylisuperposition kohdalla vaikea, miltei mahdoton tehtävä vuorovaikutusten epälineaarisuuden vuoksi. Sopivalla tavalla korreloidun ympäristön luominen tosin saattaa helpottaa tilannetta, koska korreloitumaton lämpökylpy on todella rankka ympäristö koherenssi-ilmiöille.

Tuotakoon tässä yhteydessä eksplisiittisesti esille, että esittämäni teoreettinen koejärjestely ei todellakaan ole täsmällinen kuvaus mahdoli-



Kuva 4.4: Skenaarioiden A [(a) ei dekoherenssia], B [(b) maltillinen dekoherenssi], C [(c) vahva dekoherenssi] ja D [(d) heikko dekoherenssi] tiheysmatriisit hetkellä t_2 , jolloin makroskooppisen superpositiotilan pitäisi ilmetä. Myös skenaariossa D , jolla on äärimmäisyyksiin vietyt parametrien arvot $T = 10^{-10}\text{K}$ ja $\rho = 10^{18}\text{m}^{-3}$, vain pieni osa kvanttikorrelaatioista (ei-diagonaalelementeistä) on jäänyt jäljelle.

sesta todellisesta fysikaalisesta koejärjestelystä. Mallia rakennettaessa on jonkinlaisen laskettavuuden mahdollistamiseksi ollut pakko tehdä approksimaatioita, jotka saattavat syvällisemmän analyysin ja/tai paremman fysikaalista todellisuutta koskevan tietämyksen valossa osoittautua enemmän tai vähemmän epäfysikaaliksi. Kuitenkaan näitä approksimaatioita ei ole tehty siihen suuntaan, että makroskooppinen superpositio selvityisi mallissa pidempään hengissä kuin todellisuudessa, vaan malli lähinnä antaa ylärajan roistodekoherenssin voimakkuudelle. Ilmeisimmät mallissa olevat poikkeamat fysikaalisesta todellisuudesta liittyvät ympäristön ja vuorovaikutuskytkentöjen mallintamiseen. Oikea kondensaatti valmistetaan jäädyttämällä bosoniatomeista koostuvaa kaasua. Nollaliikemäärän tilaan kasaantuvat atomit muodostavat kondensaatin ja loput kaasun atomit termisen pilven. Täten on ilmeistä, että fysikaalisessa todellisuudessa termisen pilven hiukkaset ja kondensaatin hiukkaset ovat korreloituneet,

terminen pilvi ei ole korreloitumaton lämpökylpy eivätkä sen muodostavat hiukkaset ole vapaita vaan loukussa. Koska termisessä pilvessä on vain vaatimaton määrä hiukkasia eikä kondensaatin ulkopuolisia moodeja ole läheskään (aidosti) ääretöntä määrää, summan approksimoiminen integraalilla korrelaatiofunktiota laskettaessa on todellista liioittelua. Oletus, että alussa kondensaatti ja terminen pilvi ovat korreloitumattomia, tarvitaan siihen, että jäljen laskeminen ympäristön yli on mahdollista. Erikoisesti korreloituneet ympäristöt, loukut ja äärellinen määrä kondensaatin ulkopuolisia moodeja ovat saavutettavissa olevia, fysikaalisempia kuvauksia, kuten myös ei-tasaisen – ehkä gaussisen tai lorenzisen – kytkentäprofiilin oletaminen molekyylikondensaatin ja termisen pilven välille. Markovin approksimaatiota käytetään usein fysikaalisessa mallinnuksessa, ja se on riittävän pätevä mallissani, kun rajoitutaan approksimaation sallimaan parametriavaruuteen. Täten sen käyttö ei tee mallista kovinkaan paljon epäfysikaalisempaa, mutta se rajoittaa tarkastelun todella pieneen parametriavaruuteen. Ei-markovisella mallilla voisi löytyä huomattavasti enemmän makroskooppista superpositiota suosiva parametrialue.

Mitä tästä voi oppia? Ainakin sen, että roistodekoherenssi on merkittävä dekoherenssin lähde Bose-kondensaateissa, joten tutkittaessa koherenssi-ilmiötä (kondensaateissa) sitä ei kannata jättää täysin huomiotta, vaikka sen mallintaminen ei aivan yksinkertaista olekaan. Lisäksi sen, että dekoherenssin voimakkuutta tarkasteltaessa kannattaa suhteuttaa dekoherenssin aikaskaala dominoivimman vuorovaikutuksen aikaskaalaan. Esittämäni parametri ξ_d on tässä käytännöllinen.

Luku 5

Yleistä koherenssiteoriaa

Koherenssia on yleensä käsitelty kvalitatiivisesti, ja koherenssi ymmärretään fenomenologisten apukäsitteiden, kuten dekoherenssiaika tai koherenssipituus, kautta.¹ Varsinaisesti koherenssin käsittely on epämääräistä – vaikuttaa siltä, että ei tarkalleen ottaen tiedetä, mitä koherenssi on tai kuinka sitä voitaisiin kvantifioida yksikäsitteisesti. Ei myöskään tunnu olevan käsitystä siitä, onko koherenssi suure vai ei. Syytä tähän epämääräisyyteen ei oikeastaan ole, sillä olemassa olevalla matemaattis-loogisella koneistolla ja fysiikan tiedoilla voidaan saada systemaattisempi ja aksiomaattisempi ote koherenssista. Hyvänä lähtökohtana voidaan pitää kvantitatiivisen ongelman perusprobleemaa ”kuinka paljon koherenssia on tutkittavassa systeemissä”. Tähän kysymykseen on oltava olemassa objektiivinen vastaus, sillä, kuten luvussa 2.1 todettiin, fysikaalinen todellisuus on ristiriidaton.

Tieteellisessä sanakirjassa koherenssi määritellään *kahden tai useamman aallon vaiheiden välisen korrelaation olemassaoloksi siten, että interferenssi on niiden välillä mahdollista, tai korrelaation olemassaoloksi yksittäisen aallon osien vaiheiden välillä*² ja ominaisuudeksi *liikkua yhtenevästi*³ [38]: Coherence. Aalloissa olevan koherenssin määrä riippuu siitä, kuinka korreloituneita ne ovat – kuinka lähellä toisiaan aallonpituudet, vaiheet ja amplitudit ovat. Täten koherenssi voidaan yleisesti määritellä *aallonkaltaisten entiteettien korrelaatioksi* (määritelmä 25)⁴, joka mahdol-

¹Ajantasaisen käsityksen koherenssin ymmärtämisen tilanteesta ja sen hahmottamisesta fenomenologisten käsitteiden kautta saa tutustumalla esimerkiksi viitteeseen [163].

²The existence of a correlation between the phases of two or more waves, so that interference effects may be produced between them, or of a correlation between the phases of part of a single wave.

³property of moving in unison

⁴Numeroidut määritelmät viittaavat luvussa 2.3 esiteltyihin määritelmiin.

listaa interferenssin. Kvanttifysiikassa objekteja kuvataan käyttäen aalto-funktioita tai tilavektoreita, jotka ovat ”aallonkaltaisia entiteettejä”. Näin ollen kvanttikoherenssi voidaan ymmärtää *kvanttikorrelaatioiden voimakkuuden mitaksi* (määritelmä 26), ja kvanttikoherenssi-ilmiöt ovat sellaisia, joita ei voida selittää käyttämällä klassisia korrelaatioita. Todistettavasti lomittuminen ja superpositiotilat voivat tuottaa havaittavissa olevia ei-klassisia korrelaatioita [51]. Tiheysmatriisiformalismissa kvanttikorrelaatioiden tunnusmerkkinä ovat tiheysmatriisin lävistäjän ulkopuoliset elementit. (Yleisesti tässä kirjassa viitataan termillä ”koherenssi” kvanttikoherenssiin, ellei asiayhteydessä toisin mainita.)

Koherenssin kvantifioimisen perusprobleema kvanttifysiikassa liittyy olennaisesti systeemin tiheysmatriisiin, sillä tiheysmatriisi sisältää täydellimmän mahdollisen informaation systeemin tilasta. Ajatellaan suljetun systeemin tiheysmatriisia ρ_A , joka on ilmaistu kantavektorijoukon $A = \{|\alpha_i\rangle\}$, $i = 1 \dots N$ avulla. Tämä kantavektorijoukko virittää N -ulotteisen Hilbertin avaruuden H , joka siis muodostaa rajat suljetulle esimerkkisysteemille. Täysin yhtenevä kuvaus esimerkkisysteemistä voidaan antaa mielivaltaisesti valitun täydellisen kantavektorijoukon $B = \{|\beta_i\rangle\}$ avulla, mikäli tämä kantavektorijoukko virittää saman Hilbertin avaruuden H . Valitun kantavektorijoukon ei pitäisi millään tavoin vaikuttaa suljetun systeemin (fysikaalisiin) ominaisuuksiin tai dynamiikkaan, koska muuten fysikaalinen todellisuus olisi ristiriitainen ja sisältäisi inhottavia todellisia paradokseja – muistutan mieliin monihistoriatulkinnan yhteydessä esitellyt vaaleanpunaiset stratosfäärissä liihottelevat lihansyöjävalaat (katso luku 4.1).

Usein käytetty dekoherenssin (ja samalla implisiittisesti koherenssin) määritelmä lähtee tiheysmatriisin ei-diagonaalielementtien puoliintumisesta [104, 105, 164] ja tätä kautta määritelmästä dekoherenssiajasta τ_d . Termi ”kvanttikoherenssi” viittaa yleensä juuri näihin tiheysmatriisin ei-diagonaalielementteihin. Ajatellaan, että termi ”koherenssi” viittaisi kannassa A ilmaistun tiheysmatriisin ρ_A ei-diagonaalielementteihin. Soveltuvalla unitaarisella muunnoksella mikä tahansa (äärellinen) tiheysmatriisi voidaan diagonalisoida, ja olkoon vaikkapa kanta B se kanta, jonka tiheysmatriisi ρ_B on diagonalisoitu. Minkä takia kanta A olisi ”parempi” systeemin kuvaamiseen kuin kanta B ? Tämä on yleisesti tunnettu ongelma dekoherenssitutkimuksessa (variantti luvussa 4.1 esitellystä etuoikeutetun kannan ongelmasta), ja sen ratkaisuksi on esitetty käsitettä *mittalaitekanta*⁵. Mittalaitekanta on määritelty siten, että se on kanta, jossa systeemin dynamiikka diagonalisoi (reduoidun) tiheysmatriisin [104, 105, 165, 166].

⁵pointer basis

Mutta mittalaitetekanta on järkevä käsite vain redusoiduille tiheysmatriiseille – vaikkakaan se ei periaatteessa edes tällöin ratkaise etuoikeutetun kannan ongelmaa, eli koherenssin arvo edelleen riippuisi siitä kannasta, missä systeemiä tarkastellaan ja muuttuisi kantaa vaihdettaessa. Ja toisaalta olisi omituista, mikäli koherenssin *nykyinen* määrä tietyssä kvanttimekaanisessa systeemissä riippuisi systeemin mahdollisesta *tulevasta* dynamiikasta.

Edellä esitellyn problematisoinnin ja päättelyn perusteella *koherenssi* tulee määritellä siten, että sen määrä ei riipu valitusta kantavektori-joukosta. Täten suljetun systeemin koherenssin täytyy olla säilyvä suure. Tähän tulokseen voi päätyä myös Noetherin periaatteen (määritelmä 13) kautta – koherenssin säilymlaki on seuraus tietystä systeemissä vallitsevasta symmetriasta. Paras ”arvaus” kyseiseksi symmetriaksi on *tiheysmatriisin invarianssi kantavektorien valinnan suhteen*. Järkevän koherenssin määritelmän tulee toteuttaa ainakin nämä vaatimukset.

Käyttämäni koherenssin määritelmä analyyseineen on esitelty artikkeleissa IV ja [2]. Tiheysmatriisin ρ koherenssin Ξ kvantitatiivinen muoto voidaan johtaa käyttäen seuraavaa päättelyä: Täysin koherentin N :n mahdollisen tilan kvanttisysteemin tiheysmatriisi kannassa $A = \{|\alpha_i\rangle\}$, $i = 1 \dots N$ on

$$\rho_A = \begin{pmatrix} \frac{1}{N} & \frac{1}{N} & \cdots & \frac{1}{N} \\ \frac{1}{N} & \frac{1}{N} & \cdots & \frac{1}{N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{N} & \frac{1}{N} & \cdots & \frac{1}{N} \end{pmatrix}. \quad (5.1)$$

Kyseisellä tiheysmatriisilla on kuvaus

$$\rho_B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

ominaisarvokannassa $B = \{|\beta_i\rangle\}$, joka on aina diagonaalinen. Kantojen välillä on unitaarinen muunnos U siten, että $\rho_B = U\rho_A U^{-1}$. Aikaisemman päättelyn perusteella molempien tiheysmatriisien tulee sisältää yhtä paljon koherenssia. Lisäksi koska kvanttikorrelaatioita ei voida selittää klasisisilla korrelaatioilla, niiden pitäisi olla mitattavia ainankin idealistisessa mielessä. Täysin klassinen tiheysmatriisi

$$\rho_C = \begin{pmatrix} \frac{1}{N} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{N} \end{pmatrix} = \mathbb{1}_{N \times N} \frac{1}{N} \quad (5.3)$$

on diagonaalinen kaikissa kannoissa.

Tutkitaan seuraavaa mittaustapahtumaa: Observaabeli O voidaan mitata missä tahansa kannassa. Todennäköisyys havaita asiantila $|O\rangle$ on

$$\text{Prob}(\rho, O) = \text{Tr}(\rho O) = \text{Tr}(\rho|O\rangle\langle O|). \quad (5.4)$$

Mitattaessa tiheysmatriisia ρ_A todennäköisyys $\text{Prob}(\rho_A, O)$ saa maksimiarvon, joss $|O\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}(1 \cdots 1)_A^T$, jolloin $\text{Prob}(\rho_A, O) = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \rho_{i,j} = 1$. Klassiselle tiheysmatriisille ρ_C saman mittauksen sama mittaustulos saadaan todennäköisyydellä $\text{Prob}(\rho_C, O) = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \rho_{i,j} = \frac{1}{N}$. Huomataan, että maksimaaliset kvanttikorrelaatiot saavat aikaan tekijän $1 - N^{-1}$ lisäyksen mittaustuloksen todennäköisyyteen. Mikäli samaa mittausta oltaisiin tekemässä ominaisarvokannassa, mitattava tila olisi $|O'\rangle = U|O\rangle = (1 \ 0 \cdots 0)_B^T$. Ominaisarvokannan käyttökelpoisuuden huomaa siitä, että suurin ominaisarvo λ_{max} on todennäköisimmän mittaustuloksen todennäköisyys, kun mittauskanta valitaan siten, että saadaan suurin mahdollinen todennäköisyys. Näin ollen määrittelen tiheysmatriisin ρ koherenssin

$$\Xi(\rho) = \frac{N}{N-1} \left(\lambda_{max} - \frac{1}{N} \right), \quad (5.5)$$

missä N on tiheysmatriisin ρ dimensio. Klassista todennäköisyyttä vastaavan termin $1/N$ vähentäminen on taustakorjaus, joka määrittää pienimmän koherenssin nollassi. Kerroin $N/(N-1)$ normalisoi suurimman koherenssin arvoksi 1 – tämä siitä syystä, että puhtaan tilan koherenssi on sama kuin systeemin todennäköisyys olla kyseisessä puhtaassa tilassa. Voidaan helposti todentaa, että kaavan (5.5) määrittelemä koherenssi on valitusta kantavektorijoukosta riippumaton, koska se riippuu vain tiheysmatriisin ρ dimensiosta N ja sen suurimmasta ominaisarvosta λ_{max} . Entropia (von Neumannin statistinen entropia) noudattaa samoja yleisiä periaatteita kuin koherenssi. Dekoherenssin määrittelyminen entropian kautta on kuitenkin hankalaa. Entropiaa käsitellään luvussa 5.2.

5.1 Koherenssin dynamiikasta

Koherenssin dynaamisen käytöksen peruseriaatteista saa hyvän käsityksen ihmettelemällä seuraavia ajatuskokeita.

Ensimmäisessä ajatuskokeessa tutkitaan klassisen fysiikan lakien mukaista systeemiä, joka koostuu vaikkapa 10^9 kaappikellosta, jotka eivät vuorovaikuta keskenään. Kaappikellot ovat toistensa kanssa samanlaisia lukuun ottamatta sellaista pientä seikkaa, että niiden heilureiden periodit

ovat heilureiden satunnaisista efektiivisistä pituuksista johtuen satunnaisia. Kaappikellosysteemi aloittaa dynaamisen kehityksensä hetkellä t_0 alkutilasta, jossa kaikkien kaappikellojen heilureiden vaiheet ovat samat, eli heilurit ovat ratansa matalimmassa pisteessä ja heilahtamassa vasemmalle. Klassisesti ajateltuna tämä alkutila on erittäin koherentti kaappikellojen heilureiden vaiheen suhteen. Lyhyen ajan kuluttua, hetkellä t_1 , heilureiden välinen vaihekoherenssi on tyystin kadonnut. Kuitenkin pitkän ajan kuluttua, hetkellä t_P , vaihekoherenssi on palannut: kaikki heilurit ovat jälleen ratansa matalimmassa pisteessä ja heilahtamassa vasemmalle. Näin tapahtuu, koska heilureita on äärellinen määrä ja heilureilla on muuttumattomat heilahdusajat. Tämä paluu-aika t_P tunnetaan nimellä *Poincarén paluu-aika*, ja se on (minkä tahansa) äärellisen systeemin pisin aikaskaala. Äärellisen systeemin tila palaa mielivaltaisen läheille alkutilaansa (tai mitä tahansa muuta tilaa) mielivaltaisen monta kertaa, mikäli aikaa on hyvin paljon (äärettömästi) [147, 167].

Seuraavassa esimerkissä tarkasteltavana on yksinkertainen kvanttifyysikaalinen systeemi: Gaussinen aaltopaketti on vangittu anharmoniseen potentiaaliin $U(r) = \frac{1}{2}m\omega^2(r - r_0)^2 + \eta(r - r_0)^3$, jonka anharmonisuus η on pieni. Aluksi aaltopaketti oskilloi potentiaalissa säilyttäen muotonsa, eli käyttäytyy koherentisti (katso esim. referenssi [168]: s. 376-377, ja siitä soveltuvat viittaukset). Kohtuullisen ajan kuluttua se on menettänyt muotonsa ja olemuksensa, eli menettänyt koherenssinsä. Erittäin pitkän ajan kuluttua aaltopaketti kuitenkin muodostuu uudelleen alkutilan gaus-sisen kaltaiseksi, mikäli systeemi koostuu äärellisestä määrästä sidottuja tiloja. Hyvä indikaattori koherenssin käytökselle on paikan odotusarvon aikakehitys $\langle x(t) \rangle$. Alun voimakkaat oskillaatiot odotusarvossa vaimenevat pikkuhiljaa, ja lopulta tuloksena on fluktuoiva keskiarvo, joka pitkän ajan kuluttua muuttuu taas voimakkaiksi oskillaatioiksi.

Kolmas esimerkkinä on toisen kvantituksen mukaisessa fotonikentässä olevat vuorovaikuttavat bosonit (tai yleisesti ottaen bosonit, jotka törmäilevät toisenlaisista bosoneista koostuvan ympäristön kanssa). Olemme kiinnostuneita vain ”systeemistä” (mielenkiintoisista bosoneista), joten tehdään efektiivinen teoria, joka redusoi ympäristön pois täydellisen kuvauksen tiheysmatriisista, minkä tuloksena saadaan systeemin tiheysmatriisin aikakehityksen mestariyhtälö. Tämä oppikirjaesimerkki löytyy vaikkapa seuraavista kirjoista [144]: luku 15; [145]: luku 6.1; [146]: luku 1; [147]: luku 3.3. Analyysin alussa oletetaan ympäristössä olevan suuri (äärellinen) määrä vapausasteita, mutta päästäessä päättelyketjun siihen vaiheeseen, jossa lasketaan ympäristön vaikutukselle korrelaatiofunktiot, hiukkasluku oletetaan äärettömäksi (koska ympäristö on hyvin suuri systeemiin verrattuna), minkä perusteella summat muutetaan lasketta-

viksi integraaleiksi. Tämän ajatuskokeen mukaiset ympäristöt ovat hyväksytyjä dekoherenssin lähteitä kvanttifysikaalisten systeemien teoreettisessa tarkastelussa (katso esim. luku 4.3 ja artikkeli III), ja systeemin koherenssin monotoninen väheneminen voidaan kvantifioida käyttämällä dekoherenssiaikaa.

Kaikissa kolmessa esimerkissä *koherenssin* käsite (klassinen tai kvantti) vaikuttaa keskeiseltä ja sovelialta kuvaamaan systeemin käytöstä, mutta käsitettä *dekoherenssi* käytetään yleensä vain kolmannen esimerkin kaltaisten tilanteiden yhteydessä, sillä esimerkissä kuvataan koherenssin pysyvää poistumista systeemistä. Kahden ensimmäisen ja kolmannen esimerkin kuvaamien systeemien välinen fundamentaali ero on se, että viimeisen esimerkin systeemi on sekä *avoin* että *ääretön* systeemi. Vain avoimissa ja äärettömissä systeemeissä koherenssin pysyvä systeemistä poistuminen on mahdollista – avoimuutta tarvitaan, jotta on olemassa ympäristö, joka toimii systeemin koherenssin kaatopaikkana, ja äärettömyyttä tarvitaan, sillä äärellisestä ympäristöstä kaikki koherenssi löytää loppujen lopuksi tiensä takaisin systeemiin, koska äärelliselle systeemille Poincarén paluuaika on äärellinen. Tästä syystä monissa avoimien ja äärettömien kvanttisysteemien teoreettisissa tutkimuksissa havaittu koherenssin pysyvä katoaminen systeemistä onkin seuraus käytetystä approksimaatiosta, missä oletetaan äärettömyys, jotta voidaan laskea helpompia integraaleja vaikeampien (ehkä mahdottomien) summien sijasta. Tämä äärettömyyden olettava approksimaatio muuttaa systeemin fundamentaalia käytöstä – sen seurauksena systeemin koherenssin aikakehitys muuttuu monotoniseksi vähenemiseksi (ilman paluita). Mikäli ongelmaa tutkittaisiin huolellisemmin ilman oletusta fotonikentän jatkuvasta energiaspektristä, Poincarén paluut tapahtuisivat äärellisessä ajassa. Irreversiibeli dynamiikka on äärettömyyden oletuksen seuraus. Yleensä fundamentaalilla tasolla tehdyt approksimaatiot eivät lisää mallin tarkkuutta tai sovellusalueita.

Kaappikelloesimerkkiä voidaan käyttää esittelemään äärellisen ja äärettömän suljetun systeemin välisiä eroja. Mikäli kaappikellojen määrää lisätään, Poincarén paluuaika joko kasvaa tai pysyy samana. Paluuaika ei kasva, mikäli lisättävän kellon periodi kerrottuna jollain kokonaisluvulla on olemassa olevan kaappikellosysteemin paluuaika. Jos periodit ovat satunnaisia reaalitylukuja (ei haittaa, vaikka luvut ovat pieneltä suljetulta väliltä), niin äärettömälle määrälle kaappikelloja Poincarén paluuaika on ääretön – systeemi ei voi palata alkutilaansa. Vaikka systeemi on suljettu, vaihekoherenssin väheneminen tapahtuu monotonisesti. Tarkasteltaessa toista esimerkkiä äärettömäksi muutettuna tämä piirros ilmenee dramaattisempana: koska systeemi on suljettu, koherenssi ei pääse pois

systemistä, eli systeemin yhteenlaskettu koherenssi säilyy vakiona. Äärettömyyden seurauksena Poincarén paluuta ei tapahdu, koska alkutilassa erittäin kapealle alueelle keskittynyt pieni äärellinen määrä koherenssia levittäytyy systeemin aikakehityksen tuloksena tasaisesti infinitesimaalisen pieniksi korrelaatioiksi koko äärettömän tilamäärän välille eikä koskaan löydä tietään takaisin.

Ajatuskokeita ja fysikaalisen todellisuuden malleja tehtäessä on tärkeää ymmärtää, mitkä ovat fysikaalisen todellisuuden fundamentaaleja piirteitä. Koherenssin dynamiikkaa mietittäessä olennaisia kysymyksiä ovat: onko fysikaalinen todellisuus ääretön vai äärellinen, ja onko fysikaalinen todellisuus avoin vai suljettu. Fysikaalinen todellisuus on määritelmän 4 mukaan suljettu. Lisäksi on perusteltua olettaa, että äärettömyys on vain approksimaatio – matemaattinen temppu, jonka turhautunut ihmisäly on keksinyt kyetäkseen selviytymään erittäin suuriin lukuihin liittyvistä ongelmista. Fysikaalisesti tarkasteltuna on järkevämpää olettaa, että äärettömän suuria tai pieniä asioita ei ole. Ainakin nykyisten fysiikan teorioiden mukaan pituuskaala on alhaalta rajoitettu Planckin pituuteen. Energiaspektrit ovat diskreettejä ja äärellisiä⁶. Esimerkiksi vetyatomilla on matemaattisesti ajateltuna ääretön energiaspektri, mutta fysikaalisesti ajateltuna energiatasojen määrä on Heisenbergin epämääräisyysperiaatteen takia äärellinen; kahden matemaattisesti vierekkäisen energiataason energiaero ei fysikaalisesti voi olla pienempi kuin energian epämääräisyys. Toisen kvantituksen myötä fysikaalisessa todellisuudessa olevien kenttien energiaspektritkään eivät ole jatkuvia. Edellä esitettyjä esimerkkejä kannattaa ajatella Bekensteinin reunaehdon [48, 49, 50] kannalta, jonka mukaan äärellinen tilavuus ei voi sisältää äärettömästi informaatiota. Seth Lloydin [169] mukaan maailmankaikkeus on suorittanut olemassaolonsa aikana 10^{120} loogista perusoperaatiota⁷ 10^{120} bitille, joissa ovat mukana myös gravitaation vapausasteet. Tämä tulos voidaan tulkita siten, että kvanttietokone tarvitsee sen verran kapasiteettia kyetäkseen simuloimaan koko maailmankaikkeuden. Huomionarvoista on, että tarvittava kapasiteetti on äärellinen. Enemmänkin argumentteja fysikaalisen todellisuuden äärellisyyden puolesta on⁸, mutta niitä ei tämän tutkimuksen

⁶Jatkuva (ääretön) energiaspektri tarkoittaisi sitä, että äärellisessä tilavuudessa olisi ääretön määrä energiaa ja täten informaatiota, mikä taas on Bekensteinin reunaehdon vastaista.

⁷elementary logic operations

⁸Muun muassa Casimirin efekti [170, 171], jonka mukaan virtuaaliset hiukkaset aiheuttavat ”paineen”. Rajoitettuun tilaan on mahdollista syntyä vain sellaisia virtuaalisia hiukkasia, joiden aineallonpituuden monikerta on rajojen etäisyys toisistaan ja aallonpituus on korkeintaan tämä etäisyys. Tästä syystä kahden samansuuntaisen metallilevyn välille syntyy havaittava vetovoima – metallilevyjen ulkopuolella on enem-

kannalta ole tarpeen käydä läpi tämän laajemmin. Keskustelu fysikaalisen todellisuuden äärellisyydestä tai äärettömyydestä jatkukoon, mutta pidän uskottavampana äärellistä vaihtoehtoa ja sitä, että äärettömyys on vain matemaattinen työkalu, jonka avulla monet laskutekniset ongelmat helpottuvat huomattavasti.

Vaikkakin suljetut ja äärelliset systeemit eroavat fundamentaalilla tavalla avoimista ja äärettömistä systeemeistä, käsite *dekoherenssi* vaikuttaa täsmälliseltä kuvaukselta kaikkien edellä esiteltyjen kolmen esimerkin kohdalla. Yleisesti ottaen äärettömissä systeemeissä dekoherenssi (tiheysmatriisiformalismissa) ajatellaan *reduoidun tiheysmatriisin ei-diagonaalielementtien vähenemisenä*. Olen vakuuttunut siitä, että tämä ajatus on yhtä pätevä *myös ennen kuin* systeemiä on approksimoitu millään tavalla, esimerkiksi muuttamalla summat integraaleiksi olettamalla äärettömyys. Äärettömyys on ainoastaan poistanut mahdollisuuden rekoherenssiin. Yleinen tapa ajatella, että dekoherenssia ei tapahdu, mikäli systeemillä on mahdollisuus rekoherenssiin (esim. [164, 172]), tuntuu omituiselta.

Esittelemäni analyysin perusteella dekoherenssin määritelmä (määritelmä 27), joka viittaa *dynaamiseen ilmiöön, jossa koherenssi vähenee*, on pätevä. Sana ”dekoherenssi” ei millään tavalla edes ehdota, että tämän koherenssin vähenemisen tulisi olla pysyvää. Äärelliset systeemit voivat kokea rekoherenssin (määritelmä 28), joka tarkoittaa *dynaamista ilmiötä, joka lisää koherenssia*. Suosittelen varovaisuutta fysikaalista todellisuutta koskevien metafyyssisten väitteiden kanssa – eräät teorian ennustamat seuraamuslauseet (kuten koherenssin monotoninen väheneminen ja entropian monotoninen kasvu) eivät välttämättä kuvaakaan mallinnettavaa fysikaalista todellisuutta vaan ainoastaan fysikaalisen todellisuuden mallin tekemisessä käytettyjen approksimaatioiden ominaisuuksia.

Yleisessä tapauksessa täsmällisen kuvauksen tietyn alisysteemin $\rho_s(t)$ koherenssin dynamiikasta saa laskemalla koherenssifunktion $\Xi(\rho_s(t))$.

män vapausasteita syntyä virtuaalisia hiukkasia. Mikäli fysikaalinen todellisuus olisi ääretön, vapausasteita olisi ääretön määrä, jolloin metallilevyjen välille syntyvä voima olisi ääretön. Tosin – kuten erittäin monissa kvanttkenttiin liittyvissä äärettömyysongelmissa – tässäkin tapauksessa teoria ja laskut tehdään olettamalla äärettömyys ja tämän jälkeen ”puhumalla” äärettömyyden tuottamat todellisuuden vastaiset efektit pois käyttäen jotakin soveliaasta renormalisaatiota (esimerkiksi ζ -funktio renormalisaatiota) tai lisäämällä syntyviin integraaleihin ”konvergenssitekijä”, joka yleensä vähenee eksponentiaalisesti äärettömyyttä lähestyttäessä.

5.2 Entropia

Koherenssiin liittyvät ongelmat ja epäselvyydet ovat pääasiassa samoja kuin aikoinaan entropiaan liittyneet – suljetut ja äärelliset systeemit (maailmankaikkeuden skaalassa) aiheuttivat ongelmia jo paljon ennen kvanttifysiikkaa. 1800-luvun loppupuolella ”kosmologisten” ongelmien keskiössä oli entropia. Entropialla ja koherenssilla on paljon yhteistä, joten tämä luku alalukuineen tarjoaa lyhyen katsauksen entropian olemukseen ja sen herättämiin ongelmiin sekä siihen, kuinka entropia ja koherenssi liittyvät toisiinsa ja mitä mahdollista opittavaa muinaisista entropian ongelman ratkaisuyrityksistä on koherenssin tapauksessa. Entropiasta enemmän kiinnostuneen lukijan kannattaa tutustua lähdeviitteisiin [35, 45, 173, 174, 175, 176] ja niissä esitettyihin lähdeviitteisiin. Tärkeimmät alkuperäisartikkelit löytyvät englanniksi käännettynä lähteestä [177].

5.2.1 Lyhyt johdanto entropian olemukseen

Entropia on ekstensiivinen suure, joka liittyy mahdollisten tilojen määrään ja niiden todennäköisyyksiin⁹. Yleisesti entropian ajatellaan olevan mitta kaaokselle ja epäjärjestykselle. Termodynaamisesti entropia määritellään *ekstensiiviseksi tilamuuttujaksi, joka esiintyy, kun epäeksakti lämpö määrädifferentiaali muunnetaan eksaktiksi differentiaaliksi käyttäen lämpötilaa integroivana tekijänä*. Ekstensiivinen tarkoittaa, että mikäli systeemin A entropia on S_A ja systeemin B entropia on S_B , niin yhdistetyn systeemin $A + B$ entropia on $S_{A+B} = S_A + S_B$. Usein entropia ajatellaan mitaksi, joka kuvaa kuinka kaukana systeemi on todennäköisimmästä konfiguraatiostaan, kun todennäköisin konfiguraatio antaa entropian maksimiarvon. Esimerkiksi tästä kelvannee kolikonheitto: kun kolikkoa heitetään 10 kertaa, on huomattavasti todennäköisempää saada 5 kruunaa ja 5 klaavaa kuin 9 kruunaa ja 1 klaava. Ensin mainitun tuloksen entropia on suurempi. Statistisessa mekaniikassa entropia ymmärretään ”suureeksi, joka ilmoittaa, kuinka monessa eri mikrotilassa systeemi voi olla”¹⁰.

On olemassa eri tyyppisiä entropioita. Boltzmannin entropia riippuu pelkästään mahdollisten tilojen määrästä ja on muodoltaan $S_B = k_B \ln W$, missä k_B on Boltzmannin vakio ja W toisistaan riippumattomien mahdol-

⁹”extensive measure depending on the number of possible (micro)states and corresponding probabilities” (artikkeli IV), *mahdollisten tilojen määrän ja niitä vastaavien todennäköisyyksien ekstensiivinen mitta* (määritelmä 29)

¹⁰”a measure of the number of microstates a system could assume” [178]

listen tilojen lukumäärä. Boltzmannin entropia on siis se entropia, jota statistisessa termodynamiikassa käytetty määritelmä vastaa. Kvanttifiysiikassa W on systeemin Hilbertin avaruuden dimensio. Mahdollisten tilojen todennäköisyyksillä painotettu entropia on Gibbsin entropia $S_G = -\sum_i^D p_i \ln p_i$, missä p_i on mahdollisen tilan i todennäköisyys. Gibbsin ja Boltzmannin entropiat ovat yhtenevät, mikäli Gibbsin entropian painot ovat $p_i \sim D^{-1}$, jolloin saadaan Gibbsin entropian maksimi. Usein Gibbsin entropiaa kutsutaan *statistiseksi entropiaksi*, kuten myös sen kvanttifyysikaalista vastinetta, *von Neumannin entropiaa* ($S_N = -\text{Tr} \rho \ln \rho$, missä ρ on tiheysmatriisi). Systemillä, jonka von Neumannin entropia on maksimissaan, ei ole kvanttikorrelaatioita. Kuten määrittelemäni koherenssi, myös von Neumannin entropia on riippumaton kvanttifyysikaalisen systeemin kuvaamiseen käytetystä kantavektorijoukosta.

Informaatio on suure, joka määritellään entropian avulla.

5.2.2 Entropian ongelman lyhyt historia

Ajatellaan, että maailmankaikkeus on suljettu äärellinen säiliö, joka sisältää äärellisen määrän ”biljardipalloja”, ja että tässä maailmankaikkeudessa fundamentaalien fysiikan teoria on Newtonin mekaniikka. Tämä on perusasetelma vuosisadan takaiseen entropiakeskusteluun. Silloiseen fyysikantuntemukseen perustuvia premissejä:

1. Termodynamiikan toinen pääsääntö väittää, että suljetun systeemin entropia ei koskaan voi vähetä.
2. Newtonin mekaniikka pätee (ja on reversiibeli teoria).

Premissien 1 ja 2 välille voidaan johtaa ristiriita esimerkiksi preparoimalla maailmankaikkeuden alkutila sellaiseksi, että säiliö jaetaan kuvitteellisesti kahteen yhtä suureen puolikkaaseen ja biljardipallot ovat aluksi vain toisella puolella. Kun aikakehitys alkaa, biljardipallot pääsevät leviämään vapaasti koko tilavuuteen, ja tässä prosessissa entropia kasvaa. Entropian kasvu on merkki irreversiibelistä prosessista. Pohjimmiltaan reversiibeli teoria on tuottanut irreversiibelin tuloksen. Mielenkiintoista. Tilanteen tekee vielä mielenkiintoisemmaksi se, että ihmisten arkikokemuksen perusteella tietyt asiat ovat irreversiibeilejä: ihminen vanhenee, tee jäähtyy kupissa, ikkunalasit rikkoutuvat jne. – näiden prosessien reversiibelin vastineen havaitseminen herättäisi suunnatonta ihmetystä. Tätä aihetta on käsitelty paljon entropiaa ja fysiikan filosofiaa käsittelevässä kirjallisuudessa (esimerkiksi viitteet [35, 45, 173, 174, 175, 176, 177]).

Aletaan purkaa ongelmaa premisseistä lähtien: koska Newtonin mekaniikkaa pidetään tässä esimerkissä fundamentaalina teoriana, tutkitaan aluksi premissin 1 taustaoletuksia. Premissi 1 on Boltzmannin H-teoreeman suora tulos, eli voidaan ajatella premissin 1 sanovan, että ”Boltzmannin H-teoreeman mukaan entropian aikakehitys on irreversibelä”. Boltzmannin H-teoreeman johtamisessa oletetaan *molekulaarinen kaaos*¹¹ (katso vaikkapa [35, 45, 173, 175]). Oletus tarkoittaa, että hiukkasen törmäystodennäköisyys on suoraan verrannollinen hiukkastiheyksien tulon faasiavaruuselementissä. Yleisesti ottaen molekulaarisen kaaoksen oletus on melko pätevä termodynaamisella rajalla (kun hiukkasluku ja tilavuus lähestyvät ääretöntä tiheyden ollessa äärellinen), mutta oletuksen myötä katoaa paljon informaatiota systeemin dynamiikasta. Tämän informaation katoamisen myötä saatavista liikeyhtälöistä tulee irreversibelä ajan suhteen. Boltzmann itsekin huomasi molekulaarisen kaaoksen oletukseen liittyvät ongelmat, hylkäsi sen fundamentaalina periaatteena ja teki kaksi huomiota liittyen entropiaan [179]:

1. Termodynamiikan toinen pääsääntö (entropia ei voi vähetä) ei ole lainkaltainen teoria, vaan ainoastaan statistinen teoria.
2. ”Monotoninen tasapainotilaa kohti eteneminen” -ajattelu pitäisi korvata ”pyrkimys säilyttää tasapainotila” -ajattelulla.

Korkeimman entropian tila on systeemin tasapainotila, eli dynamiikka pyrkii ajamaan systeemiä korkeamman entropian tilaan, ja mitä suurempi entropia, sitä enemmän systeemi pyrkii viettämään aikaa kyseisen tilan läheisyydessä. Äärellisissä systeemeissä entropia kuitenkin fluktuoi, mistä syystä entropia saattaakin (hetkellisesti) vähetä. Poincarén paluut ovat mahdollisia. Ainoa järkevä johtopäätös on, että termodynamiikan toinen pääsääntö ymmärrettäisiin vain statistiseksi laiksi eikä fundamentaaliksi fysikaalista todellisuutta koskevaksi periaatteeksi. Lämpötilan, paineen ja muiden (intensiivisten) tilamuuttujien termodynamiikka on *karkeistettu*¹² teoria. Tietysti karkeistuksen voi tehdä myös huonosti, ja molekulaarisen kaaoksen olettaminen on ehdottomasti väärä tapa, mikäli halutaan tarkastella suljetun (ja äärellisen) maailmankaikkeuden fundamentaalialia käytöstä ja tehdä siihen liittyviä metafysisiä väitteitä. Tämä ei tietenkään tarkoita sitä, että molekulaarisen kaaoksen oletus ei olisi hyvä joitain käytännön tarkoituksia varten.

¹¹Stosszahl Ansatz

¹²Karkeistus on metodi, jolla systeemin kuvaamiseen tarvittavien vapausasteiden määrää vähennetään (katso määritelmä 20).

Seuraavaksi havaittiin, että mikäli tarkastellaan koko suljettua systeemiä, niin sen (minkä tahansa suljetun systeemin) entropia onkin liikevakio!¹³ Tosin tämä ajatus on luonnollinen seuraus taustalla olevista reversiibeleistä fysiikan laeista, mutta ajatus tuntui olevan havaittujen luonnollisten prosessien etenemisen vastainen. Gibbs lähestyi aikoinaan tätä havaitun todellisuuden kanssa ristiriitaiselta vaikuttavaa ongelmaa ottamalla käyttöön *Gibbsin karkeistetun entropian*. Tässä tapauksessa karkeistus suoritetaan siten, että keskiarvotetaan vierekkäisiä mikrotiloja suuremmiksi tiloiksi, joiden erilliset entropiat lasketaan yhteen karkeistetuksi entropiaksi.¹⁴ Olennaista tälle karkeistukselle on, kuinka suuriksi tai pieniksi valitaan karkeistetun entropian laskemiseen käytettävät tilat. Asiaa on käsitelty yksityiskohtaisemmin esimerkiksi viitteissä [173, 174], ja [45]: s. 48-59. Karkeistettu entropia ei enää ole liikevakio, koska se ei sisällä kaikkia olemassa olevia eri tilojen välisiä korrelaatioita. Systeemin dynamiikka ajaa sitä kohti maksimiarvoa. Lisäksi flukтуаatiot ja paluut ovat äärellisissä systeemeissä mahdollisia.

Vaikka karkeistetun entropian ”keksiminen” pelasti ilmiöt (eli selitti, miksi vaikuttaa siltä, että entropia kasvaa, vaikka suljetun systeemin entropia ”oikeasti” on liikevakio), niin entropian ympärillä vellonutta filosofista keskustelua se ei lakkauttanut. Filosofinen tyytymättömyys kiteytyi pääosin kahdentyypisiin argumentteihin: ”mikä on ’oikea’ karkeistus kaikkien mahdollisten karkeistusten joukossa (eli kuinka systeemi pitäisi jakaa alisysteemeiksi)” ja ”mitä tarkoittaa, että karkeistettu entropia muuttuu ajassa, kun ’oikea’ entropia on liikevakio (suljetuissa systeemeissä)”.

5.2.3 Entropia ja koherenssi

Entropia ja koherenssi ovat molemmat tärkeitä käsitteitä, joiden avulla kvanttifysikaalisten systeemien ominaisuuksien ja dynamiikan hahmottaminen helpottuu. Alaluvussa 5.2.1 tuli selväksi entropian ekstensiivinen olemus. Koherenssi puolestaan on intensiivinen suure, joka käyttäytyy

¹³Kutsun suljetun systeemin täydellisestä kuvauksesta laskettua entropiaa idealistiseksi entropiaksi, jota merkitään S_{id} .

¹⁴Gibbs tosin laski infinitesimaalisen pienillä faasiavaruuselementeillä, ja karkeistus tapahtui siten, että valittiin pieni äärellisen kokoinen faasiavaruuselementti, jonka todennäköisyys laskettiin infinitesimaalisen pienistä faasiavaruuselementeistä painotettuna keskiarvona (integroimalla), minkä jälkeen äärellisten faasiavaruuselementtien (todennäköisyyksillä painotetut) entropiat laskettiin yhteen. Kuitenkaan äärettömyys ei ole välttämätön lähtökohta Gibbsin idean toimimiselle.

todennäköisyyden kaltaisesti¹⁵. Havainnollistan koherenssin ja entropian ominaisuuksia esimerkillä kahdesta identtisestä keskenään korreloitumattomasta spin 1/2 -systeemistä, joiden molempien tiheysmatriisi on

$$\rho_1 = \rho_2 = \rho_{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (5.6)$$

Molempien systeemien ominaisarvot ovat

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{4}. \quad (5.7)$$

Molempien systeemien koherenssi on

$$\Xi_{\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \quad (5.8)$$

ja entropia

$$S_{\frac{1}{2}} \simeq 0.56. \quad (5.9)$$

Yhdistetyn systeemin $\rho_{1+2} = \rho_1 \otimes \rho_2$ ominaisarvot ovat $\lambda = \frac{9}{16} \wedge \frac{3}{16} \wedge \frac{3}{16} \wedge \frac{1}{16}$, jolloin yhdistetyn systeemin entropia on $S_{1+2} \simeq 1.12$, ja hiukaskohtainen entropia on $S_{norm} \simeq 0.56$. Yhdistetyn systeemin koherenssiksi saadaan kuitenkin $\Xi_{1+2} = \frac{5}{12}$. Huomataan, että mikäli rakennetaan isompaa systeemiä korreloitumattomista alisysteemeistä, niin aikaansaadun isomman systeemin koherenssi on todennäköisesti melko pieni, sillä N :n korreloitumattoman systeemin yhteinen koherenssi on verrannollinen suurimpien ominaisarvojen tulon $\prod_l^N \lambda_{max,l}$.

Kuitenkaan edellä mainittu ”anomalia” koherenssin olemuksessa ei ole lainkaan yllättävä, sillä koherenssi on läheisessä suhteessa todennäköisyyksiin – erityisesti systeemin suurimpaan mahdolliseen todennäköisyyteen. Mikäli todennäköisyydellä $3/4$ on mahdollista saada mittaustulokseksi systeemin todennäköisin tila, niin tällöin todennäköisyys saada kahdesta samanlaisesta systeemistä molempien mittaustulokseksi suurimman todennäköisyyden tila on $(3/4)^2$. Tätä asiaa voi yrittää hahmottaa klassisella analogialla toisiinsa kytkemättömistä satunnaisesti valituista (ja satunnaisesti ajastetuista) kaappikelloista: mikä on todennäköisyys, että valokuvaa otettaessa kaikki kaappikellot näyttävät samaa aikaa ja heilurit ovat samassa vaiheessa? Koherenssi on suure, joka mittaa tätä korrelaatiota. Mikäli todennäköisyys on hyvin suuri, tällöin alkaa olla aiheellista

¹⁵Käsitettä *ei-ekstensiivinen entropia* (non-extensive entropy) on tutkittu statistisessa fysiikassa ja informaatioteoriassa. Aiheesta enemmän viitteissä [180, 181], ja niiden viitteissä.

olettaa, että kaappikelloja yhdistääkin jokin tekijä – esimerkiksi se, että sama henkilö on ajastanut ne.

Suljetussa systeemissä idealistinen koherenssi ja entropia ovat liikevakioita, jotka määrittävät systeemin dynamiikan rajoitteita¹⁶. Koherenssin avulla saadaan lisäinformaatiota esimerkiksi erilaisista kvanttifysikaalisista systeemeistä, joilla on sama entropia. Esimerkiksi ominaisarvot $\lambda \simeq 0.5 \wedge 0.32333 \wedge 0.125 \wedge 0.05167$ tuottavat saman entropian kuin ρ_{1+2} , mutta koherenssi muuttuu $\Xi = \frac{5}{12} \rightarrow \frac{1}{3}$. Kyseisenlaisista systeemeistä se, jolla on korkeampi koherenssi, on enemmän kvanttikorreloitunut, jolloin sille luonnollisesti on enemmän käyttöä esimerkiksi kvanttilaskennassa. Koherenssin kannalta ominaisarvot $\lambda = \frac{9}{16} \wedge \frac{7}{16}$ ovat yhtenevät systeemin ρ_{1+2} kanssa, mutta entropiat ovat eri: $S \simeq 1.12 \rightarrow 0.69$.

Entropia ei siis pelkästään kerro kaikkea kvanttifysikaalisesta systeemistä.

5.3 Idealistinen ja realistinen näkökulma

Seuraavaksi esittelen kaksi näkökulmaa kvanttisysteemin entropiaan ja koherenssiin. Määritellään systeemin ρ idealistiseksi entropiaksi $S_{id} = -\text{Tr}\rho \ln \rho$, idealistiseksi koherenssiksi $\Xi_{id} = \Xi(\rho)$, ja realistiseksi entropiaksi $S_{re} = -\sum_i \text{Tr}\rho_i \ln \rho_i$ ja realistiseksi koherenssiksi $\Xi_{re} = N^{-1} \sum_i \Xi(\rho_i)$, missä ρ_i on alisysteemin tiheysmatriisi ja N alisysteemien määrä. Kaikkien suljettujen systeemien idealistinen entropia S_{id} ja koherenssi Ξ_{id} ovat liikevakioita – niitä laskettaessa kaikki suljettuun systeemiin kuuluvat asiat on käsitelty kvanttifysiikkaa käyttäen, ja mikäli tarkastelun kohteena on fyysikaalinen todellisuus, tämä vaatii edelleen, että mittaukset, mittalaitteet ja jopa havaitsijat käsitellään kvanttifysiikkaa käyttäen. Mittaukset käsitellään mittalaitteiden ja mittauksen kohteiden välisinä vuorovaikutuksina, ja niin edelleen. Luonnollisesti tämän kaltainen fyysikaalisen todellisuuden käsittely on mahdollista vain ideaaliselle havaitsijalle, jota kutsun vaikkapa Älykkääksi Chinchillaksi. Älykäs Chinchilla ei vuorovaikuta fyysikaalisen todellisuuden kanssa (vaan on sen ”ulkopuolella”), ja arvattuaan oikein fyysikaalisen todellisuuden aaltofunktion ja aika-kehitysoperaattorin tutkii sen tilan aikakehitystä akateemisen esimerkin omaisesti mielessään (tai kynää ja paperia käyttäen).

Realistinen näkökulma kuvaa fyysikaalista todellisuutta siten kuin todelliset, fyysikaalisessa todellisuudessa olevat, havaitsijat sen havaitsevat. Nämä havaitsijat ovat täysin korreloituneita fyysikaalisen todellisuuden kanssa, eivätkä he voi kuin villeimmissä unissaan tavoittaa Älykkään

¹⁶constraints

Chinchillan näkökulmaa fysikaalisesta todellisuudesta – niin kuin itse-
 teen tässä kirjassa aina kun viitataan idealistisiin suureisiin. Mikäli Äly-
 käs Chinchilla haluaa tutkia akateemisen esimerkkinsä fysikaalista todel-
 lisuutta saadakse selville, kuinka fysikaalisessa todellisuudessa elävät
 reaaliset havaitsijat sen havaitsevat, hän karkeistaa täydellisen mallinsa
 selvittääkseen realistiset suureet. On itsestään selvää, että realistiset ja
 idealistiset suureet käyttäytyvät eri tavoin, mutta niiden välillä ei ole risti-
 riitaa. Mikäli karkeistus on tehty oikein (kannattaa muistaa, että Älykäs
 Chinchilla on sen verran älykäs, ettei tee koskaan virheitä, ja että hän
 on ratkaissut oikean karkeistuksen ongelman), hän saa tuloksena täysin
 tarkan jakauman niistä fysikaalisen todellisuuden eri mahdollisuuksista,
 joilla Todellinen Havaitsija voi fysikaalisen todellisuuden havaita. Kos-
 ka kvanttifysiikan mukaisessa todellisuudessa on aitoja todennäköisyysil-
 miöitä, Älykäs Chinchilla saa selville ”vain” kaikki mahdolliset mittaus-
 tulokset painotettuna niiden todennäköisyyksillä.

Sekä idealistiset että realistiset suureet kuvaavat samaa systeemiä,
 mutta erilaisista näkökulmista katsottuna. Entropiat ovat suhteessa toi-
 siinsa *keskinäisenä informaationa*¹⁷ $I = S_{re} - S_{id}$ tunnetun suureen kaut-
 ta. Keskinäinen informaatio ilmaisee (mielivaltaisesti valittujen) alisysteemien
 välisen korrelaation.¹⁸ Entropian ja koherenssin läheiset (ja monissa
 paikoissa symmetrisesti käyttäytyvät) suhteet viittaisivat siihen, että on
 myös olemassa suure $E = \Xi_{id} - \Xi_{re}$, joka siis kvantifioi *keskinäisen lomittu-*
tumisen eli sen, kuinka paljon alisysteemit ovat lomittuneet toisiinsa. Tä-
 mä esittämäni lomittumisen mitta soveltuu käytettäväksi kaikille kvant-
 tisysteemeille, joita voidaan kuvata tiheysmatriisilla (eli periaatteessa ai-
 van kaikille), mikä on huomattava parannus verrattuna olemassa oleviin
 kvantti-informaatioissa käytettäviin lomittuneisuuden hyödyllisyyden mit-
 toihin, joiden yksikäsittäinen sovellusalue rajoittuu kaksitilasysteemeihin.

Idealististen ja realististen suureiden avulla voidaan kategorisoida nel-
 jä fundamentaalisti erilaista fysikaalista systeemityyppiä. Avoimessa ja
 äärettömässä systeemissä (riittää, että ympäristö on ääretön) sekä idea-
 listiset että realistiset suureet S_{id} (Ξ_{id}) ja S_{re} , (Ξ_{re}) kasvavat (vähenevät)
 monotonisesti, kun taas suljetussa ja äärettömässä systeemissä S_{id} ja Ξ_{id}
 ovat liikevakioita ja S_{re} , (Ξ_{re}) kasvaa (vähenee) monotonisesti. Avoimessa
 ja äärellisessä systeemissä molemmat suuretyypit S_{re} , (Ξ_{re}) ja S_{id} , (Ξ_{id})
 voivat myös pienentyä (kasvaa), eli systeemi voi kokea Poincarén paluun,
 mutta suljetussa ja äärellisessä systeemissä S_{id} ja Ξ_{id} ovat liikevakioita ja

¹⁷mutual information

¹⁸Mikäli lukija on syvällisemmin kiinnostunut informaation, entropian ja kvanttify-
 siikan suhteesta, kannattaa tutustua kvantti-informaatiota käsitteleviin oppikirjoihin,
 kuten [40, 52].

S_{re} , (Ξ_{re}) voi vähentyä (kasvaa).

Seuraavaksi analysoin tarkasti yhden suljetun systeemin dekoherenssista puhuttaessa esille nousevan *periaatteellisen* ongelman, johon yleensä vedotaan (muodossa tai toisessa), kun väitetään, että ”oikeasti” suljetussa systeemissä ei voi tapahtua dekoherenssia. Olkoon maailmankaikkeus (fysikaalinen todellisuus) suljettu systeemi. Tällöin S_{id} ja Ξ_{id} ovat vakioita. Ei ole olemassa ympäristöä, joten koherenssia tai entropiaa ei tule mistään lisää maailmankaikkeuteen eikä poistu siitä. Itse asiassa koska maailmankaikkeudella voidaan olettaa olevan aaltofunktio, niin maailmankaikkeus on puhtaassa tilassa, jolle $S_{id} = 0$ ja $\Xi_{id} = 1$. Bellin tunnetun argumentin kehittäminen lähtee tästä asetelmasta [182]. Bellin argumentti on pääasiallisesti se, että koska maailmankaikkeus on alkujaan puhtaassa tilassa, niin se pysyy aina puhtaassa tilassa – huolimatta siitä, kuinka nopeasti ja kuinka pieniksi redusoidun tiheysmatriisin (alunperin superpositiossa olleen maailmankaikkeudessa olevan alisysteemin) ei-diagonaalelementit kutistuvat. Hän väittää, että tämän takia olisi mahdollista *periaatteessa* tehdä edellä mainittuun maailmankaikkeuden tilaan sellainen mittausta, joka paljastaisi alisysteemissä olevat kvanttikorrelaatiot.

Mittaus on vuorovaikutus, ja se tehdään mittalaitteella – ja kyetäkseen mittaamaan halutut kvanttikorrelaatiot tämän mittalaitteen täytyy olla tiettyjen vaatimusten mukainen. Omnès on laskenut [19]: s. 307-309, että tällä mittalaitteella tulisi olla vähintään $N' \sim C_1 e^{C_2 N^{2/3}}$ vapausastetta, missä N on mitattavan systeemin vapausasteiden lukumäärä ja C_i :t ovat suunnilleen ykkösen kokoisia vakioita. Nyt huomataan, että mittalaitteen tulee olla huomattavasti maailmankaikkeutta suurempi (tähän johtopäätökseen voi tietysti päätyä normaalia logiikkaakin käyttäen, mikäli miettii, millaisia vaatimuksia sellaisen mittalaitteen, joka kykenee mittaamaan täydellisesti oman tilansa, tulee täyttää). Mikäli mitattavalla systeemillä olisi $\sim 10^{80}$ relevanttia vapausastetta, mittalaitteella tulee olla vähintään $\sim 10^{10^{53}}$ vapausastetta. Johtopäätös: mittalaite ei mahdu maailmankaikkeuteen, ja mikäli mahtuisi, niin sen toiminta olisi erittäin hankalaa johtuen yleisen suhteellisuusteorian rajoitteista, kuten äärellinen informaation siirtonopeus, ja se todennäköisesti romahtaisi mustaksi aukoksi. Täten on loogisesti mahdotonta, että maailmankaikkeudessa voisi olla mittalaite, joka tavoittaisi maailmankaikkeuden aaltofunktion syrjäisiin nurkkiin siirtyneet korrelaatiot vaikkapa jostain herra Schrödingerin terässäiliöön sulkemasta surullisenkuuluisasta kissasta, eli Bellin esittämää mittausta ei ole periaatteessakaan mahdollista suorittaa.

Edellä esitetty esimerkki havainnollistaa hyvin, minkä takia olen valinnut karkeistettuun entropiaan ja koherenssiin viittaamisessa käytettäväksi sanaksi ”realistinen”. Kyse on siitä, että maailmankaikkeudessa ole-

van Todellisen Havaitseijan (siis sen, joka yrittäisi rakentaa tai käyttää tai jotenkin saada aikaan Bellin peräänkuuluttaman mittalaitteen tai mittauksen) näkökulmasta katsottuna maailmankaikkeuden tapahtumat toteutuvat realistisen koherenssin ja entropian mukaan – Ξ_{re} ja S_{re} kuvaavat maailmankaikkeudessa olevan ja maailmankaikkeuden kanssa vuorovaikuttavan (täysin korreloituneen) havaitseijan näkökulmasta maailmankaikkeuden dynamiikkaa. Vaikka Ξ_{re} ja S_{re} ovat ”vain” efektiivisen teorian käsitteitä, niin efektiivinen teoria on parasta, mihin Todellinen Havaitseija kykenee maailmankaikkeutta mittaamalla. Maailmankaikkeuden aaltofunktion hän voisi saada selville vain arvaamalla, mutta ei edes kokonaan, sillä maailmankaikkeudessa on ”vain” niin monta vapausastetta kuin sen aaltofunktion kuvaamiseen tarvittaisiin; hänellä ei olisi edes mahdollisuutta tallentaa koko maailmankaikkeuden aaltofunktiota muistiinsa, saati sitten paperille. Täten Ξ_{id} ja S_{id} ovat saaneet määreeksen ”idealistisen”, sillä ne viittaavat (tässä tapauksessa) koko maailmankaikkeuden aaltofunktioon (tai tilaan) – näkökulmaan, jonka saavuttaminen on maailmankaikkeudessa oleville olennoille mahdotonta, ellei tingitä täydellisen kuvauksen vaatimuksesta ja tämän lisäksi suoriteta viljejä arvauksia.

Mikäli joku teoreetikko väittää, että maailmankaikkeudessa ei voi tapahtua dekoherenssia, koska maailmankaikkeus on aina puhtaassa tilassa, niin tällöin hän katsoo asiaa ”idealistisesta” chinchilla-perspektiivistä eikä edes puhu samasta asiasta kuin kokeen tehneet henkilöt. Täten dekoherenssitutkimuksen ja -keskustelun kannalta on tärkeää huomata, mistä näkökulmasta kukin asiaa katsoo. Mikäli joku jostain syystä haluaa käyttää idealistista näkökulmaa, niin hänen tulee tehdä se putoamatta moiniin mahdollisiin loogisiin sudenkuoppiin. Ensinnäkin, hänen tulee mallintaa aivan kaikki – mukaan lukien mittaukset, mittalaitteet ja havaitseijat – kvanttifysikaalisesti. Mittaukset eivät eroa muista vuorovaikutuksista. Toiseksi, näin tehtyään hänen tulee välttää suoraa vertaamista havaintoihin tyyliin ”emme havaitse mittalaitteiden, kissojen tms. olevan superpositiossa, vaikka teorian mukaan niiden pitäisi olla”, koska tällöin hän vertaa yhteismitattomia tuloksia keskenään eli yrittää verrata idealistisen kuvauksen asioita realistiseen kuvaukseen kuuluviin havaintoihin. Kolmanneksi, mikäli halutaan verrata havaintoja teorian ennusteisiin, niin tällöin idealistisesta kuvauksesta tulee siirtyä realistiseen kuvaukseen. Halutesaan tutkia realistista kuvausta Älykäs Chinchilla siirtyy karkeistuksen tehtyään käyttämään redusoituja tiheysmatriiseja.

Idealistisen ja realistisen näkökulman fundamentaali looginen ero voidaan hyvin tulkita Gödelin epätäydellisyyslauseen fysikaaliseksi vastineeksi. Oleellisesti epätäydellisyyslauseen sisältö on seuraava: Ensimmäisen kertaluvun predikaattilogiikkaa rikkaammassa loogisessa systeemissä

(maailmankaikkeus), joka sisältää kyseisen loogisen systeemin ristiriidattomuutta koskevia propositioita (Todellinen Havaittaja, joka mittaamalla yrittää saada selville täydellisen kuvauksen maailmankaikkeudesta), on olemassa propositioita φ_i , jotka ovat muotoa ” φ_i :tä ei voi todistaa todeksi”. Proposition φ_i todistaminen onnistuu vain korkeamman kertaluvun metateoriassa (Älykäs Chinchilla). Karkeasti ottaen epätäydellisyyslause sanoo, että systeemiä on mahdoton kuvata täydellisesti systeemin sisältä. Tästä syystä täydellisen ja epätäydellisen kuvauksen on oltava erilaisia. Gödelin alkuperäinen artikkeli on viite [32], ja Gödelin epätäydellisyyslauseesta löytyy lisätietoja esimerkiksi artikkeleista [8, 33].

Tässä yhteydessä muistutan, että dekoherenssi on *havaittu* ilmiö maailmankaikkeudessamme [110, 111], vaikka koko maailmankaikkeuden aaltofunktio noudattaakin unitaarista dynamiikkaa. Maailmankaikkeudessa havaittavat asiat viittaavat realistisiin suureisiin S_{re} ja Ξ_{re} .

5.4 Peruslauseita ja oletuksia

Seuraavaksi hieman yleisestä tieteellisestä teorianmuodostuksesta liittyen koherenssiteoriaan. Usein tieteelliset teoriat pyritään aksiomatisoimaan ja löytämään teorian peruslauseet (joista teorian muut väittämät ovat johdettavissa suoraan tai muiden teorioiden ja/tai havaintoevidenssin avulla). Tämä aksiomatisointiprosessi joko alkaa kuin itsestään tai aloitetaan sen jälkeen kun teoria on saavuttanut vakiintuneen aseman tiedeyhteisössä. [23]: II.3.2. Koska koherenssiteoria on erittäin nuori teoria, sille on käytännössä mahdotonta tässä vaiheessa alkaa etsiä aksiomaattista rakennetta. Kuitenkin muutama peruslause löytyy tässä kirjassa esitetyn analyysin ansiosta helposti ja perustellusti:

Peruslause 1: *Kvanttikohereenssi on kvanttikorrelaatioiden voimakkuuden mitta.*

Määritelmän 26 eksakti sisältö. Kohereenssi on aallonkaltaisten entiteettien korrelaatiota (määritelmä 25), ja kvanttikorrelaatiot eivät ole selitettävissä klassisten korrelaatioiden avulla, eli toisin sanoen kvanttikorrelaatiot liittyvät kvanttifysikaalisiin superpositio-tiloihin (määritelmä 23).

Peruslause 2: *Kvanttikohereenssi on säilyvä suure.*

Kvanttikohereenssin suureenkaltaisen olemus sisältyy implisiittisesti määritelmään 26 ja siihen liittyvään peruslauseeseen 1. Kvanttikohereenssillä mitataan kvanttikorrelaatioiden voimakkuutta. Kvanttikohereenssin ”säilymlaki” seuraa (Noetherin periaatteen mukaan)

kvanttifysikaalisen tilan invarianssista eri kantojen suhteen (katso luku 5). Täten kyseessä on sisäinen symmetria. Kvanttikohereksi voidaan määrittää yksikäsitteisesti (matemaattinen määritelmä luvussa 5).

Peruslause 3: *Kvanttikohereksi on intensiivinen suure.*

Kvanttikohereksi on perusrakenteeltaan entropian (joka on ekstensiivinen suure) intensiivinen vastinpari. Sekä entropia että kohereksi asettavat rajoitteita suljetun systeemin mahdollisille tiloille, jotka ovat (dynaamisesti) saavutettavissa (luku 5.2.3).

Lisäksi voidaan listata muutama oletus, joista voi tulla teorian peruslauseita, mikäli tuleva tutkimus osoittaa oletukset todellisuudessa vallitseviksi tosiasioiksi. Näihin oletuksiin liittyvät kysymykset muodostavat hyvän lähtökohdan kohereksiteorian jatkotutkimukselle.

Oletus 1: *Kvanttikohereksin avulla on mahdollista määrittää ja kvantifioida alisysteemien välinen keskinäinen lomittuminen.*

Oletus 2: *Karkeistettua kohereksia Ξ_{re} käyttämällä saadaan kuvattua kohereksi-ilmiötä fysikaalisen todellisuuden sisältä.*

Gödelin epätäydellisyysteoreeman mukaan riittävän monimutkaista systeemiä ei voi kuvata täydellisesti systeemin sisältä.

Oletus 3: *On teoreettisesti mahdollista löytää ”oikea” tapa tehdä karkeistus.*

Oletan, että löytyy formaali tapa linkittää Gödelin epätäydellisyysteoreema karkeistukseen, ja että jossain vaiheessa kyetään ymmärtämään, kuinka ”karkeistukselta” näyttävä fysikaalisessa todellisuudessa tapahtuva ilmiö oikein tapahtuu ja mistä siinä loppujen lopuksi on kyse.

Peruslauseita tulee lisää, kun kohereksin olemusta aletaan ymmärtää paremmin (ja esittämieni peruslauseiden eksakti muotoilukin tulee mahdollisesti muuttumaan), mutta tästä on hyvä jatkaa tutkimusta.

5.5 Kohereksiteorian soveltamisesta käytäntöön

Havainnollisuuden vuoksi esitän taulukossa 5.1 luvun 4.3 kuvissa 4.3 ja 4.4 esitellyn makroskooppisen atomi-molekyylidikondensaattisuperposition

Dekoherenssiskenaario	<i>A</i> Ei	<i>D</i> Heikko	<i>B</i> Maltillinen	<i>C</i> Vahva
Aika				
$\lambda t_1 = 8.6 \times 10^{-5}$	$\xi_{d,I} \sim \infty$ $\Xi = 1$	$\xi_{d,I} = 10.88$ $\Xi = 0.924$	$\xi_{d,I} = 3.44$ $\Xi = 0.793$	$\xi_{d,I} = 1$ $\Xi = 0.528$
$\lambda t_2 = 1.05 \times 10^{-2}$	$\xi_{d,II} \sim \infty$ $\Xi = 1$	$\xi_{d,II} = 9.65$ $\Xi = 0.792$	$\xi_{d,II} = 3.05$ $\Xi = 0.515$	$\xi_{d,II} = 1$ $\Xi = 0.228$

Taulukko 5.1: Luvussa 4.3 esitellyn makroskooppisen superposition koherenssi Ξ skenaarioissa *A* (ei dekoherenssia), *D* (heikko dekoherenssi), *B* (maltillinen dekoherenssi) ja *C* (vahva dekoherenssi) ajanhetkellä t_1 (vaiheen *I* päättyminen) ja t_2 (mahdollisen makroskooppisen superposition syntymishetki). Jopa nykyisen teknologisen tietotaidon ulottumattomissa olevan skenaarion *D* tapauksessa dekoherenssi vähentää makroskooppisen superposition havaitsemistodennäköisyyttä ~ 20 %.

tiheysmatriisien koherenssit ajanhetkellä t_1 (vaiheen *I* lopussa) ja hetkellä t_2 , jolloin makroskooppisen superposition pitäisi olla muodostunut. Parametri ξ_d kuvaa dominoivan vuorovaikutuksen voimakkuutta suhteessa dekoherenssiin. Heikonkin dekoherenssin tapauksessa (skenaario *D*) systeemin koherenssista on hetkellä t_2 kadonnut noin 20 %. Tällöin todennäköisyydellä ~ 0.8 mittaustulokseksi saadaan, että systeemi on tilassa, joka on alkuperäisen puhtaan tilan unitaarinen muunnos. Todennäköisyydellä ~ 0.2 systeemi on päätenyt johonkin muuhun tilaan, eli todennäköisyydellä ~ 0.2 systeemin makroskooppinen superpositio on romahtanut.

Haluan tällä esimerkillä tuoda käytännössä ilmi tiheysmatriisista laskettavan (invariantin) koherenssin kätevyyden: sillä voidaan arvioida todennäköisyydet kaikkien tiheysmatriiseilla ilmaistavien systeemien superpositioiden romahtamiselle. Tämä on varsin kätevä työkalu kvanttietokoneisiin liittyvässä tutkimuksessa, sillä kvanttietokoneen laskentavoima perustuu juuri superpositioihin. Jos vaikkapa 400 qubitin kvanttietokoneessa jokaisesta qubitista häviää laskun suorittamisaikana ~ 0.01 yksikköä koherenssia, koko kvanttietokoneessa on sen jälkeen koherenssia jäljellä enää ~ 0.018 yksikköä, eli kone laskee halutun asian oikein todennäköisyydellä ~ 0.018 . Tämän myötä lienee ymmärrettävää, miksi kvanttietokoneen kehittäminen on hyvin hankalaa.

Luku 6

Suljetun systeemin dekoherenssista

Tässä luvussa tarkastelen suljetun kvanttisysteemin dekoherenssin mallintamista käyttäen yksinkertaista spin $1/2$ -mallia. Otan lähtökohdaksi tiheysmatriisiformalismin, sillä dekoherenttien historioiden tulkinta on ongelmallinen (katso luku 4.1), ja mielestäni kvanttimekaanisen systeemin dynamiikan kuvaamisen fundamentaali lähtökohta on aaltofunktio (siis tilavektori). Tämän lisäksi kvanttifysiikan tekeminen fyysikaalisen todellisuuden mittakaavassa tilavektoreita käyttäen on mielestäni pätevä lähestymistapa ja tuottaa järkeviä ja ymmärrettäviä tuloksia. Tarkoitukseni on soveltaa kehittämäni koherenssin määritelmää ja johtaa dekoherenssia kuvaava fenomenologinen käsite *dekoherenssiaika* τ_d soveltaen numeerisesti selvitettyä realistisen koherenssin aikakehitystä $\Xi_{re}(t)$. Alaluvussa 6.1 esittelen käyttämäni spin-mallin, alaluvussa 6.2 malliin perustuvat numeeriset simulaatiot ja niiden tulokset, ja alaluvussa 6.3 tarkastellaan mallin avulla dekoherenssin, ympäristön ja havaitsijan roolia.

6.1 Spin $1/2$ -malli

Heisenbergin spin-malli soveltuu hyvin dekoherenssitutkimukseen, koska se on riittävän yksinkertainen ratkaistavaksi ja toisaalta riittävän monimutkainen simuloidakseen oikeiden kvanttisysteemien ominaisuuksia. Lisäksi sitä on helppo tarvittaessa yksinkertaistaa tai monimutkaistaa. Suljettujen kvanttisysteemien yleisten ominaisuuksien tutkimiseen riittää hyvin yksinkertaistettu versio. Lisäksi kytketyt spinit ovat mielenkiintoisia tutkimuskohteita myös kvanttilaskennan näkökulmasta.

Tutkin systeemiä, joka koostuu N :stä vuorovaikuttavasta spin $1/2$ -hiukkasesta, jotka ovat kiinteillä paikoilla avaruudessa. Systeemi on sul-

jettu, eli sillä ei ole ympäristöä. Hiukkasten väliset vuorovaikutukset tapahtuvat spinien z -komponenttien välityksellä (ei välttämätön, mutta helpottava yksinkertaistus, joka tekee systeemistä Isingin mallin kaltaisen), ja koska ympäristöä (ulkoista magneettikenttää tai vastaavaa) ei ole, niin voidaan olettaa, että spin-tilat ovat degeneroituneet eli niillä on sama energia, joka voidaan asettaa nolaksi. Zurek [166], Omnès [19] ja Schlosshauer [108, 109] tarkastelevat samankaltaista, mutta yksinkertaisempaa mallia osoittaakseen, että redusoidun tiheysmatriisin ei-diagonaalielementit (kvanttikorrelaatiot) pienenevät ajan kuluessa. Heidän mallinsa on avoin versio, jossa yksi hiukkanen valitaan *systeemiksi*, jonka *ympäristön* muut hiukkaset muodostavat, eivätkä ympäristön hiukkaset vuorovaikuta keskenään. Itse taas olen kiinnostunut tutkimaan hiukkassysteemiä kokonaisuutena.

Hamiltonin operaattori

$$H = \hbar \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{i=j+1}^N g_{ij} \sigma_z^j \otimes \sigma_z^i \prod_{k=1, \neq j, i}^N \otimes \mathbf{1}_k \quad (6.1)$$

ilmaisee systeemin dynamiikan. Vuorovaikutusmatriisi G , jossa $g_{ij} = g_{ji}$, sisältää tiedon vuorovaikutusten voimakkuudesta hiukkasten i ja j välillä. Vuorovaikutusten voimakkuus on seuraus jostain potentiaalista V , mutta muodollista ratkaisua varten ei ole välttämätöntä tietää potentiaalista tämän enempää – varsinkin kun hiukkaset on tuomittu pysymään kiinteillä paikoillaan. Oletus kiinteillä paikoilla olevista hiukkasista on perusteltu, sillä yleensä dekoherenssin aikaskaala on lyhyin aikaskaala systeemissä [104], ainakin lyhyempi kuin hiukkasten dynaaminen aikaskaala. Alaluvun 6.2 mukaisissa numeerisissa simulaatioissa keskitytään vain $V = \eta/r^\epsilon$ -tyyppisiin potentiaaleihin.

Yksinkertaistetaan mallia vielä siten, että keskitytään sellaiseen alkutilaan, joka muodustuu yksittäisten hiukkasten spinien superpositioiden tulotilasta, eli

$$|\Psi(0)\rangle = \prod_{k=1}^N \otimes (a_k |+_k\rangle + b_k |-_k\rangle), \quad (6.2)$$

missä a :t ja b :t ovat normitettuja todennäköisyysamplitudeja, eli $|a_k|^2 + |b_k|^2 = 1$ kaikille $k = 1, \dots, N$. Schrödingerin yhtälö

$$i\hbar \partial_t |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle \quad (6.3)$$

ilmaisee systeemin aikakehityksen, ja yhtälön (6.2) antamalla alkuehdolla saadaan aikariippuvuudeksi

$$|\Psi(t)\rangle = \exp \left[-i \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{i=j+1}^N g_{ij} \sigma_z^j \sigma_z^i t \right] \prod_{k=1}^N \otimes (a_k |+_k\rangle + b_k |-_k\rangle). \quad (6.4)$$

Ottamalla systeemin tiheysmatriisista jälki muiden hiukkasten yli saadaan ratkaistua l :nnen hiukkasen kohtalo

$$\rho_l = \text{Tr}_{1,\dots,N \neq l} \rho, \quad (6.5)$$

missä $\rho = |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|$. Olen siis tuottanut efektiivisen teorian käyttämällä Gibbsin karkeistusta [45, 173, 174] vähentämään systeemin kuvaamiseen tarvittavia vapausasteita. Käytännössä muut hiukkaset muodostavat vuorollaan tarkastelun alla olevan hiukkasen efektiivisen ympäristön aivan kuten keskeiskenttäapproksimaatiossa. Pois jäljitettyjen hiukkasten vaikutus tarkastelun kohteena olevaan hiukkaseen ilmaistaan yksinkertaisemmassa muodossa käyttäen vähempää määrää vapausasteita. Täten

$$\begin{aligned} \rho_l &= |a_l|^2 |+_l\rangle\langle+_l| + |b_l|^2 |-_l\rangle\langle-_l| \\ &+ \left[a_l b_l^* \prod_{k=1, \neq l}^N \left(|a_k|^2 e^{-i2g_k t} + |b_k|^2 e^{i2g_k t} \right) |+_l\rangle\langle-_l| + h. c. \right]. \end{aligned} \quad (6.6)$$

Yhtälön (6.6) ilmaisema tulos on sikäli mielenkiintoinen, että jos indeksin l poistaa, niin se ei poikkea artikkelin [166] tuloksesta. Indeksien l olemassaolo johtuu siitä, että tarkastelen systeemiä, jossa kaikkien hiukkasten välillä on vuorovaikutuksia, kun taas viitteessä [166] tutkitaan vain keskenään vuorovaikuttamatonta ympäristöä.

Helpotetaan yhtälöiden kirjoitusasua merkitsemällä

$$z_l = a_l b_l^* \prod_{k=1, \neq l}^N \left(|a_k|^2 e^{-i2g_k t} + |b_k|^2 e^{i2g_k t} \right). \quad (6.7)$$

Tämä z_l (tai sen kompleksikonjugaatti z_l^*) ilmaisee l :nnen hiukkasen ei-diagonaalelementtien aikakehityksen. Redusoidun tiheysmatriisin ρ_l ominaisarvot ovat

$$\lambda_{i,l} = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{1 - 4(|a_l|^2 |b_l|^2 - |z_l(t)|^2)}. \quad (6.8)$$

Yksittäisen hiukkasen l koherenssi on $\Xi_{l,single} = \Xi(\rho_l)$, joten koko systeemin realistiseksi koherenssiksi saadaan $\Xi_{re} = N^{-1} \sum_{l=1}^N \Xi_{l,single}$. Sijoittamalla suurin ominaisarvo yhtälöstä (6.8) koherenssin määritelmään¹ (yhtälö 5.5) saadaan

$$\Xi_{re}(t) = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \frac{M}{M-1} \left(\lambda_{max,l} - \frac{1}{M} \right)$$

¹Katso luvusta 5 koherenssin olemukseen liittyvä tarkempi analyysi.

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \frac{2}{1} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1 - 4(|a_l|^2 |b_l|^2 - |z_l(t)|^2)} - \frac{1}{2} \right) \\
&= \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \sqrt{1 - 4(|a_l|^2 |b_l|^2 - |z_l(t)|^2)}, \tag{6.9}
\end{aligned}$$

missä N on hiukkasten lukumäärä ja M redusoidun tiheysmatriisin dimensio.

6.2 Simulaatiot ja tulokset

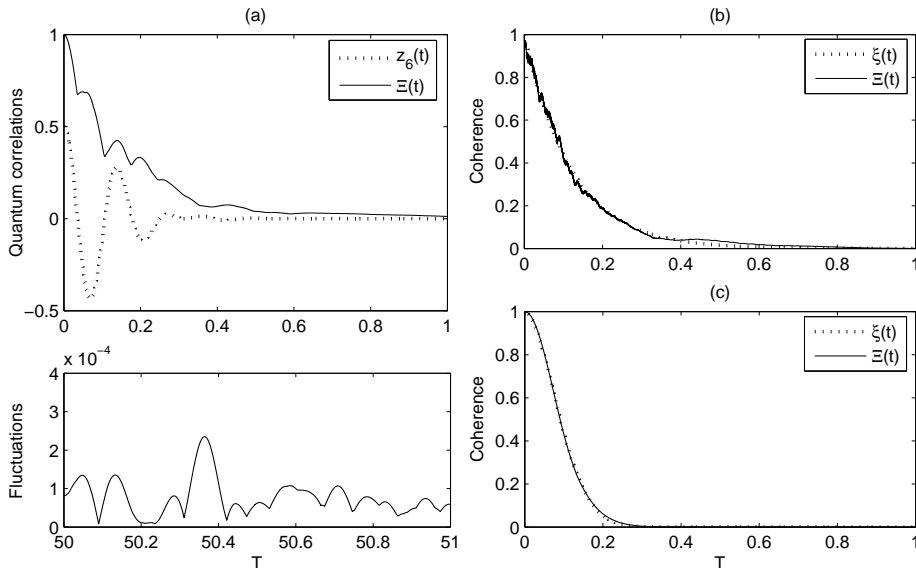
6.2.1 Simulaatioiden rakenne

Numeeristen simulaatioideni päätarkoitus on osoittaa luvussa 5 esitellyn koherenssin matemaattisen määritelmän käyttökelpoisuus. Toissijaisena tarkoituksena on selvittää koherenssin aikakehitystä sellaisessa yksinkertaisessa mallissa, jonka numeerinen ratkaiseminen nykyisillä laskennallisilla resursseilla on mahdollista. Lisäksi tarkoituksena on arvioida Poincarén paluuta ja dekoherenssiajan $\tau_d(N, n_\rho, \eta, \epsilon, D)$ riippuvuutta systeemin relevanteista parametreista N (hiukkasmäärä), n_ρ (hiukkastiheys), η ja ϵ (vuorovaikutuksen muoto η/r^ϵ -potentiaalissa), ja D (systeemin tilaulottuvuuksien määrä). Tavallisesti koherenssin väheneminen äärettömissä malleissa noudattaa muotoa $\Xi \sim \exp(-t/\tau_d)$, minkä avulla dekoherenssiaika τ_d yleensä määritellään [104, 105]. Numeeriset simulaatiot paljastavat, että koherenssin vähenemisprofiilin muoto $\Xi \sim \exp\left(- (t/\tau_d)^{f(D,\epsilon)}\right)$ on täsmällisempi kuin tavanomaisesti käytetty vähenemisprofiili.

Simulaatiot suoritetaan D -ulotteisessa ”laatikossa”, jonka tilavuus on l^D . Laatikoon arvotaan N hiukkasta satunnaisille, mutta kiinteille paikoille. Hiukkaset vuorovaikuttavat keskenään Hamiltonin operaattorin (6.1) kuvaamalla tavalla. Laatikon sivun pituus riippuu hiukkasten lukumäärästä N ja hiukkastiheydestä n_ρ :

$$l = \left(\frac{N}{n_\rho} \right)^{1/D}. \tag{6.10}$$

Esimerkin yleisyyden kärsimättä numeriikkaa voidaan helpottaa valitsemalla alkutilaksi täydellisten superpositiotilojen tulotila, eli $a_k = b_k = 1/\sqrt{2}$. Näin ollen suljetun ja äärellisen esimerkkisysteemin idealistinen koherenssi on $\Xi_{id} = 1$. Hiukkasten väliset vuorovaikutukset ovat $g_{lk} = \eta/r_{lk}^\epsilon$, missä r_{lk} on hiukkasten l ja k välinen etäisyys. Sijoittamalla nämä



Kuva 6.1: Koherenssifunktion $\Xi_{re}(t)$ aikakehitys: (a) Systemin parametreilla $N = 20$, $D = 1$, $\epsilon = 1$, $n_\rho = 1$ verrattuna yksihiukkaskorrelaatioon $z_6(t)$ (satunnaisesti valittu kuudes hiukkanen), ja alla koherenssifunktion pitkän ajan fluktuaatiot. (b) Verrattuna sovitusfunktioon $\xi(t)$ systemin parametreilla $N = 100$, $D = 1$, $\epsilon = 1$, $n_\rho = 1$. (c) Verrattuna sovitusfunktioon $\xi(t)$ systemin parametreilla $N = 100$, $D = 3$, $\epsilon = 1$, $n_\rho = 1$. Simulaatioajan yksikkö on $T = \eta(2n_\rho[\text{m}])^{\epsilon/D} t$, missä t on todellinen aika. Sovituksen tuloksena saadut parametrit (b) $t_d = 0.1212$, $C = 1.0070$, $c = 2.3 \times 10^{-16}$, $\chi^2 = 0.8420$ ja (c) $t_d = 0.1114$, $C = 1.8443$, $c = 1.5 \times 10^{-21}$, $\chi^2 = 0.0744$ osoittavat esittämäni koherenssin vähenemisprofiilin tarkkuutta. Poikkeamat teoriasta ovat merkityksettömiä, kun $D + 1 > \sqrt{N/200} \exp(\epsilon/2)$.

ehdot yhtälöön (6.9) saadaan realistiseksi koherenssiksi

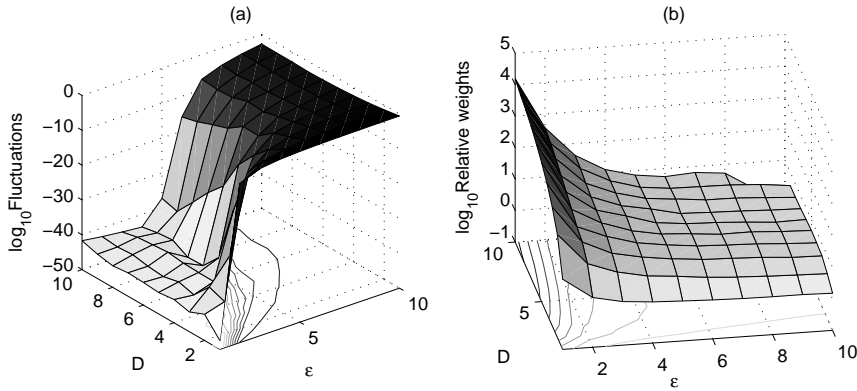
$$\Xi_{re}(t) = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \prod_{k=1, \neq l}^N \cos\left(\frac{2\eta t}{r_{lk}^\epsilon}\right). \quad (6.11)$$

Tähän realistisen koherenssin aikakehitykseen $\Xi_{re}(t)$ sovitetaan pienimmän neliösumman metodilla funktio

$$\xi(t) = (1 - c)e^{-(t/t_d)^C} + c, \quad (6.12)$$

joka siis sallii $\Xi_{re}(t)$:n fluktuaatiot keskimääräisellä tasolla c . Fluktuaatioiden keskimääräinen taso c on $\Xi_{re}(t)$:n odotusarvo aikavälillä $[t_1, t_2]$, missä $\tau_d \ll t_1$ ja $\tau_d \ll t_2 - t_1$:

$$c = \langle \Xi_{re} \rangle = \frac{1}{t_2 - t_1} \int_{t_1}^{t_2} \Xi_{re}(t) dt. \quad (6.13)$$



Kuva 6.2: Fluktuaatioiden odotusarvo (a) ja painojen keskiarvo (b) suhteessa paikkaulottuvuuksien määrään D ja potentiaalitermiin ϵ . Kuvan simulaatioiden muut parametrit ovat $N = 200$ ja $n_\rho = 1$. Kuvien perusteella voi päätellä, että esittämäni koherenssin vähenemisprofiili on erittäin tarkka, mikäli ehto $D + 1 > \sqrt{N/200} \exp(\epsilon/2)$ pätee.

Yhtälön (6.12) sovittamisesta tuleva virheiden neliöiden summa χ kuvaa sovituksen tarkkuutta. Analyysin viimeisessä vaiheessa tätä tarkkuutta kuvaavaa parametria tullaan käyttämään datapisteiden suhteellisten painojen ratkaisemiseen. Yksi simulaatiokierros tuottaa datana sovitusparametrit t_d (kuvaa dekoherenssiajan arviota), C (eksponentti, joka karakterisoi koherenssin vähenemistä tietyssä vuorovaikutusmuodossa $\sim r^{-\epsilon}$ tietyssä ulottuvuudessa D), c (koherenssin fluktuaatioiden keskimääräinen taso) ja χ (sovituksen virheiden neliöiden summa). Poincarén paluuaika T_P lasketaan suoraan käyttämällä vuorovaikutuskertoimia g_{lk} .

Edellä kuvattu vaihe toistetaan U kertaa. Arvolla $U = 100$ saadaan kohtuullisen hyvä statistinen arvio sovitusparametreista tietylle muuttujajoukolle (N_i, ϵ_i, D_i) . Koherenssin aikakehityksen riippuvuus parametreista η ja n_ρ on sisällytetty ”simulaatioajan” yksikköön, joka siis on $T = \eta n_\rho^{\epsilon/D} t$. Tarkasti läpi käytävä parametriavaruus on $N \in [20 \dots 100] \wedge D \in [1 \dots 4] \wedge \epsilon \in [1 \dots 2]$, ja lisäksi muutamia ylimääräisiä pisteitä ja siivuja suuremmilta N :n arvoilta, joista huomattavin on $N = 200$: $D \in [1 \dots 10] \wedge \epsilon \in [1 \dots 10]$.

6.2.2 Yleisistä tuloksista

Numeeriset simulaatiot osoittavat, että koherenssin vähenemisprofiili $\xi(t) = (1 - c)e^{-(t/t_a)^C} + c$ on pätevä ainakin tarkasteltavassa spin-mallissa. Kuva 6.1 esittelee sovituksen tarkkuuden. Koherenssin vähenemisprofiili $\xi(t)$ sopii simulaatioiden tuloksena saatuun dataan ilman merkittäviä poik-

keamia tai fluktuaatioita, mikäli $D + 1 > \sqrt{N/200} \exp(\epsilon/2)$. Merkittävien poikkeamien alue syntyy pääosin siitä, että kahden koordinaattipisteen välinen pituusmitta $l = \sqrt{\sum_i^D (x_i - x'_i)^2}$ sallii enemmän hiukkasia kiinteän etäisyyden sisälle referenssihiukkasesta, kun systeemin paikkaulottuvuuksien määrä D kasvaa. Toinen vaikuttava seikka on se, että potentiaalini muuttuessa lyhytkantamaisemmaksi (ϵ :n kasvaessa) harvempi kiinteän etäisyyden sisällä olevista hiukkasista vaikuttaa merkittävästi koherenssin vähenemiseen.

Kuva 6.2 esittää fluktuaatioiden odotusarvon ja datan painojen keskiarvon käyttäytymisen suhteessa paikkaulottuvuuksien määrään D ja potentiaalitermiin ϵ . Matalimpien fluktuaatioiden taso on verrannollinen tekijään $\sim 10^{-N/5}$. Fluktuaatiot alkavat tuottaa suurta kontribuutiota systeemin dynamiikkaan, mikäli $D + 1 < \sqrt{N/200} \exp(\epsilon/2)$, eli esimerkiksi fluktuaatiotasoa parametrien arvoilla $D = 1$ ja $\epsilon = 10$ on suunnilleen ~ 0.3 – missä tapauksessa koherenssin fluktuaatiot ovat erittäin dominoivia suhteessa muihin efekteihin, jolloin sen kaltainen systeemi voi käyttäytyä hyvinkin kvanttikorreloituneella tavalla huolimatta jatkuvasta dekoherenssista. Tämä ei ole lainkaan yllättävää, sillä kuten aiemmin havaittiin, erittäin lyhyen kantaman potentiaalit eristävät hiukkaset käytännössä kaikista muista hiukkasista paitsi lähimmistä naapureistaan.

Matalan fluktuaatioalueen rajan verrannollisuus tekijään $\sim \sqrt{N}$ johdattaa siihen mielenkiintoiseen seikkaan, että edes $\epsilon = 1$ -tyyppiset potentiaalit eivät sijaitse matalimpien fluktuaatioiden tasolla, mikäli systeemin hiukkasluku on riittävän suuri. Tämän tuloksen voisi kuvitella aiheuttavan merkittäviä koherenssin fluktuaatioita makroskooppisille objekteille, mutta ennen sen suuntaisia väitteitä kannattaa huomata, että ensinnäkin matalimpien fluktuaatioiden taso putoaa hiukkasluvun kasvaessa verrannollisesti $\sim 10^{-N/5}$, jolloin koherenssin fluktuaatioiden nettoefekti saattaa pienentyä, vaikka systeemi ei parametriensa puolesta olisikaan matalimpien fluktuaatioiden tasolla, ja toisaalta fysikaalinen vaikutus tiettyyn fysikaaliseen objektiin on kaikkien vuorovaikutusten summa – mukaan lukien ne, jotka sijaitsevat matalimpien fluktuaatioiden tasolla.

Vaikuttaa siltä, että eksponentiaalisen vähenemisprofiilin parametrilla C on yläraja $C \leq 2$. Tavanomainen koherenssin vähenemisprofiili syntyy tapauksessa $D = \epsilon = 1$, jolloin siis $C = 1$. Voi olla, että tapauksen $C = 1$ kutsuminen tavanomaiseksi koherenssin vähenemisprofiiliksi perustuu vain siihen, että suurin osa (de)koherenssitutkimuksesta on tehty käyttäen liian yksinkertaisia yksiulotteisia systeemejä ja on unohdettu miettiä, onko mahdollista, että systeemin ulottuvuuksien määrä (tai vuorovaikutuksen muoto) voisi fundamentaalisti vaikuttaa koherenssin vähenemisen muotoon. Tutkimukseni osoittaa, että ”tavanomainen” kohe-

renssin vähenemisprofiili toteutuu vain harvoilla systeemin parametrien arvoilla.

6.2.3 Vuorovaikutuksista ja dekoherenssista eri kannoissa

Varmuuden vuoksi tarkastelen eksplisiittisesti, miltä spin-mallin käytös näyttää jossain muussa kannassa. Aiemmat teoreettiset laskelmat on tehty käyttäen spin z -kantaa, mutta superpositio spin z -kannassa on hyvin määritelty ominaistila spin x -kannassa (spin ylös). Fysikaalisen intuition mukaan luonnossa esiintyvät ilmiöt ovat riippumattomia siitä, millä tavalla niitä kuvaillaan teoreettisesti. Toisaalta taas esimerkiksi monihistoriatulkinnassa valitulla teoreettisella näkökulmalla on suunnattomia vaikutuksia mallin käyttäytymiseen. Tästä syystä voi peräti olla aiheellista tehdä tämä nollatutkimus ja tarkastella, mitä tiheysmatriisille tapahtuu yleisessä spin-kannassa.

Unitaarisen muunnoksen

$$U = \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (6.14)$$

avulla saadaan mikä tahansa spin-kanta. Yhtälön (6.2) kuvaama alkutila ehdoilla $a_k = b_k = \frac{1}{\sqrt{2}}$ on yleisessä spin-kannassa

$$|\Psi(0)\rangle_{\theta,\phi} = \prod_{k=1}^N \otimes \left((\cos \theta + e^{-i\phi} \sin \theta) |+_k\rangle_{\theta,\phi} + (e^{i\phi} \sin \theta - \cos \theta) |-_k\rangle_{\theta,\phi} \right). \quad (6.15)$$

Mikäli valitaan $\theta = \pi/4$ ja $\phi = 0$, päädytään spin x -kantaan, mikä siis on ominaistilojen tulotila. Tämä havainnollistaa osaa suljetun systeemin dekoherenssia vastaan esitetystä kritiikistä: kuinka tilassa, jonka mittaus-tulos tietyssä kannassa saadaan todennäköisyydellä 1, voi esiintyä dekoherenssia? Aina on löydettävissä kanta, jossa jossain muussa kannassa oleva superpositiotila onkin ominaistila.

On oleellista muistaa, että dekoherenssi on *dynaaminen* prosessi, mistä syystä vuorovaikutukset sisältävä Hamiltonin operaattori on yhtä tärkeä osa ongelmaa kuin alkutila. Tarkasteltavassa tilanteessa yhtälön (6.1) ilmaisema Hamiltonin operaattori on yleisessä $\sigma_{\theta,\phi}$ -kannassa

$$H = \hbar \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{i=j+1}^N g_{ij} \sigma_{\theta,\phi}^j \otimes \sigma_{\theta,\phi}^i \prod_{k=1, \neq j,i}^N \otimes \mathbf{1}_k, \quad (6.16)$$

missä

$$\sigma_{\theta,\phi} = \begin{pmatrix} \cos^2 \theta - \sin^2 \theta & e^{-i\phi} \sin 2\theta \\ e^{i\phi} \sin 2\theta & \sin^2 \theta - \cos^2 \theta \end{pmatrix}. \quad (6.17)$$

Täten hiukkasen l redusoitu tiheysmatriisi yleisessä spin-kannassa on

$$\rho(t)_{l,\theta,\phi} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sin 2\theta (e^{-i\phi} z_l(t) + e^{i\phi} z_l^*(t)) & e^{-i2\phi} \sin^2 \theta z_l(t) - \cos^2 \theta z_l^*(t) \\ e^{i2\phi} \sin^2 \theta z_l^*(t) - \cos^2 \theta z_l(t) & \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sin 2\theta (e^{-i\phi} z_l(t) + e^{i\phi} z_l^*(t)) \end{pmatrix}, \quad (6.18)$$

missä $z_l(t) = z_l^*(t) = \frac{1}{2} \prod_{k=1, \neq l}^N \cos(2g_{lk}t)$.

Redusoidun tiheysmatriisin (6.18) diagonaalien ulkopuoliset elementit ovat verrannollisia $z_l(t)$:hen (tai $z_l^*(t)$:hen) kaikissa niissä kannoissa, joissa on diagonaalien ulkopuolisia matriisielementtejä. Ainakin yleisessä spin-mallissa ajatus redusoitujen tiheysmatriisien diagonaalien ulkopuolisten elementtien ja kvanttikorrelaatioiden (koherenssin) välisestä suhteesta vaikuttaa pätevältä, samoin ajatus, että koherenssifunktio $\Xi(\rho_l, t) = 2|z_l(t)|$ kuvaa pätevästi koherenssin aikakehitystä. Kuten alaluvusta 5.1 käy ilmi, mikäli $N \rightarrow \infty \wedge t \rightarrow \infty$, niin tällöin $z(t), z^*(t) \rightarrow 0$, eli äärettömälle mallille redusoidun tiheysmatriisin diagonalisaatio tapahtuisi kaikissa kannoissa pysyvästi. Äärellisessä mallissa Poincarén paluut ovat mahdollisia.

Dynaamiset efektit (dekoherenssi ja rekoherenssi) eivät riipu valitusta kantavektori-joukosta, joten etuoikeutetun kannan ongelmaa ei käyttämälläni koherenssin määritelmällä synny.

6.2.4 Poincarén paluu

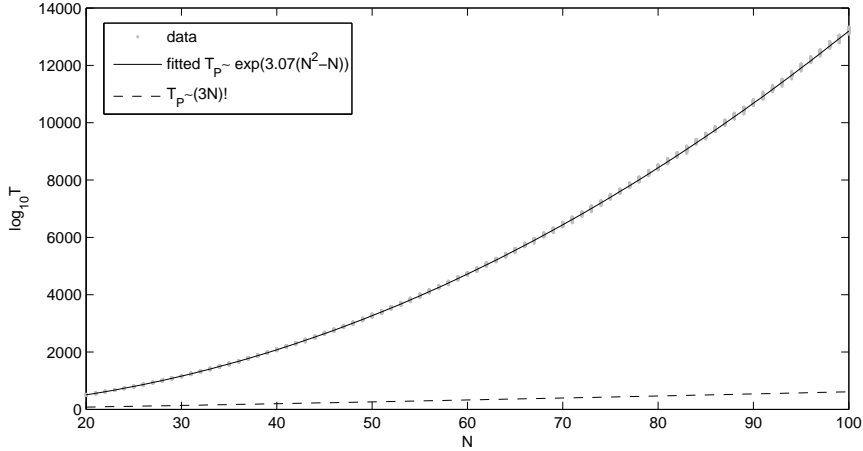
Koska simuloitu systeemi on suljettu ja äärellinen kvanttisysteemi, idealistinen koherenssi Ξ_{id} on liikevakio, mutta realistinen koherenssi Ξ_{re} voi kokea Poincarén paluun. Kohtuullisen yksinkertaisen menettelyn avulla on mahdollista arvioida N :stä alisysteemistä koostuvan systeemin periodia, jossa siis on $M = \frac{1}{2}(N^2 - N)$ kiinteää (tosistaan riippumatonta) periodia T_i . Konstruktiosta

$$\frac{T_{\text{unit}}}{T_i} = \frac{n_i}{d_i}, \quad (6.19)$$

missä n_i ja d_i ovat mahdollisimman pieniä luonnollisia lukuja, saadaan yläraja Poincarén paluuajalle:

$$T_P = T_{\text{unit}} \prod_i^M d_i. \quad (6.20)$$

Menetelmä, jolla arvioidaan numeerisesti Poincarén paluu-aika T_P jokaiselle simulaatiolle, on melko yksinkertainen toteuttaa, mutta valitettavasti se ei ole kovin tarkka – epätarkkuuksilla on taipumus kasvattaa



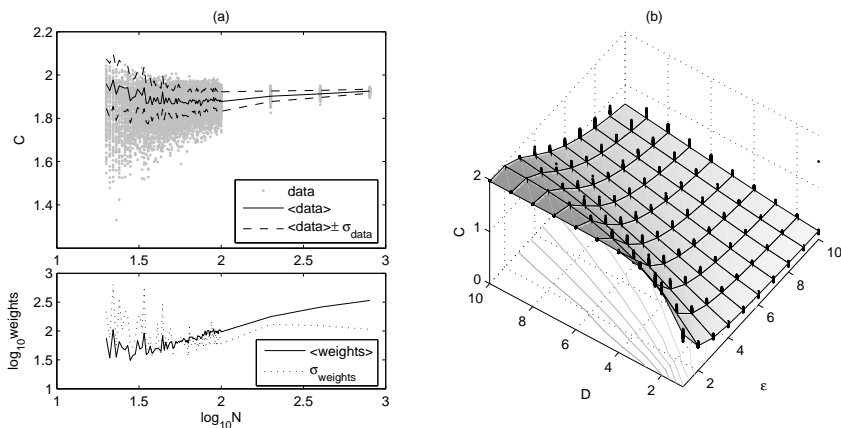
Kuva 6.3: Arvio Poincarén paluujaksen ylärajaksi. Simulaatiodata (harmaat pisteet) on tuotettu parametreilla $D = 1$, $\epsilon = 1$ ja $n_\rho = 1$. Simulaatioajan yksikkö on $T = \eta(n_\rho[\text{m}])^{\epsilon/D} t$, missä t on todellinen aika. Paras sovitus (yhtenäinen viiva) poikkeaa huomattavasti $\sim N!$ -tyyppisestä käytöksestä (katkoviiva).

arviota. Tästä syystä kuvan 6.3 esittämään tulokseen tulee suhtautua siten, että kyseessä on paluujaksen suuruusluokka. Simulaatioiden tuottamaan aineistoon sovitettu funktio on muotoa

$$T_P(N, n_\rho, \eta, \epsilon, D) = \pi \eta^{-1} n_\rho^{-\epsilon/D} e^{3.07(N^2-N)}. \quad (6.21)$$

Viitteessä [108] ilmoitetaan samankaltaisen systeemin Poincarén paluujaksi $T_P \sim N!$. Ero tämän ja esittämäni tuloksen välillä saattaa johtua käyttämäni menetelmän numeerisesta epätarkkuudesta sekä siitä, että menetelmä on sen verran karkea, että mukaan lasketaan myös sellaisia periodeja, jotka kokonaisluvulla kerrottuna tuottavat muiden periodien tulon. Tästä syystä esittämäni tulokseen tulee suhtautua arviona paluujaksen ylärajaksi.

Joka tapauksessa on selvää, että systeemi *saattaa* palata takaisin alkutilaansa, mutta paluuaika kasvaa todella nopeasti suhteessa systeemin hiukkaslukuun N . Esimerkiksi systeemille $N = 100$, $D = 3$, $\epsilon = 1$, $n_\rho = 10^{30} \text{ m}^{-3}$ ja $\eta = 8.22 \times 10^{43} e^2 \text{ Hz m C}^{-2}$ (sähkömagneettinen vuorovaikutus elektronin varaukselle e) saadaan paluujaksen ylärajaksi $T_P \sim 10^{13183} \text{ s}$, ja mikäli paluuaika olisi verrannollinen $\sim N!$:ään, paluujaksi saataisiin ”vain” $T_P \sim 10^{142} \text{ s}$, mikä kuitenkin on erittäin pitkä aika verrattuna maailmankaikkeuden arvioituun ikään $T_U \sim 4 \times 10^{17} \text{ s}$.



Kuva 6.4: Eksponenttiparametrin C riippuvuus systeemin parametreista N , ϵ ja D . Tiheys on $n_\rho = 1$. Parametriavaruuden projektiot ovat (a) $D = 3$, $\epsilon = 1$ ja (b) $N = 200$. Jokaisella parametrijoukon (N, D, ϵ) arvolla on olemassa 100 datapistettä. Vaikuttaa siltä, että eksponenttiparametrin C ja hiukkasluvun välillä ei ole riippuvuutta (a). Pienillä N :n arvoilla painojen keskihajonta on suurempi kuin painojen keskiarvo, mikä selittää eksponenttiparametrin C painotetun keskiarvon poikkeaman vakioarvosta. Paikkaulottuvuuksien D ja potentiaaliparametrin ϵ suhteen paras sovitus eksponenttiparametrille C saadaan funktiolla $f(D, \epsilon) = 1.97 (1 - 0.93 \exp(-0.65 D^{1.35} \epsilon^{-1.68}))$ (b). Tosin datapisteiden hajonta levenee suurilla D :n ja ϵ :n arvoilla.

6.2.5 Koherenssin vähenemisen riippuminen systeemin parametreista

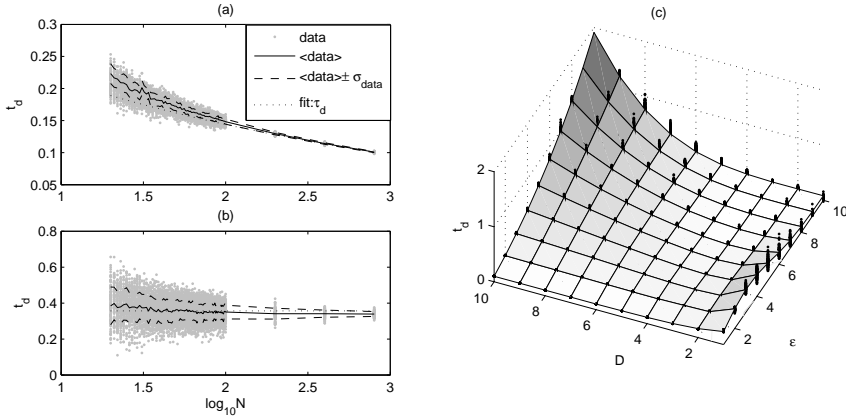
Kuten alaluvussa 6.2.2 ilmeni, koherenssin väheneminen noudattaa hyvin tarkasti profiilia $\xi(t) = (1 - c)e^{-(t/t_d)^C} + c$. Matalimmillaan fluktuaatiotaso käyttäytyy kuten $c \sim 10^{N/5}$, mikäli $D + 1 > \sqrt{N/200} \exp(\epsilon/2)$. Koherenssin systeemin parametreista riippuvan aikakehityksen johtamisessa on enää jäljellä kaksi askelta: selvittää eksponenttiparametri C ja dekoherenssiaikaparametri t_d .

Kuvassa 6.4 havainnollistettujen simulaatiotulosten perusteella eksponenttiparametri C ei ole N :n funktio. Osoittautuu, että funktio

$$f(D, \epsilon) = 1.97 \left(1 - 0.93 \exp(-0.65 D^{1.35} \epsilon^{-1.68}) \right) \quad (6.22)$$

antaa parhaan sovituksen havaituille sovitusfunktion $\xi(t)$ arvoille C . Huomataan myös, että D :n ja ϵ :in kasvaessa datapisteiden C hajonta levenee.

Kohtuullisen hyvän arvion dekoherenssiaikaparametrin t_d funktionaa-



Kuva 6.5: Dekoherenssiaikaparametrin t_d riippuvuus systeemin parametreista N , ϵ ja D . Tiheys on $n_\rho = 1$. Parametriavaruuden projektiot ovat (a) $D = 3$, $\epsilon = 1$, (b) $D = 1$, $\epsilon = 2$ ja (c) $N = 200$. Simulaatioajan yksikkö on $[t_d] = \eta(n_\rho[\text{m}])^{\epsilon/D} t$, missä t on todellinen aika. Jokaisella parametrijoukon (N, D, ϵ) arvolla on olemassa 100 datapistettä. Hyvä approksimaatio parametrin t_d funktionaalisesta käytöksestä τ_d löytyy kaavasta (6.23). Datapisteiden hajonta levenee, kun N pienenee (a,b) ja sekä D että ϵ kasvavat.

lisestä käytöksestä antaa funktio

$$\begin{aligned} \tau_d = & \eta^{-1} n_\rho^{-\epsilon/D} \left(\frac{N}{200} \right)^{-0.085(D-1)/\epsilon} \times \left(0.29e^{-0.79(D-1)\epsilon^{1/4} - 0.13(\epsilon-3.4)^2} \right. \\ & \left. + 0.17 \frac{\epsilon - 1}{2^\epsilon} ((D-2)^2)^{0.19(\epsilon-1)} + \frac{0.03}{\epsilon^{1/2}} + 0.07 \right). \end{aligned} \quad (6.23)$$

Oletan, että funktion (6.23) mallia kuvaava tarkkuus rajoittuu tarkastelemani parametriavaruuden lähialueeseen, sillä sovituksen muoto on erittäin kompleksinen eikä se todennäköisesti kuvaa systeemin fysikaalista käyttäytymistä riittävän tarkasti – se on vain havaittuun käytökseen tehty sovitus, mikä on havainnollistettu kuvassa 6.5. Lisäksi datapisteiden hajonta kasvaa paikkaulottuvuuksien D lisääntyessä ja potentiaaliparametrin ϵ kasvaessa. Ilmeisin syy tähän on se, että $N = 200$ hiukkasta on edelleen liian vähän tarkan ja luotettavan analyysin tekemiseen lyhyen kantaman vuorovaikutuksien alueessa $\epsilon > 3$, mikäli hiukkasten määrä ulottuvuutta kohti pienenee liiaksi. Tulevaisuudessa tähän epäkohtaan voidaan helposti puuttua laskennallisen kapasiteetin kasvaessa. Dekoherenssiajan τ_d käytös hiukkasluvun N suhteen on sikäli luotettava, että muutamat yksittäiset simulaatiot suurilla hiukkasluvulla $N = 400$ ja $N = 800$ ovat vahvistaneet havaitun käytöksen, ja siksi, että hiukkasluku-riippuvaiset funktiot ovat yksinkertaisia ja faktoroituvat erilleen yhtälön

(6.23) kompleksisesta muodosta.

Huolimatta siitä, että yksittäistä parametriavaruuden pistettä kohti on vain sadan simulaation tuottamat datapisteet, ja huolimatta ulottuvuuksien D ja potentiaaliparametrin ϵ kasvuun liittyvistä tarkkuusongelmista, funktioiden $f(D, \epsilon)$ ja $\tau_d(N, n_\rho, \eta, \epsilon, D)$ käyttäytyminen on fyysikaalisesti relevanteissa tapauksissa melko luotettavaa. Seuraavaksi kokoan yhteen muutamia fyysikaalisesti mielenkiintoisia tuloksia:

- Dekoherenssiaika käyttäytyy $\tau_d \sim N^{-\text{const.}(D-1)/\epsilon}$ hiukkasluvun N suhteen. En tiedä, onko olemassa vakioarvoa, jota dekoherenssiaika lähestyy. Ainakaan käyttämilläni N :n arvoilla sen suuntaisia viitteitä ei ilmaantunut, mutta luotettavan vastauksen edellytyksenä on ainakin paria kertalukua suuremmilla N :n arvoilla tehtävät simulaatiot.

Lisäksi kyseisessä sovituksessa on $(D - 1)$. Onko tämä ”-1” mallin fyysikaalinen ominaisuus vai numeerisesta ratkaisemisesta nouseva tekijä? Epäilen jälkimmäistä, mutta en löytänyt riittävän hyvää sovitusta ilman tekijää ”-1”.

- Eksponentin $f(D, \epsilon)$ yläraja koherenssin vähenemisprofiilissa $\Xi(t) = \exp[-(t/\tau_d)^{f(D, \epsilon)}]$ on ~ 2 .
- Dekoherenssiajalla τ_d vaikuttaa olevan alaraja suhteessa systeemin ulottuvuuksiin D ja potentiaaliparametriin ϵ . Se on luokkaa ~ 0.07 simulaatioaikayksiköissä $\eta(n_\rho[\text{m}])^{\epsilon/D} t$ hiukkasluvulle $N = 200$.
- Dekoherenssiajan τ_d käytöksessä on havaittavissa kaksi toisistaan poikkeavaa trendiä parametriavaruudessa (D, ϵ) . Toinen trendeistä on Gaussin funktion oloinen huippu ($D = 1, \epsilon = 3.4$), ja toinen D :n ja ϵ :n kasvaessa käsiin räjähtävä ratkaisu. Oletan, että ainakin osa gaussisesta huipusta on mallin fyysikaalinen ominaisuus, mutta oletan myös, että suurin osa käsiin räjähtävästä ratkaisusta johtuu liian pienestä hiukkasmäärästä simulaatioissa.
- Sähkömagneettinen vuorovaikutus ($\epsilon = 1$) parametrien arvoilla $D = 3$, $N = 100$ ja $n_\rho = 10^{30} \text{ m}^{-3}$ tuottaa dekoherenssiajaksi $\tau_d = 4.3 \times 10^{-17} \text{ s}$ ja eksponentiksi $f(D, \epsilon) = 1.87$. Spin-spin-vuorovaikutus ($\epsilon = 3$) ja $\eta = 3.27 \times 10^{-26} \text{ m}^3 \text{ Hz}$ (${}^6\text{Li}$) muuten samoilla asetuksilla tuottaa dekoherenssiajaksi $\tau_d = 3.3 \times 10^{-5} \text{ s}$ ja eksponentiksi $f(D, \epsilon) = 0.80$. Puhtaan spin-spin-vuorovaikutuksen osalta koherenssin vähenemisen kokeellinen havaitseminen vaikuttaisi mahdolliselta vähäisen hiukkasmäärän muodostamassa systeemissä, mutta

vain jos hiukkaset on eristetty riittävän hyvin muista (vahvemmista) vuorovaikutusmuodoista, erityisesti sähkömagneettisesta vuorovaikutuksesta.

Vaikkakin dekoherenssiajan funktionaalisen muodon tarkka selvittäminen edellyttää huomattavasti suurempia laskennallisia resursseja, tämä esimerkinomainen koherenssin määritelmän soveltaminen on osoittanut, että esittämäni koherenssin määritelmä toimii ja että koherenssin väheneminen Heisenbergin mallissa (η/r^ϵ -tyyppisillä vuorovaikutuksilla) noudattaa profiilia $\Xi_{re}(t) = (1 - c) \exp[-(t/\tau_d)^f] + c$.

6.3 Dekoherenssi, ympäristö ja havaitsija

Dekoherenssitutkimuksissa esiintyy usein jompikumpi (tai molemmat) seuraavista harhakäsityksistä:

- Vain avoimissa systeemeissä tapahtuu dekoherenssia, eli dekoherenssia kokevan systeemin tulee olla kytkettynä ympäristöön, joka kuluttaa koherenssin systeemistä.
- Havaitsija ei voi mittaamalla seurata dekoherenssin aiheuttavaa ympäristöä.

Yleisen näkemyksen mukaan dekoherenssi tarkoittaa ympäristön kanssa kytketyn systeemin kvanttikoherenssin vähenemistä² (esim. [38, 106, 107, 108, 164, 183]). Tämä tarkoittaa, että vain avoimet systeemit voisivat kokea dekoherenssin. Kuten aikaisemmin on tullut ilmi, suljetun systeemin dekoherenssin tutkiminen on mielekäs tieteellinen ongelma (katso luvut 5 ja 6). Vaatimus ympäristön olemassaolosta tekee esimerkiksi kosmologisesti mielenkiintoisen koko fyysikaalisen todellisuuden (maailmankaikkeuden) laajuisen dekoherenssitutkimuksen mahdottomaksi, koska maailmankaikkeudellahan ei ole ympäristöä [104, 105, 108, 109].

Suljetun systeemin dekoherenssitutkimusta on yritetty oikeuttaa ajatuksella, että systeemin sisäiset vapausasteet voivat muodostaa ympäristön, mikäli niitä ei voi havaita³ (esim. [107]). Tämänkaltainen ajattelu-tapa johtaa kummalliseen havaitsijan aseman ylikorostumiseen ja tekee

²Dekoherenssia on määritelty seuraavasti: "the loss of quantum coherence suffered by a quantum system in contact with an environment" [107] ja "the process whereby the quantum-mechanical state of any macroscopic system is rapidly correlated with that of its environment in such a way that no measurement on the system alone (without a simultaneous measurement of the complete state of the environment) can demonstrate any interference between two quantum states of the system" [38]: Decoherence.

³"internal degrees of freedom may constitute an environment, if they cannot be followed by the observer" [107]

dekoherenssista ainoastaan epistemologisen ilmiön. On selvää, että dekoherenssilla on myös ontologisia seurauksia – muutenhan dekoherenssia samalla koejärjestelmällä mittaavat kaksi tutkimusryhmää saisivat keskenään kvantitatiivisesti erilaisia tuloksia, mikäli niiden teoreettiset epistemologiset lähtökohdat olisivat erilaiset.

Mietitään ympäristön ja havaitsijan asemaa aluksi kvalitatiivisesti tutuksi tulleiden spin $1/2$ -hiukkasten kautta. Olkoon suljetun systeemin kiinnostava alisysteemi hiukkanen, jonka spin on ylös x -kannassa (superpositio z -kannassa). Tämä hiukkanen on kytketty epäkiinnostavaan alisysteemiin (artikkelissa [107] tarkoitettuun sisäisten vapausasteiden muodostamaan ”ympäristöön”) spin $1/2$ -hiukkasia. Parin dekoherenssiajan kuluttua tehdään mittaus kiinnostavaan alisysteemiin spin x -kannassa. On selvää, ettei mittauksen pitäisi riippua siitä, voiko joku mielivaltainen havaitsija seurata muita spin $1/2$ -hiukkasia. Toisaalta taas artikkelista [107] otetun lainauksen looginen muoto on ”jos joku havaitsija voi tarkkailla epäkiinnostavan alisysteemin hiukkasten spinejä, niin tuolloin kiinnostava hiukkanen ei koe dekoherenssia, mutta jos taas kyseinen havaitsija ei voi tarkkailla epäkiinnostavien hiukkasten spinejä, niin tuolloin kiinnostava hiukkanen kokee dekoherenssin”.

Edellä esitetyn kvalitatiivisen argumentin tueksi voidaan tarvittaessa esittää seuraava muodollinen päättelyketju ja suora lasku. Olkoon suljetun systeemin alkutila

$$|\psi(0)\rangle = |\psi_S(0)\rangle \otimes |\psi_E(0)\rangle, \quad (6.24)$$

missä systeemi $|\psi_S(0)\rangle$ on alussa preparoitu superpositiotilaan, ja epäkiinnostava alisysteemi on alkutilassa

$$|\psi_E(0)\rangle = \prod_i |E\rangle_i. \quad (6.25)$$

Aikakehitysoperaattori U_{S+E} kuvaa alkutilan $|\psi(0)\rangle$ tilaksi

$$|\psi(t)\rangle = U_{S+E}|\psi(0)\rangle = |\psi_{S+E}\rangle. \quad (6.26)$$

Oletetaan nyt, että aikakehitysoperaattori U_{S+E} on seuraus sellaisista vuorovaikutuksista, joita kuvaava Hamiltonin operaattori on H_{S+E} , ja jotka aiheuttavat dekoherenssin systeemiin, eli systeemin (redusoitu) tiheysmatriisi diagonalisoituu vuorovaikutuksen H_{S+E} takia. Artikkelista [107] otettu jälkimmäinen lainaus sanoo formaalisti: ”Jos on myös olemassa havaitsija (jonka alkutila on vaikkapa $|O_0\rangle = \prod_j |C_0\rangle_j$), joka kykenee mittaamaan epäkiinnostavan alisysteemin vapausasteita (vaikkapa vuorovaikutuksella $H_M = \sum_i |C_i\rangle_i |E\rangle_i \otimes \langle E|_i \langle C_0|_i + h.c.$), niin tällöin systeemin

(reduoidun) tiheysmatriisin ei-diagonaalelementit eivät vähene”. Mutta vuorovaikutuksen H_M aikaansaama aikakehitysoperaattori U_M kuvaa epäkiinnostavan alisysteemin ja havaitsijan alkutilan $\prod_i |E\rangle_i \otimes \prod_j |C_0\rangle_j$ tilaksi $|EO\rangle = \prod_i |E\rangle_i |C_i\rangle$. Tila $|EO\rangle$ on täydellisesti lomittunut tila epäkiinnostavasta alisysteemistä ja havaitsijasta, ja kaiken lisäksi vuorovaikutus $H_{S+E} + H_M$ tuottaa täsmälleen samanlaisen systeemin dynamiikan kuin pelkkä epäkiinnostava alisysteemikin $|E\rangle$ vuorovaikutuksella H_{S+E} , mikäli systeemi ja epäkiinnostavan alisysteemin havaitsija eivät vuorovaikuta keskenään.

Tiheysmatriiseilla tarkasteltuna: alkutilan tiheysmatriisi on

$$\rho(0) = |\psi(0)\rangle\langle\psi(0)| = |\psi_S(0)\rangle\langle\psi_S(0)| \left(\prod_i \otimes |E_i\rangle\langle E_i| \right) \prod_j \otimes |C_0\rangle_j\langle C_0|_j. \quad (6.27)$$

Mikäli havaitsija ei tarkkaile epäkiinnostavaa alisysteemiä, on olemassa vain vuorovaikutus H_{S+E} , joka tuottaa tulokseksi tiheysmatriisin aikakehityksen

$$\rho(t) = |\psi_{S+E}\rangle\langle\psi_{S+E}| \otimes |O_0\rangle\langle O_0|. \quad (6.28)$$

Systeemin reduoitu tiheysmatriisi on nyt

$$\rho_S(t) = \text{Tr}_{E+O} (|\psi_{S+E}\rangle\langle\psi_{S+E}| \otimes |O_0\rangle\langle O_0|) = \text{Tr}_E (|\psi_{S+E}\rangle\langle\psi_{S+E}|), \quad (6.29)$$

jonka ei-diagonaalelementit siis pienenevät ajan kuluessa. Jos taas havaitsija O voi tarkkailla epäkiinnostavaa alisysteemiä (koko epäkiinnostavaa alisysteemiä vuorovaikutuksella H_M), niin nyt systeemin reduoitu tiheysmatriisi on

$$\rho_{S'}(t) = \text{Tr}_{EO} (|\psi_{S+EO}\rangle\langle\psi_{S+EO}|) = \rho_S(t). \quad (6.30)$$

Havaitsijan saamat mittaustulokset ovat olemassa samanaikaisesti kun systeemi on dekoherenssin kourissa – ne ovat

$$\rho_O = \text{Tr}_{S+E} (|\psi_{S+EO}\rangle\langle\psi_{S+EO}|). \quad (6.31)$$

Aikaisemmin käytetty spin $1/2$ -malli sopii hyvin esimerkiksi siitä, mistä tässä oikeasti on kysymys. Olkoon systeemin tila

$$|\psi_S\rangle = |\uparrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_z\rangle + |\downarrow_z\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+_S\rangle + |-_S\rangle), \quad (6.32)$$

epäkiinnostavan alisysteemin tila

$$|\psi_E\rangle = \prod_{i=1}^N \otimes (a_i |+_E\rangle_i + b_i |-_E\rangle_i) \quad (6.33)$$

ja epäkiinnostavaa alisysteemiä tarkkailevan mittalaitteen (tai havaitsijan) tila

$$|O_0\rangle = \prod_{j=N+1}^{2N} \otimes |+_o\rangle_j. \quad (6.34)$$

Systeemin ja epäkiinnostavan alisysteemin väliset vuorovaikutukset voidaan ilmaista Hamiltonin operaattorilla

$$H_{S+E} = \hbar \sum_{k=1}^N g_k \sigma_k^z \otimes \sigma^z \prod_{k'=1, \neq k}^N \otimes 1_{k'}, \quad (6.35)$$

missä g_k :t kuvaavat systeemin ja epäkiinnostavan alisysteemin k :nnen hiukkasen välistä vuorovaikutusta. Kertoimilla g_k ei ole suurta väliä lopputuloksen kannalta – oletetaan ensimmäisessä approksimaatiossa niiden olevan satunnaislukuja. Malli on samankaltainen kuin artikkelissa IV ja viitteessä [166] esitetty, paitsi että tässä mallissa on myös epäkiinnostavaa alisysteemiä tarkkaileva havaitsija. Epäkiinnostavan alisysteemin ja havaitsijan väliset vuorovaikutukset ovat:

$$H_{E+O} = \sum_{k=1}^N (|+_E\rangle_k |+_O\rangle_k \langle+_O|_k \langle+_E|_k + |-_E\rangle_k |-_O\rangle_k \langle+_O|_k \langle-_E|_k + h.c.) \delta(t'), \quad (6.36)$$

missä ajanhetki t' ilmaisee hetken, jolloin havaitsija mittaa epäkiinnostavan alisysteemin.

Helposti on todennettavissa, että alkutilasta $|\psi_S\rangle \otimes |\psi_E\rangle \otimes |O_0\rangle$ vuorovaikutuksella $H_{S+E} + H_{E+O}$ saatu systeemin redusoidun tiheysmatriisin aikakehitys on

$$\rho_S(t) = \frac{1}{2} |+_S\rangle \langle+_S| + \frac{1}{2} |-_S\rangle \langle-_S| + \left[\frac{1}{2} \prod_{k=1}^N (|a_k|^2 e^{-i2g_k t} + |b_k|^2 e^{i2g_k t} |+_S\rangle \langle-_S| + h.c.) \right], \quad (6.37)$$

eikä se riipu millään tavalla epäkiinnostavaan alisysteemiin kohdistuneen mittauksen ajankohdasta t' . Luonnollinen johtopäätös tästä on, että redusoidun tiheysmatriisin aikakehitys ei esitellyssä tapauksessa riipu siitä, mitataanko epäkiinnostavaa alisysteemiä vai ei, ja systeemi kokee dekoherenssin, vaikka havaitsija olisi kykenevä havaitsemaan koko epäkiinnostavan alisysteemin kaikki vapausasteet. Todellinen havaitsija suljetun systeemin sisällä ei estä dekoherenssia havaitsemalla vapausasteita suljetun systeemin sisällä. Dekoherenssi on dynaaminen tapahtuma, eikä se

ole mitenkään riippuvainen siitä teoreettisesta mahdollisuudesta, että joku mielivaltainen havaitsija havaitsisi joitain mielivaltaisia vapausasteita. Tämä on looginen totuus, joka pätee kaikkiin suljettuihin systeemeihin, myös fyysikaaliseen todellisuuteen tai ”maailmankaikkeuteen”.

Vielä spin-tapauksesta: Suljetun systeemin sisällä oleva havaitsija voi helposti havaita dekoherenssin etenemisen mittaamalla systeemiä spin x -kannassa, koska superpositio z -kannassa on x -kannassa *ylös*. Mikäli superpositio z -kannassa muuttuu statistiseksi sekatilaksi, niin tuolloin x -kannassa spin *alas* -mittaustuloksiakin alkaa esiintyä. Todettakoon, että esittämäni malli on yliyksinkertaistus, jonka tarkoitus ei ole mallintaa *täydellisesti* epäkiinnostavaan alisysteemiin liittyvää tarkkailua vaan lähinnä selvittää loogisia seurauksia. Mikäli havaitsija tekisi *realistisia* mittaustuloksia ”ympäristön” vapausasteisiin, niin todennäköisesti tällä olisi seurauksia systeemin dynamiikkaan – riippuen tietysti siitä, millainen mittausvuorovaikutus olisi kyseessä. Esimerkkitaapauksessa on valittu sellainen mittausvuorovaikutus, joka ei kontribuoi redusoidun tiheysmatriisiin dynamiikkaan, sillä tämä osoittaa hienosti tarkkaillun epäkiinnostavan alisysteemin (tai ympäristön) osan suljettujen systeemien dekoherenssitutkimuksessa.

Tässä luvussa esitetyn tarinan opetus on, että havaitsijan tai ympäristön roolin ylikorostumiselle ei ole mitään järkevää syytä dekoherenssitutkimuksessa, ja että tutkijan kannattaa olla kriittinen ympäristön ja havaitsijan osiin liittyviä kommentteja kohtaan. Havaitsijallakin on osansa dekoherenssitutkimuksessa, mutta loppujen lopuksi se on pieni sivuosa, minkä Älykäs Chinchilla luvussa 5.3 osoitti.

Tässä alaluvussa esitettyä mittausskeemaa käsitellään yksityiskohtaisemmin artikkelissa [2].

Luku 7

Lopuksi

Näin lopuksi lienee syytä koota yhteen mielestäni tärkeimmät matkan varrella kohdatut ajatukset ja opetukset ja miettiä niiden merkityksiä.

- Koherenssi on säilyvä suure.
- Filosofia ja terminologia ovat hyödyllisiä työkaluja teoreettiselle fyysikolle. Huonosti ja löysästi määritellyt käsitteet johtavat usein tilanteeseen, jossa osa tiedeyhteisöstä puhuu aidasta ja osa aidanseipäistä, vaikka kaikki käyttävätkin samaa käsitettä. Kvanttifysiikassa tätä on havaittu ainakin dekoherenssin ympärillä vellovissa ongelmissa, mutta myös väittelyt asiasta ”onko kvanttifysiikka determinististä vai ei” kuuluvat samaan kategoriaan. Lisäksi teoreettisten fyysikkojen tietämättömyys filosofiasta saattaa johtaa huonosti tehtyyn (kvantti)fysiikan filosofiaan, mistä osoituksena ovat kaikenlaiset ”kvanttifysiikan tulkinnat”. Tosin ”kvanttifysiikan tulkintojen” syntyyn ovat myös myötävaikuttaneet ne (fysiikan) filosofit, jotka eivät osaa kvanttifysiikkaa, joten filosofeillakin on paljon opittavaa fyysikoilta. Tieteenfilosofian tuntemus korreloi yleensä vahvasti sen kanssa, että tietää edellytykset sille, että jokin teoria on tieteellinen teoria. Kaikkien tieteentekijöiden tulisi tietää tieteellisen teorian tunnusmerkit, mutta erityisesti sellaisten teoreettisten alojen tutkijoiden, joiden alalla teoreettisen työn ja mittaustulosten välillä on syvä kuilu, jonka yli on vain harvoja ja kapeita siltoja.

Tämän tutkimuksen esitys kvanttifysiikan terminologiasta ja meta-teoriasta on suppea, mutta sen pitäisi olla riittävän tarkoituksenmukainen. Aihetta käsittelevä laajempi artikkeli [2] on työn alla.

- Itse koherenssiin liittyen kolme tärkeää huomiota:

(1) On olemassa kaksi erilaista koherenssityyppiä (kuten entropia-tyyppiä): idealistinen ja realistinen koherenssi. Idealistisen koherenssin tarkastelu edellyttää niin sanottua chinchilla-perspektiiviä, eli sitä, että ”arvataan oikein” fysikaalisen todellisuuden tila ja sen aikakehitys (mukaan luettuna kaikki mittalaitteet, havaitsijat ja muu), eikä olla vuorovaikutuksessa kyseisen fysikaalisen todellisuuden kanssa. Tällä tavalla tarkasteltuna suljetun systeemin idealistinen koherenssi ja entropia ovat liikevakioita, sillä fysikaalisen todellisuuden tila on aina puhdas tila. Realistisen koherenssin näkökulma saadaan aikaan karkeistamalla fysikaalisen todellisuuden tila, jolloin saadaan kuvatuksi fysikaalisen todellisuuden tapahtumat siten kuin fysikaalisen todellisuuden kanssa täysin korreloituneet havaitsijat ne havaitsevat. Mikäli fysikaalinen todellisuus (ja sitä kuvaava taustateoria) sisältää aitoja todennäköisyysilmiöitä, tämä kuvaus sisältää todennäköisyysamplitudeilla painotettuja vaihtoehtoja.

(2) On olemassa tapa, jolla koherenssi voidaan määrittää kantavektori-joukosta riippumattomalla tavalla.

(3) Rekoherenssin mahdollisuus ei tee dekoherenssia olemattomaksi. Mikäli dekoherenssi ymmärretään *reduoidun tiheysmatriisin ei-diagonaalielementtien vähenemisenä*, niin rekoherenssi on *reduoidun tiheysmatriisin ei-diagonaalielementtien kasvamista*. Kaikki äärelliset systeemit voivat kokea Poincarén paluun ja täten rekoherenssin, mutta se ei tarkoita, ettei niissä tapahtuisi dekoherenssia.

Nämä kolme huomiota puolustavat ajatusta, että deoherenssi on pätevä ja toimiva käsite kuvaamaan koherenssin vähenemiseen liittyviä ilmiöitä myös suljetuissa (ja äärellisissä) kvanttisysteemeissä.

- Esitän tässä tutkimuksessa toimivan ja täsmällisen tavan kvantifoida kvanttikoherenssi. Yleensä koherenssia lähestytään jonkin muun mahdollisesti kvantifioitavissa olevan mitan kautta, kuten dekoherenssiajan tai koherenssipituuden. Tämä lähestymistapa ei välttämättä riittävästi vastaa koherenssia koskeviin kysymyksiin – varsinkaan sellaisiin, jotka ovat muotoa ”kuinka paljon tietyssä systeemissä (tietyllä hetkellä) on koherenssia”. Lisäksi esittelen pari peruskiveä koherenssiteorialle. Toivon, että koherenssiteoria kehittyisi nopeasti, koska sen avulla parempi ymmärrys kvanttifysikaalisten systeemien käytöksestä vaikuttaa mahdolliselta.
- Koherenssiteorian ja kehittämäni kvantifioitavan koherenssin määritelmän Ξ avulla on mahdollista johtaa esimerkiksi dekoherenssiajan muoto (yksinkertainen esimerkkisysteemi esitelty artikkelis-

sa IV). Kiinnostava huomio tarkastelemaani yksinkertaiseen spin-systeemiin liittyen oli se, että vain harvoissa erikoistapauksissa koherenssin väheneminen tapahtui normaalina pidetyn eksponentiaalisen vähenemisen mukaan. Tämä havainto vahvistaa näkemystä, että yleisestikin ”luonnollisiin prosesseihin” liittyvä dekoherenssi on harvoin puhtaan eksponentiaalista.

Lisäksi koherenssin ymmärtämisen kautta avautuu mahdollisuus mitata epäsuorasti muutamia degeneroituneiden kvanttisysteemien ominaisuuksia, kuten hiukkasten sirontapituuksia ja kytkentävoimakkuuksia siten, että mitataan koherenssiin tai sen aikakehitykseen liittyviä asioita. Olisi erittäin mielenkiintoista tehdä uusiksi osa tähän asti tehdystä teoreettisesta Bose-kondensaattitutkimuksesta soveltaen artikkelissa III esiteltyä yksinkertaista mallia ympäristölle ja dekoherenssille ja katsoa, kuinka koherenssi käyttäytyy. Koherenssihan on se, joka mahdollistaa kvanttifysikaalisten systeemien kummallisen käytöksen, esimerkiksi fermionien kollektiivisen käytöksen (artikkelit I ja II). Voi hyvin olla, että havaitut mittaustulokset, jotka poikkeavat hieman dekoherenssittoman teorian ennusteista – ja joita on aikaisemmin kohdeltu mittaustuloksina tai –epätarkkuuksina – selittyvät heikkojen, aikaisemmin mallintamattomien vuorovaikutusten aiheuttamalla dekoherenssillä. Tämän asian tutkiminen johtaisi todennäköisesti parempaan ymmärrykseen kvanttifysikaalisista mittauksista, paremmin mallinnettuihin mittauksiin ja parempaan mittausteknologiaan. Mahdollisesti sovelluksia löytyy myös kvantti-informaation puolelta. Erityisesti keskinäinen lomittuminen $E = \Xi_{id} - \Xi_{re}$ voi olla hyödyllinen käsite kvantti-informaation tutkimuksessa.

- Raskaiden simulaatioiden käytännön toteutuksesta opin erityisesti sen, että mikäli tekee tieteellistä laskentaa kannettavalla tietokoneella (keittiön pöydällä), ei kannata jättää suklaalevyä muutamaksi tunniksi koneen ilmanpoistoaukon läheisyyteen.

Kirjallisuutta

- [1] E. Schrödinger (1935). *Die gegenwärtige Situation in der Quantenmechanik*. Die Naturwissenschaften **23**, 807-812, 823-828, 844-849.
- [2] Alia Dannenberg, Riina Kosunen ja Anna Dannenberg (2011). *Understanding quantum coherence: metatheory and coherent terminology*. Julkaisematon.
- [3] J. K. Beatty and E. Young (2007). *Planet*. Teoksessa AccessScience@McGraw-Hill, <http://www.accessscience.com>, DOI 10.1036/1097-8542.521900.
- [4] J. Javanainen, M. Koštrun, Y. Zheng, A. Carmichael, U. Shrestha, P. Meinel, M. Mackie, O. Dannenberg ja K.-A. Suominen (2004). *Collective Molecule Formation in a Degenerate Fermi Gas via a Feshbach Resonance*. Physical Review Letters **92**, 200402.
- [5] M. Mackie, O. Dannenberg, J. Piilo, K.-A. Suominen ja J. Javanainen (2004). *New directions in degenerate dipolar molecules via collective association*. European Physical Journal D **31**, 273.
- [6] W. G. Pollard (2007). *Physics*. Teoksessa AccessScience@McGraw-Hill, <http://www.accessscience.com>, DOI 10.1036/1097-8542.514300.
- [7] M. Bunge (2007). *Scientific methods*. Teoksessa AccessScience@McGraw-Hill, <http://www.accessscience.com>, DOI 10.1036/1097-8542.607200.
- [8] L. M. Blumenthal ja G. Cherlin (2007). *Logic*. Teoksessa AccessScience@McGraw-Hill, <http://www.accessscience.com>, DOI 10.1036/1097-8542.389200.
- [9] S. E. Stumpf (1989). *Philosophy: history & problems* (4. painos). New York: Mc Graw-Hill Book Company.

- [10] P. V. Spade (2006). *William of Ockham*. Teoksessa The Stanford Encyclopedia of Philosophy (Fall 2006 Edition), toim. E. N. Zalta, <http://plato.stanford.edu/archives/fall2006/entries/ockham/>.
- [11] A. Franklin (2007). *Experiment in Physics*. Teoksessa The Stanford Encyclopedia of Philosophy (Fall 2007 Edition), toim. E. N. Zalta. <http://plato.stanford.edu/archives/fall2007/entries/physics-experiment/>.
- [12] D. Stoljar (2005). *Physicalism*. Teoksessa The Stanford Encyclopedia of Philosophy (Winter 2005 Edition), toim. E. N. Zalta. <http://plato.stanford.edu/archives/win2005/entries/physicalism/>.
- [13] K. R. Popper (1963). *Conjectures and refutations: the growth of scientific knowledge* (erityisesti luku 10). London: Routledge and Kegan Paul.
- [14] M. Bunge (2007). *Physical law*. Teoksessa AccessScience@McGraw-Hill, <http://www.accessscience.com>, DOI 10.1036/1097-8542.513800.
- [15] M. David (2005). *The Correspondence Theory of Truth*. Teoksessa The Stanford Encyclopedia of Philosophy (Fall 2005 Edition), toim. E. N. Zalta. <http://plato.stanford.edu/archives/fall2005/entries/truth-correspondence/>.
- [16] J. O. Young (2001). *The Coherence Theory of Truth*. Teoksessa The Stanford Encyclopedia of Philosophy (Summer 2001 Edition), toim. E. N. Zalta. <http://plato.stanford.edu/archives/sum2001/entries/truth-coherence/>.
- [17] R. Boyd (2002). *Scientific Realism*. Teoksessa The Stanford Encyclopedia of Philosophy (Summer 2002 Edition), toim. E. N. Zalta. <http://plato.stanford.edu/archives/sum2002/entries/scientific-realism/>.
- [18] T. Uebel (2006). *Vienna Circle*. Teoksessa The Stanford Encyclopedia of Philosophy (Fall 2006 Edition), toim. E. N. Zalta. <http://plato.stanford.edu/archives/fall2006/entries/vienna-circle/>.
- [19] R. Omnès (1994). *The Interpretation of Quantum Mechanics*. Princeton: Princeton University Press.
- [20] G. Berkeley (1710). *A treatise concerning the principles of human knowledge*. Uusittu painos (1957). Indianapolis: Bobbs-Merrill.

- [21] G. Berkeley (1713). *Three dialogues between Hylas and Philonous: In opposition to sceptics and atheists*. Uusittu painos (1954). Indianapolis: Bobbs-Merrill.
- [22] D. Dieks (1992). *Continuous wave function and discrete physical properties*. In: Erwin Schrödinger: philosophy and the birth of quantum mechanics. Gif-sur-Yvette Cedex, France: Editions Frontieres.
- [23] I. Niiniluoto (2002). *Johdatus tieteenfilosofiaan: käsittelen- ja teorianmuodostus*. Keuruu: Otava.
- [24] M. R. Cohen ja E. Nagel (1934). *An introduction to logic and scientific method*. London: Routledge and Kegan Paul.
- [25] E. Wüster (1979). *Einführung in die allgemeine Terminologielehre und terminologische Lexikographie*, 2 vol. New York: Springer.
- [26] H. Suonuuti (1997). *Guide to terminology*. Helsinki: Tekniikan sanastokeskus.
- [27] T. Horgan (1983). *Supervenience and Microphysics*. Pacific Philosophical Quarterly **63**, 29-43.
- [28] D. Lewis (1983). *New Work for a Theory of Universals*. Australasian Journal of Philosophy, **61**(4), 343.
- [29] D. Lewis (1986). *On the Plurality of Worlds*. Oxford: Blackwell.
- [30] R. Smullyan (1978). *What is the name of this book?* New York: Prentice-Hall. *Mikä tämän kirjan nimi on?* Suomentanut H. Salminen (1999). Helsinki: Terra Cognita.
- [31] R. Juti (2001). *Johdatus metafysiikkaan*. Helsinki: Gaudeamus.
- [32] K. Gödel (1931). *Über formal unentscheidbare Sätze der Principia Mathematica und verwandter Systeme, I*. Monatshefte für Mathematik und Physik, **38**, 173; Englanninkielinen käännös teoksessa From Frege to Gödel: A Source Book in Mathematical Logic, 1879-1931, toim. J. van Heijenoort. Harvard: Harvard University Press (2002).
- [33] R. M. Smullyan (2007). *Gödel's theorem*. Teoksessa AccessScience@McGraw-Hill, <http://www.accessscience.com>, DOI 10.1036/1097-8542.757437.

- [34] J. Renn, T. Sauer ja J. Stachel (1997). *The Origin of Gravitational Lensing: A Postscript to Einstein's 1936 Science paper*. Science **275**, 184;
P. Schneider, J. Ehlers ja E. E. Falco (1992). *Gravitational Lenses*. Berlin: Springer.
- [35] L. Sklar (1974). *Space, Time, and Spacetime*, pääasiassa luku V. California: University of California Press.
- [36] E. Castellani (2003). *Symmetry and equivalence*. Teoksessa *Symmetries in Physics: Philosophical Reflections*, toim. K. Brading and E. Castellani. Cambridge: Cambridge University Press.
- [37] K. Brading ja E. Castellani (2008). *Symmetry and Symmetry Breaking*. Teoksessa *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Spring 2008 Edition), toim. E. N. Zalta. <http://plato.stanford.edu/archives/spr2008/entries/symmetry-breaking/>.
- [38] *McGraw-Hill Dictionary of Scientific and Technical Terms*, 10. painos. AccessScience@McGraw-Hill, <http://www.accessscience.com> (28 syyskuuta 2008).
- [39] J. Locke (1690). *An essay concerning human understanding*. Uusittu painos (1959). New York: Dover.
- [40] J. Preskill (1998). *Quantum Information and Computation (lecture notes for physics 229)*.
<http://www.theory.caltech.edu/~preskill/ph229>.
- [41] E. Noether (1918). *Invariante Variationsprobleme*. Nachr. d. König. Gesellsch. d. Wiss. zu Göttingen, Math-phys. Klasse, 235-257;
Englanninkielinen käännös teoksessa M. A. Tavel (1971). *Transport Theory and Statistical Physics* **1**, 183.
- [42] G. Brida, E. Cagliero, G. Falzetta, M. Genovese, M. Gramegna ja C. Novero (2002). *Experimental realization of a first test of de Broglie-Bohm theory*. Journal of Physics B **35**, 4751.
- [43] G. Brida, E. Cagliero, M. Genovese ja M. Gramegna (2004). *Reply to Comment on 'Experimental realization of a first test of de Broglie-Bohm theory'*. Journal of Physics B **37**, 3781.
- [44] M. Genovese, G. Brida, M. Gramegna, F. Piacentini, E. Predazzi ja I. Ruo-Berchera (2007). *Experimental tests of hidden variable theories*

from *dBB* to stochastic electrodynamics. *Journal of Physics: Conference Series* **67**, 012047.

- [45] L. Sklar (1993). *Physics and Chance: Philosophical Issues in the Foundations of Statistical Mechanics*. Cambridge: Cambridge University Press.
- [46] W. H. Zurek (2007). *Superposition principle*. Teoksessa AccessScience@McGraw-Hill, <http://www.accessscience.com>, DOI 10.1036/1097-8542.669800.
- [47] A. Gallois (2005). *Identity Through Time*. Teoksessa The Stanford Encyclopedia of Philosophy (Spring 2005 Edition), toim. E. N. Zalta. <http://plato.stanford.edu/archives/spr2005/entries/identity-time/>.
- [48] J. D. Bekenstein (1981a). *Universal upper bound on the entropy-to-energy ratio for bounded systems*. *Physical Review D* **23**, 287.
- [49] J. D. Bekenstein (1981b). *Energy cost of information transfer*. *Physical Review Letters* **46**, 623.
- [50] J. D. Bekenstein (1984). *Entropy content and information flow in systems with limited energy*. *Physical Review D* **30**, 1669.
- [51] J.-W. Pan, D. Bouwmeester, M. Daniell, H. Weinfurter ja A. Zeilinger (2000). *Experimental test of quantum nonlocality in three-photon Greenberger-Horne-Zeilinger entanglement*. *Nature* **403**, 515.
- [52] S. Stenholm ja K.-A. Suominen (2005). *Quantum Approach to Informatics*. Hoboken NJ: John Wiley & Sons.
- [53] E. Schrödinger (1953). *What is matter?* *Scientific American* **189**, 52.
- [54] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollet ja R. G. Hulet (1995). *Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions*. *Physical Review Letters* **75**, 1687.
- [55] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman ja E. A. Cornell (1995). *Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor*. *Science* **269**, 198.
- [56] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn ja W. Ketterle (1995). *Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms*. *Physical Review Letters* **75**, 3969.

- [57] D. G. Fried, T. C. Killian, L. Willmann, D. Landhuis, S. C. Moss, D. Kleppner ja T. J. Greytak (1998). *Bose-Einstein Condensation of Atomic Hydrogen*. Physical Review Letters **81**, 3811.
- [58] F. P. D. Santos, J. Lonard, J. Wang, C. J. Barrelet, F. Perales, E. Rasel, C. S. Unnikrishnan, M. Leduc ja C. Cohen-Tannoudji (2001). *Bose-Einstein Condensation of Metastable Helium*. Physical Review Letters **86**, 3459.
- [59] A. Robert, O. Sirjean, A. Browaeys, J. Poupard, S. Nowak, S. Boiron, C. I. Westbrook ja A. Aspect (2001). *A Bose-Einstein Condensate of Metastable Atoms*. Science **292**, 461.
- [60] G. Modugno, G. Ferrari, G. Roati, R. J. Brecha, A. Simoni ja M. Inguscio (2001). *Bose-Einstein Condensation of Potassium Atoms by Sympathetic Cooling*. Science **294**, 1320.
- [61] S. L. Cornish, N. R. Claussen, J. L. Roberts, E. A. Cornell ja C. E. Wieman (2001). *Stable ^{85}Rb Bose-Einstein Condensates with Widely Tunable Interactions*. Physical Review Letters **85**, 1795.
- [62] T. Weber, J. Herbig, M. Mark, H.-C. Nägerl ja R. Grimm (2003). *Bose-Einstein Condensation of Cesium*. Science **299**, 232.
- [63] Y. Takasu, K. Maki, K. Komori, T. Takano, K. Honda, M. Kumakura, T. Yabuzaki ja Y. Takahashi (2003). *Spin-Singlet Bose-Einstein Condensation of Two-Electron Atoms*. Physical Review Letters **91**, 040404.
- [64] A. Griesmaier, J. Werner, S. Hensler, J. Stuhler ja T. Pfau (2005). *Bose-Einstein Condensation of Chromium*. Physical Review Letters **94**, 160401.
- [65] M. R. Andrews, C. G. Townsend, H.-J. Miesner, D. S. Durfee, D. M. Kurn ja W. Ketterle (1997). *Observation of Interference Between Two Bose Condensates*. Science **275**, 637.
- [66] J. Javanainen ja M. Mackie (1999). *Coherent photoassociation of a Bose-Einstein condensate*. Physical Review A **59**, R3186.
- [67] D. J. Heinzen, R. Wynar, P. D. Drummond ja K. V. Kheruntsyan (2000). *Superchemistry: Dynamics of Coupled Atomic and Molecular Bose-Einstein Condensates*. Physical Review Letters **84**, 5029.

- [68] A. Vardi, V. A. Yurovsky ja J. R. Anglin (2001). *Quantum effects on the dynamics of a two-mode atom-molecule Bose-Einstein condensate*. Physical Review A **64**, 063611.
- [69] M. R. Matthews, B. P. Anderson, P. C. Haljan, D. S. Hall, C. E. Wieman ja E. A. Cornell (1999). *Vortices in a Bose-Einstein Condensate*. Physical Review Letters **83**, 2498.
- [70] J. R. Abo-Shaeer, C. Raman, J. M. Vogels ja W. Ketterle (2001). *Observation of Vortex Lattices in Bose-Einstein Condensates*. Science **292**, 476.
- [71] M. W. Zwierlein, J. R. Abo-Shaeer, A. Schirotzek, C. H. Schunck ja W. Ketterle (2005). *Vortices and superfluidity in a strongly interacting Fermi gas*. Nature **435** 1047.
- [72] P. D. Drummond, K. V. Kheruntsyan ja H. He (1998). *Coherent Molecular Solitons in Bose-Einstein Condensates*. Physical Review Letters **81**, 3055.
- [73] B. P. Anderson, P. C. Haljan, C. A. Regal, D. L. Feder, L. A. Collins, C. W. Clark ja E. A. Cornell (2001). *Watching Dark Solitons Decay into Vortex Rings in a Bose-Einstein Condensate*. Physical Review Letters **86**, 2926.
- [74] E. Cartlidge (2002). *Tantalizing evidence for molecular condensation*. Physics World, May 30, 2002.
- [75] M. Koštrun, M. Mackie, R. Côté ja J. Javanainen (2000). *Theory of coherent photoassociation of a Bose-Einstein condensate*. Physical Review A **62**, 063616.
- [76] S. Jochim, M. Bartenstein, A. Altmeyer, G. Hendl, S. Riedl, C. Chin, J. H. Denschlag ja R. Grimm (2003). *Bose-Einstein Condensation of Molecules*. Science **302**, 2101.
- [77] M. Greiner, C. A. Regal ja D. S. Jin (2003). *Emergence of a molecular Bose-Einstein condensate from a Fermi gas*. Nature **426** 537.
- [78] M. W. Zwierlein, C. A. Stan, C. H. Schunck, S. M. F. Raupach, S. Gupta, Z. Hadzibabic ja W. Ketterle (2003). *Observation of Bose-Einstein Condensation of Molecules*. Physical Review Letters **91**, 250401.

- [79] D. J. Harter, P. Narum, M. G. Raymer ja R. W. Boyd (1981). *Four-Wave Parametric Amplification of Rabi Sidebands in Sodium*. Physical Review Letters **46**, 1192.
- [80] P. S. Julienne, K. Burnett, Y. B. Band ja W. C. Stwalley (1998). *Stimulated Raman molecule production in Bose-Einstein condensates*. Physical Review A **58**, R797.
- [81] J. Weiner, V. S. Bagnato, S. Zilio ja P. S. Julienne (1999). *Experiments and theory in cold and ultracold collisions*. Reviews of Modern Physics **71**, 1.
- [82] J. J. Hope ja M. K. Olsen (2001). *Quantum Superchemistry: Dynamical Quantum Effects in Coupled Atomic and Molecular Bose-Einstein Condensates*. Physical Review Letters **86**, 3220.
- [83] J. Javanainen ja M. Mackie (2002). *Rate Limit for Photoassociation of a Bose-Einstein Condensate*. Physical Review Letters **88**, 090403.
- [84] K. Góral, M. Gajda ja K. Rzȃzewski (2001). *Multimode Dynamics of a Coupled Ultracold Atomic-Molecular System*. Physical Review Letters **86**, 1397.
- [85] M. Holland, J. Park ja R. Walser (2001). *Formation of Pairing Fields in Resonantly Coupled Atomic and Molecular Bose-Einstein Condensates*. Physical Review Letters **86**, 1915.
- [86] L. Allen ja J. H. Eberly (1975). *Optical Resonance and Two-Level Atoms*. New York: Wiley.
- [87] R. Dum, J. I. Cirac M. Lewenstein ja P. Zoller (1998). *Creation of Dark Solitons and Vortices in Bose-Einstein Condensates*. Physical Review Letters **80**, 2972.
- [88] J. Calsamiglia, M. Mackie ja K.-A. Suominen (2001). *Superposition of Macroscopic Numbers of Atoms and Molecules*. Physical Review Letters **87**, 160403.
- [89] J. Katriel ja N. Moiseyev (1983). *Approximate and exact treatments of second-harmonic generation: Regular vs "stochastic" behavior*. Journal of Chemical Physics **78**, 876.
- [90] B. Yurke ja D. Stoler (1986). *Generating Quantum Mechanical Superpositions of Macroscopically Distinguishable States via Amplitude Dispersion*. Physical Review Letters **57**, 13.

- [91] B. Yurke ja D. Stoler (1987). *Quantum behavior of a four-wave mixer operated in a nonlinear regime*. Physical Review A **35**, 4846.
- [92] D. F. Walls ja C. T. Tindle (1972). *Nonlinear quantum effects in optics*. Journal of Physics A **5**, 534.
- [93] A. G. Truscott, K. E. Strecker, W. I. McAlexander, G. B. Partridge ja R. G. Hulet (2001). *Observation of Fermi Pressure in a Gas of Trapped Atoms*. Science **291**, 2570.
- [94] F. Schreck, G. Ferrari, K. L. Corwin, J. Cubizolles, L. Khaykovich, M.-O. Mewes ja C. Salomon (2001). *Sympathetic cooling of bosonic and fermionic lithium gases towards quantum degeneracy*. Physical Review A **64**, 011402(R).
- [95] G. Modugno, G. Roati, F. Riboli, F. Ferlaino, R. J. Brecha ja M. Inguscio (2002). *Collapse of a Degenerate Fermi Gas*. Science **297**, 2240.
- [96] H.-J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn, M. R. Andrews, D. S. Durfee, S. Inouye ja W. Ketterle (1998). *Bosonic Stimulation in the Formation of a Bose-Einstein Condensate*. Science **279**, 1005.
- [97] E. P. Wigner (1948). *On the Behavior of Cross Sections Near Thresholds*. Physical Review **73**, 1002.
- [98] K. M. Ervin (2001). *Experimental Techniques in Gas-Phase Ion Thermochemistry*. Chemical Review **101**, 391.
- [99] C. A. Regal, C. Ticknor, J. L. Bohn ja D. S. Jin (2003). *Creation of ultracold molecules from a Fermi gas of atoms*. Nature **424**, 47.
- [100] K. E. Strecker, G. B. Partridge ja R. G. Hulet (2003). *Conversion of an Atomic Fermi Gas to a Long-Lived Molecular Bose Gas*. Physical Review Letters **91**, 080406.
- [101] P. Marte, P. Zoller ja J. L. Hall (1991). *Coherent atomic mirrors and beam splitters by adiabatic passage in multilevel systems*. Physical Review A **44**, R4118.
- [102] N. V. Vitanov, K.-A. Suominen ja B. W. Shore (1999). *Creation of coherent atomic superpositions by fractional stimulated Raman adiabatic passage*. Journal of Physics B **32**, 4535.

- [103] A. O. Caldeira ja A. J. Leggett (1983). *Path integral approach to quantum Brownian motion*. Physica A **121**, 587;
A. O. Caldeira ja A. J. Leggett (1985). *Influence of damping on quantum interference: An exactly soluble model*. Physical Review A **31**, 1059.
- [104] W. G. Unruh ja W. H. Zurek (1989). *Reduction of a wave packet in quantum Brownian motion*. Physical Review D **40**, 1071.
- [105] W. H. Zurek (1991). *Decoherence and the transition from quantum to classical*. Physics Today **44**(10), 36.
- [106] B. L. Hu, J. P. Paz ja Y. Zhang (1992). *Quantum Brownian motion in a general environment: exact master equation with nonlocal dissipation and colored noise*. Physical Review D **45**, 2843.
- [107] J. R. Anglin, R. Laflamme, W. H. Zurek ja J. P. Paz (1995). *Decoherence and recoherence in an analogue of the black hole information paradox*. Physical Review D **52**, 2221.
- [108] M. Schlosshauer (2004). *Decoherence, the measurement problem, and interpretations of quantum mechanics*. Reviews of Modern Physics **76**, 1267.
- [109] M. Schlosshauer (2005). *Self-induced decoherence approach: Strong limitations on its validity in a simple spin bath model and on its general physical relevance*. Physical Review A **72**, 012109.
- [110] M. Brune, E. Hagley, J. Dreyer, X. Maître, A. Maali, C. Wunderlich, J.-M. Raimond ja S. Haroche (1996). *Observing the progressive decoherence of the "meter" in a quantum measurement*. Physical Review Letters **77**, 4887.
- [111] M. C. Nemes (2004). *Introduction: Experimental and Theoretical Status of Decoherence*. Teoksessa Decoherence and Entropy in Complex Systems, toim. H.-T. Elze. Heidelberg: Springer-Verlag; ja viitteen lähdeviitteet.
- [112] H. F. Dowker ja J. J. Halliwell (1992). *Quantum mechanics of history: The decoherence functional in quantum mechanics*. Physical Review D **46**, 1580.
- [113] M. Gell-Mann ja J. B. Hartle (1993). *Classical equations for quantum systems*. Physical Review D **47**, 3345.

- [114] T. A. Brun ja J. J. Halliwell (1996). *Decoherence of hydrodynamic histories: A simple spin model*. Physical Review D **54**, 2899.
- [115] T. A. Brun ja J. B. Hartle (1999). *Classical dynamics of the quantum harmonic chain*. Physical Review D **60**, 123503.
- [116] J. J. Halliwell (2004). *Some Recent Developments in the Decoherent Histories Approach to Quantum Theory*. In: Decoherence and Entropy in Complex Systems, edited by H.-T. Elze. Heidelberg: Springer-Verlag.
- [117] M. Castagnino ja R. Laura (1997). *Minimal irreversible quantum mechanics: Pure-state formalism*. Physical Review A **56**, 108;
M. Castagnino ja R. Laura (2000). *Functional Approach to Quantum Decoherence and the Classical Final Limit: The Mott and Cosmological Problems*. International Journal of Theoretical Physics **39**, 1737;
M. Castagnino ja R. Laura (2000). *Functional approach to quantum decoherence and the classical final limit*. Physical Review A **62**, 022107.
- [118] R. Laura ja M. Castagnino (1998). *Functional approach for quantum systems with continuous spectrum*. Physical Review E **57**, 3948;
R. Laura ja M. Castagnino (1998). *Minimal irreversible quantum mechanics: The mixed states and the diagonal singularity*. Physical Review A **57**, 4140.
- [119] M. Castagnino (1999). *The Classical Regime of a Quantum Universe Obtained Through a Functional Method*. International Journal of Theoretical Physics **38**, 1333.
- [120] R. Laura, M. Castagnino ja R. I. Betan (1999). *Perturbative method for generalized spectral decompositions*. Physica A **271**, 357.
- [121] M. Castagnino ja O. Lombardi (2003). *The Self-Induced Approach to Decoherence in Cosmology*. International Journal of Theoretical Physics **42**, 1281;
M. Castagnino ja O. Lombardi (2004). *Self-induced decoherence: a new approach*. Studies in History and Philosophy of Modern Physics **35**, 73;
M. Castagnino ja O. Lombardi (2005). *Decoherence time in self-induced decoherence*. Physical Review A **72**, 012102.
- [122] D. Dieks (1989). *Resolution of the measurement problem through decoherence of the quantum state*. Physics Letters A **142**, 439.
- [123] H. Krips (2007). *Measurement in Quantum Theory*. Teoksessa The Stanford Encyclopedia of Philosophy (Fall 2007 Edition), toim. E. N.

Zalta.

<http://plato.stanford.edu/archives/fall2007/entries/qt-measurement/>.

- [124] A. Byrne ja N. Hall (1999). *Chalmers on Consciousness and Quantum Mechanics*. *Philosophy of Science* **66**, 370.
- [125] G. Ghirardi (2007). *Collapse Theories*. Teoksessa *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Fall 2007 Edition), toim. E. N. Zalta.
<http://plato.stanford.edu/archives/fall2007/entries/qm-collapse/>.
- [126] S. Goldstein (1998). *Quantum Theory Without Observers*. *Physics Today* **51**(3), 42, **51**(4), 38.
- [127] M. Jammer (1974). *The Philosophy of Quantum Mechanics*. New York: Wiley.
- [128] H. Everett III (1957). "Relative State" Formalism of Quantum Mechanics. *Reviews of Modern Physics* **29**, 454; Uusintapainos teoksessa *The Many-Worlds Interpretation of Quantum Mechanics*, toim. B. de Witt ja R. N. Graham (1973). Princeton: Princeton University Press.
- [129] H. Everett III (1973). *The Theory of the Universal Wave Function*. Teoksessa *The Many-Worlds Interpretation of Quantum Mechanics*, toim. B. de Witt ja R. N. Graham. Princeton: Princeton University Press.
- [130] B. de Witt (1973). *The Many-Universes Interpretation of Quantum Mechanics*. Teoksessa *The Many-Worlds Interpretation of Quantum Mechanics*, toim. B. de Witt ja R. N. Graham. Princeton: Princeton University Press.
- [131] D. Deutsch (1997). *The Fabric of Reality*, London: The Penguin Press; *Todellisuuden rakenne* (suom. Kimmo Pietiläinen), Vaasa: Terra Cognita.
- [132] J. A. Barrett (2003). *Everett's Relative-State Formulation of Quantum Mechanics*. Teoksessa *The Stanford Encyclopedia of Philosophy* (Spring 2003 Edition), toim. E. N. Zalta.
<http://plato.stanford.edu/archives/spr2003/entries/qm-everett/>.
- [133] R. B. Griffiths (1984). *Consistent Histories and the Interpretation of Quantum Mechanics*. *Journal of Statistical Physics* **36**, 219.

- [134] R. Omnès (1988). *Logical Reformulation of Quantum Mechanics. I. Foundations*. Journal of Statistical Physics **53**, 893;
 R. Omnès (1988). *Logical Reformulation of Quantum Mechanics. II. Interferences and the Einstein-Podolsky-Rosen Experiment*. Journal of Statistical Physics **53**, 933;
 R. Omnès (1988). *Logical Reformulation of Quantum Mechanics. III. Classical Limit and Irreversibility*. Journal of Statistical Physics **53**, 957.
- [135] M. Gell-Mann ja J. B. Hartle (1990). *Quantum Mechanics in the Light of Quantum Cosmology*. Teoksessa Complexity, Entropy, and the Physics of Information, toim. W. Zurek. Reading: Addison-Wesley;
 Myös teoksessa Proceedings of the 3rd International Symposium on Quantum Mechanics in the Light of New Technology, toim. S. Kobayashi, H. Ezawa, Y. Murayama ja S. Nomura. Physical Society of Japan.
- [136] F. Dowker ja A. Kent (1996). *On the consistent histories approach to quantum mechanics*. Journal of Statistical Physics **82**, 1575.
- [137] A. Kent (1996). *Quasiclassical dynamics in a closed quantum system*. Physical Review A **54**, 4670.
- [138] A. Kent (1997). *Consistent sets yield contrary inferences in quantum theory*. Physical Review Letters **78**, 2874.
- [139] A. Bassi ja G. C. Ghirardi (1999). *Can the decoherent histories description of reality be considered satisfactory?* Physics Letters A **257**, 247.
- [140] M. Reed ja B. Simon (1975). *Fourier Analysis, Self-Adjointness*. New York: Academic Press.
- [141] M. Mackie (2003). *Anomalous Frequency Shift in the Photoassociation Spectrum of a Bose-Einstein Condensate*. Physical Review Letters **91**, 173004.
- [142] P. Naidon ja F. Masnou-Seeuws (2003). *Pair dynamics in the formation of molecules in a Bose-Einstein condensate*. Physical Review A **68**, 033612.
- [143] Y. P. Huang ja M. G. Moore (2006). *Creation, detection, and decoherence of macroscopic quantum superposition states in double-well Bose-Einstein condensates*. Physical Review A **73**, 023606.

- [144] P. Meystre ja M. Sargent III (1999). *Elements of Quantum Optics* (3rd edition). Heidelberg: Springer-Verlag.
- [145] D. F. Walls ja G. J. Milburn (1994). *Quantum Optics*. Heidelberg: Springer-Verlag.
- [146] H. J. Carmichael (1999). *Statistical Methods in Quantum Optics 1: Master Equations and Fokker-Planck Equations*. Heidelberg: Springer-Verlag.
- [147] H.-B. Breuer ja F. Petruccione (2002). *The Theory of Open Quantum Systems*. Oxford: Oxford University Press.
- [148] P. O. Fedichev, Yu. Kagan, G. V. Shlyapnikov ja J. T. M. Walraven (1996). *Influence of Nearly Resonant Light on the Scattering Length in Low-Temperature Atomic Gases*. *Physical Review Letters* **77**, 2913.
- [149] J. L. Bohn ja P. S. Julienne (1999). *Semianalytic theory of laser-assisted resonant cold collisions*. *Physical Review A* **60**, 414.
- [150] J. M. Gerton, B. J. Frew ja R.G. Hulet (2001). *Photoassociative frequency shift in a quantum degenerate gas*. *Physical Review A* **64**, 053410.
- [151] C. McKenzie, J. H. Denschlag, H. Häffner, A. Browaeys, L. E. E. de Araujo, F. K. Fatemi, K. M. Jones, J. E. Simsarian, D. Cho, A. Simoni, E. Tiesinga, P. S. Julienne, K. Helmerson, P. D. Lett, S. L. Rolston ja W. D. Phillips (2002). *Photoassociation of Sodium in a Bose-Einstein Condensate*. *Physical Review Letters* **88**, 120403.
- [152] I. D. Prodan, M. Pichler, M. Junker, R. G. Hulet ja J. L. Bohn (2003). *Intensity Dependence of Photoassociation in a Quantum Degenerate Atomic Gas*. *Physical Review Letters* **91**, 080402.
- [153] M. Mackie, A. Collin ja J. Javanainen (2005). *Comment on "Stimulated Raman adiabatic passage from an atomic to a molecular Bose-Einstein condensate"*. *Physical Review A* **71**, 017601;
P. D. Drummond, K. V. Kherunstyan, D. J. Heinzen ja R. Wyner (2005). *Reply to "Comment on 'Stimulated Raman adiabatic passage from an atomic to a molecular Bose-Einstein condensate'"*. *Physical Review A* **71**, 017602.
- [154] M. Mackie, K. Härkönen, A. Collin, K.-A. Suominen ja J. Javanainen (2004). *Improved efficiency of stimulated Raman adiabatic passage*

- in photoassociation of a Bose-Einstein condensate*. Physical Review A **70**, 013614.
- [155] P. D. Drummond, K. V. Kheruntsyan, D. J. Heinzen ja R. H. Wynar (2002). *Stimulated Raman adiabatic passage from an atomic to a molecular Bose-Einstein condensate*. Physical Review A **65**, 063619.
- [156] R. H. Wynar, R. S. Freeland, D. J. Han, C. Ryu ja D. J. Heinzen (2000). *Molecules in a Bose-Einstein Condensate*. Science **287**, 1016.
- [157] J. L. Bohn ja P. S. Julienne (1997). *Prospects for influencing scattering lengths with far-off-resonant light*. Physical Review A **56**, 1486.
- [158] F. K. Fatemi, K. M. Jones ja P. D. Lett (2000). *Observation of Optically Induced Feshbach Resonances in Collisions of Cold Atoms*. Physical Review Letters **85**, 4462.
- [159] M. Theis, G. Thalhammer, K. Winkler, M. Hellwig, G. Ruff, R. Grimm ja J. H. Denschlag (2004). *Tuning the Scattering Length with an Optically Induced Feshbach Resonance*. Physical Review Letters **93**, 123001.
- [160] G. Thalhammer, M. Theis, K. Winkler, R. Grimm ja J. H. Denschlag (2005). *Inducing an optical Feshbach resonance via stimulated Raman coupling*. Physical Review A **71**, 033403.
- [161] A. E. Leanhardt, T. A. Pasquini, M. Saba, A. Schirotzek, Y. Shin, D. Kielpinski, D. E. Pritchard ja W. Ketterle (2003). *Cooling Bose-Einstein Condensates Below 500 Picokelvin*. Science **301**, 1513.
- [162] D. A. R. Dalvit, J. Dziarmaga ja W. H. Zurek (2000). *Decoherence in Bose-Einstein condensates: Towards bigger and better Schrödinger cats*. Physical Review A **62**, 013607.
- [163] R. G. Winter ja A. M. Steinberg (2007). *Coherence*. Teoksessa AccessScience@McGraw-Hill, <http://www.accessscience.com>, DOI 10.1036/1097-8542.146900.
- [164] J. P. Paz, S. Habib ja W. H. Zurek (1993). *Reduction of the wave packet: Preferred observable and decoherence time scale*. Physical Review D **47**, 488.
- [165] W. H. Zurek (1981). *Pointer basis of quantum apparatus: Into what mixture does the wave packet collapse?* Physical Review D **24**, 1516.

- [166] W. H. Zurek (1982). *Environment-induced superselection rules*. Physical Review D **26**, 1862.
- [167] F. H. Gaioli, E. T. G. Alvarez ja J. Guevara (1997). *Quantum Brownian motion*. International Journal of Theoretical Physics **36**, 2167.
- [168] B. M. Garraway ja K.-A. Suominen (1995). *Wave packet dynamics: New physics and chemistry in femto-time*. Reports on Progress in Physics **58**, 365-419.
- [169] S. Lloyd (2002). *Computational Capacity of the Universe*. Physical Review Letters **88**, 237901.
- [170] H. B. G. Casimir ja D. Polder (1948). *The Influence of Retardation on the London-van der Waals Forces*. Physical Review **73**, 360.
- [171] S. K. Lamoreaux (1997). *Demonstration of the Casimir Force in the 0.6 to 6 μm Range*. Physical Review Letters **78**, 5;
S. K. Lamoreaux (1998). *Erratum: Demonstration of the Casimir Force in the 0.6 to 6 μm Range [Phys. Rev. Lett. 78, 5 (1997)]*. Physical Review Letters **81**, 5475.
- [172] D. M. Greenberger ja A. Ya'sin (1986). *Teoksessa New Techniques and Ideas in Quantum Measurement Theory*, toim. D. M. Greenberger. New York: New York Academy of Science.
- [173] P. Ehrenfest ja T. Ehrenfest (1959). *The Conceptual Foundations of the Statistical Approach in Mechanics*. Ithaca NY: Cornell University Press.
- [174] J. W. Gibbs (1960). *Elementary Principles in Statistical Mechanics*. New York: Dover.
- [175] R. Peierls (1979). *Surprises in theoretical physics*. Princeton: Princeton University Press.
- [176] M. Redhead (1995). *From Physics to Metaphysics*. Cambridge: Cambridge University Press.
- [177] S. Brush (2003). *Kinetic Theory of Gases*. London: Imperial College Press.
- [178] W. F. Jaep ja F. H. Rockett (2007). *Entropy*. Teoksessa AccessScience@ McGraw-Hill, <http://www.accessscience.com>, DOI 10.1036/1097-8542.235400.

- [179] L. Boltzmann (1896). *Entgegnung auf die wärmetheoretischen Betrachtungen des Hrn. E. Zermelo*. Annalen der Physik und Chemie **57**, 773; Englanninkielinen uusintapainos teoksessa [177], 393-402.
- [180] P. Jizba (2004). *Information Theory and Generalized Statistics*. Teoksessa Decoherence and Entropy in Complex Systems, toim. H.-T. Elze. Heidelberg: Springer-Verlag.
- [181] Y. S. Weinstein, C. Tsallis ja S. Lloyd (2004). *On the Emergence of Nonextensivity at the Edge of Quantum Chaos*. Teoksessa Decoherence and Entropy in Complex Systems, toim. H.-T. Elze. Heidelberg: Springer-Verlag.
- [182] J. S. Bell (1975). *On the wave packet reduction in the Coleman-Hepp model*. Helvetica Physica Acta **48**, 93-98.
- [183] J. P. Paz ja W. H. Zurek (1993). *Environment-induced decoherence, classicality, and consistency of quantum histories*. Physical Review D **48**, 2728.

ISBN 978-952-10-5328-3 (pdf version)
<http://ethesis.helsinki.fi>
Helsinki 2011
Helsingin yliopiston verkkojulkaisut