Семинар 4. Матрица плотности

4.1 Общие определения

Переход от системы, состоящей из одного кубита, к системе, состоящей из двух кубитов, содержит принципиальный шаг, приводящий к необходимости использования матрицы плотности (или оператора плотности) для описания такой составной системы.

В соответствии с идеологией квантовой механики, свойства любой системы определяются вектором состояния в Гильбертовом пространстве, при этом необходимо учесть все взаимодействия, которым подвержена рассматриваемая ситема. В этом смысле требуется построить вектор состояния всей Вселенной. Конечно, реальное описание систем ограничивается и пространственными рамками и выделением только части взаимодействий, существенных с физической точки зрения. Другими словами, из всей Вселенной "вырезается"небольшая часть, которая и подвергается изучению. Соответственно большая часть опускается в соответствии с определенными модельными допущениями. Однако квантовая теория приводит в этом случае к ряду следствий, которые прямо противоположны форумлировкам общей теории. Так при рассмотрении только части большой системы:

- состояния подсистем не являются лучами в Гильбертовом пространстве;
- измерения в подсистеме не являются ортогональным проектированием;
- эволюция подсистемы не определяется унитарными преобразованиями.

Рассмотрим для примера две бесконечно удаленные (т.е невзаимодействующие) системы, свойства которых задаются векторами состяний $|A\rangle$ и $|B\rangle$. Состояние объединенной системы, включающей как первую, так и вторую системы, хорошо определяется вектором состояния $|\Psi_{in}\rangle = |A\rangle \otimes |B\rangle$ в объединенном Гильбертовом пространстве. Сведем рассматриваемые системы воедино, в результате чего они получают возможность взаимодействовать друг с другом. Взаимодействие приведет к эволюции начального состояния $|\Psi_{in}\rangle$, в состояние $|\Psi\rangle$, зависящее от времени

$$|\Psi_{in}\rangle = |A\rangle \otimes |B\rangle \longrightarrow |\Psi(t)\rangle \,. \tag{4.1}$$

Эволюция — есть процесс преобразования линейными операторами вектора состояния снова в вектор состояния (не совпадающий с исходным). Разведем системы на бесконечные расстояния (т.е. прекратим их взаимодействие). Объединенная система будет определяться вектором состояния, который обозначим $|\Psi_{out}\rangle$

$$|\Psi_{in}\rangle = |A(\alpha)\rangle \otimes |B(\beta)\rangle \longrightarrow |\Psi_{out}(\alpha,\beta)\rangle \,. \tag{4.2}$$

Состояние $|\Psi_{out}\rangle$– зависит от переменных обоих подсистем. Учитывая, что набор начальных состояний $|A_n\rangle \otimes |B_n\rangle$ в объединенном Гильбертовом пространстве полный, состояние $|\Psi_{out}\rangle$ можно представить в виде:

$$|\Psi_{out}\rangle = \sum_{n,m} c_{nm}(\alpha,\beta)\, |A_n(\alpha)\rangle \otimes |B_m(\beta)\rangle \,. \tag{4.3}$$

В соответствии с принципом суперпозиции $|c_{nm}|^2$ дает вероятность нахождения системы A в состоянии $|A_n\rangle$ и одновременно системы B в состоянии $|B_m\rangle$ после взаимодействия. Другими словами, некоторое конкретное конечное состояние системы A, например, $|A_k\rangle$, коррелировано с конечными состояниями системы B. Это означает, что невозможно записать конечное состояние в виде прямого произведения состояний системы $|A\rangle$ и $|B\rangle$, $|\Psi_{out}\rangle \neq |A\rangle \otimes |B\rangle$, которые завесили бы только от переменных каждой системы.

Таким образом, формулируется утверждение, которое иногда называют **принципом несепарабельности**:

- если две системы взаимодействовали в прошлом, то в общем случае невозможно приписать один вектор состояния любой из двух подсистем.

Пусть, например, лишь одна система из двух (например, A) подвергается процессу измерения после взаимодействия. В результате система A будет обнаружена в состоянии, которое не является **чистым** состоянием. В этом случае говорят о **смешанных** состояниях. Можно сказать, что тот факт, что система B не подвергается процессу измерения, приводит к потере когерентности в системе A.

Рассмотрим систему из 2-х кубитов A и B, находящихся в некотором квантовом состоянии. Ортонормированный базис для кубитов A и B обозначим, соответственно $\{|0\rangle_A,\ |1\rangle_A\}$ и $\{|0\rangle_B,\ |1\rangle_B\}$. При этом над кубитом A производятся измерения, а кубит B – недоступен. Необходимо сформулировать принципы, которые позволят характеризовать результаты наблюдения кубита A.

Пусть, для примера, имеется двух-кубитовое состояние вида:

$$|\Psi\rangle_{AB} = a\,|0\rangle_A \otimes |0\rangle_B + b\,|1\rangle_A \otimes |1\rangle_B\,. \tag{4.4}$$

Это означает, что кубиты были подвержены некторому воздействию, приведшему к образованию состояния (4.4) и следовательно они скоррелированы. Так, если спроектировать состояние (4.4) на базис кубита A, то с вероятностью $|a|^2$ будет получен результат $|0\rangle_A$ и измерение приготовит состояние $|0\rangle_A \otimes |0\rangle_B$ из (4.4), а с вероятностью $|b|^2$ будет получен результат $|1\rangle_A$ с редукцией (4.4) в состояние $|1\rangle_A \otimes |1\rangle_B$.

Существенно, что если далее проводить измерения кубита B, то гарантировано с вероятностью равной единице, было бы обнаружено состояние $|0\rangle_B$, если превоначально обнаруженое состояние $|0\rangle_A$ и, соответственно, $|1\rangle_B$, если при измерении кубита A был получен результат $|1\rangle_B$.

В общем случае, действие самосопряженного оператора $\hat{F}$ только не кубит A в состоянии (4.4) определяется оператором $\hat{F}_A \otimes \hat{I}_B$, где $\hat{I}_B$ – единичный оператор, действующий на кубит B. Среднее значение наблюдаемой $\hat{F}$ в состоянии (4.4) есть:

$$\langle F\rangle = {}_{AB}\langle\Psi|\,\hat{F}_A \otimes \hat{I}_B\,|\,\Psi\rangle_{AB} = |a|^2\langle 0|\,F\,|\,0\rangle_A + |b|^2\langle 1|\,F\,|\,1\rangle_A. \tag{4.5}$$

Как видно это выражение отличается от вычисления среднего значения в чистом квантовом состоянии $\langle i|\,F\,|\,i\rangle$. Выражение (4.5) переписывают следующим образом:

$$\langle F\rangle_A = Sp(\hat{F}_A \cdot \hat{\varrho}_A), \tag{4.6}$$

где оператор ϱ_A определен соотношением

$$\varrho_A = |a|^2\,|0\rangle\,\langle 0|_A + |b|^2\,|1\rangle\,\langle 1|_A\,, \tag{4.7}$$

и называется оператором плотности для кубита. Из определения (4.7) ясно, что оператор ϱ обладает следующими свойствами:

- оператор ϱ— самосопряженный,
- собственные числа оператора ϱ неотрицательны,
- $Sp\,\varrho = 1$, так как $|\Psi\rangle$— нормировано.

Введенный способ описания части системы существенно отличается от описания когерентной суперпозиции состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$ для изолированного кубита и опирается на понятие ансамбля состояний.

Чтобы лучше понять суть разницы между чистыми и смешанными состояниями напомним результаты эксперимента Штерна-Герлаха для частиц со спином 1/2.

Рассмотрим пучок частиц со спином 1/2, проходящих через неоднородное магнитное поле, градиент которого направлен вдоль оси z. В общем случае пучок расщепляется на два, каждый из которых соответствует одному из возможных состояний спина $|0\rangle$ или $|1\rangle$. Если один из пучков удалить, то оставшиеся частицы будут находиться в состоянии, соответствующем лишь одному состоянию (рис. 4.1.)

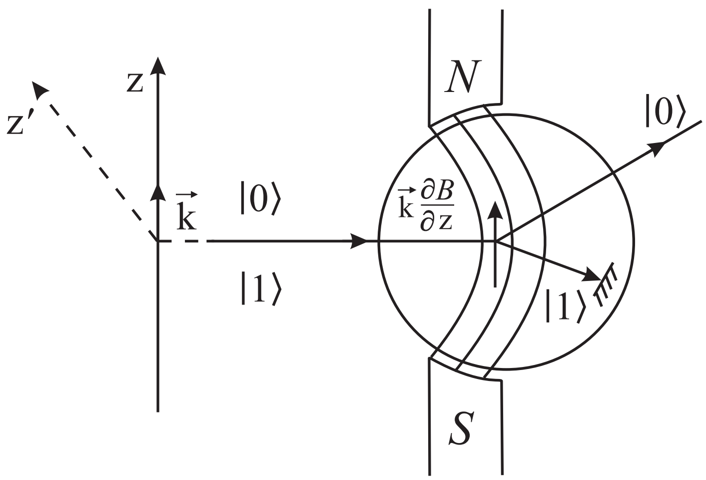

рис.4.1.

Если падающий пучок содержит только частицы состояния $|0\rangle$, то он пройдет сквозь установку (рис. 4.1.) без потери интенсивности. Если ось установки наклонить (изменить направление градиента поля), то только часть пучка пройдет фильтр и прошедший пучок будет менее интенсивный, чем падающий.

Если падающий пучок содержит спины ориентированные вдоль другой оси z', то путем поворота установки можно найти такую ориентацию магнита, при которой пропускается весь пучок.

Если в опыте Штерна-Герлаха можно найти такую ориентацию установки, при которой данный пучок полностью пропускается, то говорят о **чистом спиновом состоянии** пучка. **В чистом состоянии совместное состояние всех частиц представляется с помощью одного вектора состояния**. Представленный на рис. 4.1 фильтр можно рассматривать как способ приготовления пучка частиц в чистом состоянии.

Чистые спиновые состояния не являются наиболее общими состояниями, в которых может находиться ансамбль частиц. Пусть два пучка частиц независимо приготовлены в чистых состояниях $|0\rangle$ и $|1\rangle$, соответственно. Пусть пучок частиц с состоянием $|0\rangle$ состоит из n_1 частиц, а с состоянием $|1\rangle$ — из n_2 частиц. Направим объединенный пучок на фильтр Штерна-Герлаха, у которого будем менять направление градиента поля. Опыт показывает, что невозможно найти ориентацию фильтра, при которой через него проходит весь пучок полностью. Таким образом, объединенный пучок, по определению, не является чистым спиновым состоянием. Такие состояния называются **смешанными состояниями**.

Смешанное состояние невозможно описать с помощью одного вектора состояний, так как в противном случае нашлось бы направление фильтра, при котором весь пучок преодолеет его без ослабления.

Смешанное состояние нельзя представить и в виде линейной суперпозиции состояний $a\,|0\rangle + b\,|1\rangle$. Для построения такой суперпозиции необходимо знать модули коэффициентов a и b и их относительную фазу. Квадраты модулей коэффициентов в этом случае известны $|a|^2 = n_1/n$; $|b|^2 = n_2/n$; $n = n_1 + n_2$. Однако, так как оба пучка приготовлены независимо, между ними не существует определенного фазового соотношения, а без значения фазы нельзя построить суперпозицию состояний.

Существенное отличие чистых и смешанных состояний можно продемонстрировать и на ранее приведенном примере, в котором показано, что при измерении σ_x в однокубитовом состоянии $(|\uparrow_z\rangle + |\downarrow_z\rangle)/\sqrt{2}$ с вероятностью равной единице следует результат $|\uparrow_x\rangle$. А так как ансамбль спинов, в котором состояния $|\uparrow_z\rangle$ и $|\downarrow_z\rangle$ присутствуют равновероятно с вероятностью $1/2$ представляется оператором матрицы плотности вида (см. (4.7)):

$$\varrho = \frac{1}{2}\,|\uparrow_z\rangle\,\langle\uparrow_z| + \frac{1}{2}\,|\downarrow_z\rangle\,\langle\downarrow_z| = \frac{1}{2}, \tag{4.8}$$

проекция на состояние $|\uparrow_x\rangle$, в этом случае есть

$$\big\langle\, |\uparrow_x\rangle\,\langle\uparrow_x|\,\big\rangle = Sp(|\uparrow_x\rangle\,\langle\uparrow_x|\;\varrho) = \frac{1}{2}. \tag{4.9}$$

Что отличается от чистого состояния, в котором такая вероятность равна 1.

Обсуждение коррелированного двух-кубитового состояния $|\Psi\rangle_{AB}$ (4.4) тривиально обобщается на произвольное состояние любой системы, состоящей из двух подсистем A и B. Гильбертово пространство объединенных A и B состояний есть $H_A \otimes H_B$, где H_k – Гильбертовы пространства частей A и B, соответственно, с ортонормированными базисами $|n\rangle_A$ и $|m\rangle_B$. Таким образом, произвольное нормированное чистое состояние в пространстве $H_A \otimes H_B$ может быть представлено в виде:

$$|\Psi\rangle_{AB} = \sum_{n,m} a_{nm}\,|n\rangle_A \otimes |m\rangle_B\,, \tag{4.10}$$

$$\big\langle\Psi\,\big|\Psi\big\rangle_{AB} = \sum_{n,m} |a_{nm}|^2 = 1. \tag{4.11}$$

Среднее значение наблюдаемой $\hat{F}_A \otimes \hat{I}_B$, оператор которой действует только на подсистему A определяется равенством:

$$\big\langle\hat{F}\big\rangle_A = \big\langle\Psi\big|\,\hat{F}_A \otimes \hat{I}_B\,\big|\,\Psi\big\rangle_{AB} = \sum_{k,n,m} a^*_{km}a_{nm}\big\langle k\big|\,\hat{F}\,\big|\,n\big\rangle_A = Sp\,(\hat{F}_A\hat{\varrho}_A), \tag{4.12}$$

где

$$\hat{\varrho}_A \equiv Sp_B\,(|\Psi\rangle_{AB}\,{}_{AB}\langle\Psi|) = \sum_{n,m,k} a_{nm}a^*_{km}\,|n\rangle_A\,\langle k|_A\,. \tag{4.13}$$

Говорят, что оператор матрицы плотности подсистемы A получается путем вычисления Sp по подсистеме B.

На основании (4.13) можно установить, что оператор матрицы плотности подсистемы удовлетворяет следующим свойствам:

а. ϱ_A**— самосопряженный оператор** $\varrho_A = \varrho_A^\dagger$, что следует непосредственно из определения (4.13)

б. ϱ**—положительно определенный оператор**, т.е. собственные числа неотрицательны. Это утверждение следует из определения среднего значения $\hat{\varrho}_A$ в произвольном состоянии $|\ell\rangle$

$$\langle\ell|\,\hat{\varrho}_A\,|\,\ell\rangle = \sum_{n,m,k} a_{nm}a_{km}^*\langle\ell\,|n\rangle\langle k\,|\ell\rangle = \sum_m |a_{\ell m}|^2 \geqslant 0$$

в. $Sp\,\hat{\varrho}_A = 1$

Данное утверждение следует из условия нормировки состояния $|\Psi\rangle_{AB}$ (4.11).

Таким образом, если даже состояние целой системы является лучом в Гильбертовом пространстве, то состояние подсистемы в общем случае не является лучом в Гильбертовом пространстве, а является смесью состояний. В частном случае состояние подсистемы может оказаться лучом и в этом случае является чистым состоянием. Если состояние подсистемы является чистым состоянием $|\Psi\rangle_A$, тогда оператор матрицы плотности $\hat{\varrho}_A = |\Psi\rangle_{A\,A}\langle\Psi|$ является оператором проектирования. Матрица плотности чистого состояния является идемпотентным оператором $\hat{\varrho}^2 = \varrho$.

Так как оператор $\hat{\varrho}_A$ подсистемы самосопряженный, то он может быть приведен к диагональному виду:

$$\hat{\varrho}_A = \sum_n p_n\,|n\rangle\,\langle n|\,, \tag{4.14}$$

где $0 < p_n \leqslant 1$ и $\sum\limits_n p_n = 1$.

В общем случае (в смешанном состоянии) $\hat{\varrho}_A^2 \neq \varrho_A$ и

$$Sp\,\hat{\varrho}_A^2 = \sum_n p_n^2 < \sum_n p_n = 1. \tag{4.15}$$

Принято говорить, что $\hat{\varrho}_A$— есть некогерентная суперпозиция состояний $|n\rangle$, при этом некогерентность означает, что относительные фазы набора состояний $|n\rangle$ экспериментально неизвестны.

В базисе состояний, в котором $\hat{\varrho}_A$ диагональна, среднее значение любой наблюдаемой $\hat{F}$ может быть определено соотношением:

$$\langle\hat{F}\rangle = Sp\,\hat{F}\cdot\hat{\varrho} = \sum_n p_n\langle n|\,\hat{F}\,|\,n\rangle \tag{4.16}$$

Таким образом, как и прежде можно интерпретировать оператор $\hat{\varrho}$, как описание ансамбля чистых квантовых состояний, в которых состояние $|n\rangle$ присутствует с вероятностью p_n.

В общем случае, состояния A и B подсистем целой системы коррелированы или, еще говорят, являются **запутанными** (entangled) состояниями.

4.2 Эволюция оператора плотности.

Эволюция оператора плотности легко определяется в случае, когда две подсистемы A и B не связаны друг с другом. Гамильтониан в этом случае имеет вид:

$$\hat{H}_{AB} = \hat{H}_A \otimes \hat{I}_B + \hat{I}_A \otimes \hat{H}_B, \tag{4.17}$$

где $\hat{H}_A$ и $\hat{H}_B$– операторы, действующие в пространстве векторов состояний A и B, соответственно.

Оператор эволюции для объединенной системы в этом случае есть прямое произведение операторов эволюции векторов состояний систем A и B:

$$\hat{U}_{AB}(t) = U_A(t) \otimes U_B(t). \tag{4.18}$$

Вектор состояния объединенной системы в произвольный момент времени может быть представлен в виде:

$$\left|\Psi(t)\right\rangle_{AB} = \sum_{n,m} a_{nm} \left|n(t)\right\rangle_A \otimes \left|m(t)\right\rangle_B, \tag{4.19}$$

где векторы состояний

$$\left|n(t)\right\rangle_A = U_A(t)\left|n(0)\right\rangle_A, \qquad \left|m(t)\right\rangle_B = U_B(t)\left|m(0)\right\rangle_B, \tag{4.20}$$

определяют новый ортогональный базис, так как $U_A(t)$ и $U_B(t)$– унитарные операторы. Таким образом, оператор матрицы плотности подсистемы A есть

$$\hat{\varrho}_A(t) = \sum_{n,m,k} a_{nm}a^*_{km} \left|n(t)\right\rangle_{AA}\left\langle m(t)\right| = U_A(t)\varrho_A(0)U_A^\dagger(t) \tag{4.21}$$

В частном случае, в базисе состояний, в котором $\hat{\varrho}_A(0)$– диагональна, получим:

$$\hat{\varrho}_A(t) = \sum_n p_n\, U_A(t)\left|n(0)\right\rangle_A {}_A\left\langle n(0)\right| U_A^\dagger(t). \tag{4.22}$$

Если оператор Гамильтона $\hat{H}$ не зависит от времени, то

$$\hat{\varrho}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\hat{\varrho}(0)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right), \tag{4.23}$$

из которого следует уравнение:

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\varrho}}{\partial t} = \left[\hat{H}, \varrho\right]. \tag{4.24}$$

Данное уравнение часто называют уравнением Лиувилля, так как оно имеет вид совпадающий с уравнением движения в фазовом пространстве для функции распределения вероятности в классической механике.

Уравнение (4.22) справедливо только при выполнении условия (4.17). Более общий случай будет рассмотрен позднее.

4.3 Вектор поляризации. Спиновая матрица плотности.

Для детального описания чистых спиновых состояний вводится **вектор поляризации** $\vec{P}$, компоненты которого определяются как средние значения матриц Паули

$$P_i \equiv \langle \sigma_i \rangle; \quad i = x, y, z \text{ или } 1, 2, 3. \tag{4.25}$$

В s_z-представлении, с учетом явного вида матриц Паули получим для пучка частиц, находящихся в чистом $|0\rangle$ состоянии:

$$P_x = \langle 0 | \sigma_x | 0 \rangle = (1, 0) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \tag{4.26}$$
$$P_y = \langle 0 | \sigma_y | 0 \rangle = 0; \quad P_z = \langle 0 | \sigma_z | 0 \rangle = 1.$$

Аналогично для ансамбля частиц, находящихся в чистом состоянии $|1\rangle$:

$$P_x = \langle 1 | \sigma_x | 1 \rangle = 0; \quad P_y = \langle 1 | \sigma_y | 1 \rangle = 0; \quad P_z = \langle 1 | \sigma_z | 1 \rangle = -1. \tag{4.27}$$

В обоих случаях векторы поляризации имеют единичную длину, но направлены противоположно.

Рассмотрим теперь чистое нормированное однокубитовое состояние, являющееся суперпозицией состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$:

$$|\Psi\rangle = a_1 |0\rangle + a_2 |1\rangle \equiv \cos\frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\varphi} \sin\frac{\theta}{2} |1\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\varphi} \sin(\theta/2) \end{pmatrix} \tag{4.28}$$

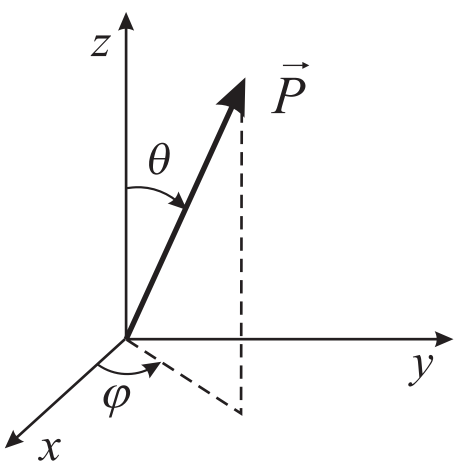

рис.4.2.

В этом случае получим для компонент вектора поляризации

$$P_x = \langle \Psi | \sigma_x | \Psi \rangle = \sin\theta \cos\varphi,$$
$$P_y = \langle \Psi | \sigma_y | \Psi \rangle = \sin\theta \sin\varphi, \tag{4.29}$$
$$P_z = \langle \Psi | \sigma_z | \Psi \rangle = \cos\theta.$$

Вектор поляризации, компоненты которого определяются выражениями (4.29) также имеют единичную длину, а параметры θ и φ являются углами сферической системы координат, определяющие направление $\vec{P}$ (см. рис. 4.2.). Если выбрать новую систему координат (x', y', z') так, что ось z' была параллельна $\vec{P}$, то выбирая ось z' в качестве оси квантования, получим в новой системе координат $P_{x'} = 0$, $P_{y'} = 0$, $P_{z'} = 1$. Если направить пучок через фильтр Штерна-Герлаха, расположенный параллельно вектору $\vec{P}$, то весь пучок пройдет через фильтр полностью.

Рассмотрим теперь вектор поляризации пучка спинов, приготовленного из двух пучков, в которых n_1 частиц приготовлены в состоянии $|0\rangle$, а n_2 в состоянии $|1\rangle$ независимо друг от друга. В соответствии с (4.16)

$$P_i = \langle \sigma_i \rangle = Sp\, \hat{F} \hat{\varrho} = p_1 \langle 0 | \sigma_i | 0 \rangle + p_2 \langle 1 | \sigma_i | 1 \rangle, \tag{4.30}$$

где $p_1 = n_1/n$, $p_2 = n_2/n$, $n = n_1 + n_2$. Вычисления P_i по (4.30) приводят к следующему результату:

$$P_x = 0, \quad P_y = 0, \quad P_z = p_1 - p_2 = (n_1 - n_2)/n. \tag{4.31}$$

Как видно длина вектора поляризации меньше единицы и пропорциональна разности числа спинов в состояниях $|0\rangle$ и $|1\rangle$.

В общем случае, когда пучок приготовлен путем смешивания n_A частиц в состоянии $|\Psi_A\rangle$ см. (4.28) и n_B частиц в состоянии $|\Psi_B\rangle$, компоненты вектора поляризации равны:

$$P_i = p_A \left\langle \Psi_A \right| \sigma_i \left| \Psi_A \right\rangle + p_B \left\langle \Psi_B \right| \sigma_i \left| \Psi_B \right\rangle = p_A P_i^A + p_B P_i^B, \ i = 1, 2, 3. \tag{4.32}$$

Здесь $p_A = n_A/n$; $p_B = n_B/n$; $n = n_A + n_B$, а P_i^A и P_i^B определяются выражением (4.29). Соотношение (4.32) в векторном виде есть:

$$\vec{P} = p_A \vec{P}^A + p_B \vec{P}^B, \tag{4.33}$$

при этом $|\vec{P}^A| = |\vec{P}^B| = 1$. Модуль вектора $\vec{P}$ в (4.33) определяется соотношением:

$$\begin{aligned} |\vec{P}| = \sqrt{P^2} = \sqrt{p_A^2 + 2p_A p_B \, (\vec{P}^A \cdot \vec{P}^B) + p_B^2} \leqslant \\ \leqslant \sqrt{p_A^2 + 2p_A p_B + p_B^2} = \sqrt{(p_A + p_B)^2} = \sqrt{1} = 1. \end{aligned} \tag{4.34}$$

Таким образом, длина вектора поляризации системы частиц, находящихся в смешанном состоянии удовлетворяет условию:

$$0 \leqslant |\vec{P}| \leqslant 1. \tag{4.35}$$

Максимально возможное значение $|\vec{P}| = 1$ достигается, когда пучок находится в чистом состоянии, а для смешанных состояний $|\vec{P}| < 1$.

Спиновая матрица плотности является двумерной эрмитовой матрицей, которую можно представить в виде линейной комбинации единичной 2×2 матрицы и матриц Паули σ_i:

$$\varrho = aI + \sum_{k=1}^{3} b_k \sigma_k. \tag{4.36}$$

В этом выражении коэффициенты a, b_1, b_2, b_3 подлежат определению. Учитывая, что $Sp\,\varrho = 1$, получим $a = 1/2$. Умножая (4.36) на σ_i и вычисляя $Sp\,\varrho\sigma_i$, получим:

$$Sp\,\varrho\sigma_i \equiv \langle \sigma_i \rangle \equiv P_i = \sum_{k=1}^{3} b_k \, Sp\,(\sigma_i \sigma_k) = \sum_{k=1}^{3} b_k \cdot 2\delta_{ik} = 2b_i, \ i = 1, 2, 3 \tag{4.37}$$

так как с учетом свойств матриц Паули $Sp\,(\sigma_i \sigma_k) = 2\delta_{ik}$. Таким образом, $b_i = P_i/2$. В результате вид спиновой матрицы плотности есть:

$$\varrho = \frac{1}{2}\,(I + \vec{\sigma} \cdot \vec{P}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + P_z & P_x - iP_y \\ P_x + iP_y & 1 - P_z \end{pmatrix}. \tag{4.38}$$

Исходя из полученного выражения $det\, \varrho \;=\; \frac{1}{4}(1 \;-\; P^2)$. Таким образом, условие положительности собственных значений ϱ есть $det\, \varrho \geqslant 0$ или $P^2 \leqslant 1$.

В случае чистого состояния $|A\rangle$, оператор плотности есть оператор проектирования $\varrho^{(A)} = |A\rangle \langle A|$, и, обозначая вектор поляризации состояния $|A\rangle$ через $\vec{P}^{(A)}$, находим:

$$|A\rangle \langle A| = \frac{1}{2}\,(1 + \vec{\sigma} \cdot \vec{P}^{(A)}) \tag{4.39}$$

В результате

$$\left\langle A \right| \varrho \left| A \right\rangle = Sp\,\{|A\rangle \langle A|\; \varrho\} = \frac{1}{4}\,Sp\,\{(1 + \vec{\sigma} \cdot \vec{P}^{(A)})(1 + \vec{\sigma} \cdot \vec{P})\} = \frac{1}{2}\,(1 + \vec{P}^{(A)} \cdot \vec{P}). \tag{4.40}$$

Данный результат можно интерпретировать следующим образом. Если пучок частиц определяется матрицей плотности ϱ, то этот пучок может проходить через фильтр Штерна-Герлаха лишь находясь в чистом состоянии $|A\rangle$. Другими словами, если фильтр ориентирован параллельно вектору $\vec{P}^{(A)}$, то вероятность того, что частица пучка пройдет через фильтр определяется скалярным произведением $\vec{P}^{(A)} \cdot \vec{P}$. Вероятность максимальна, если $\vec{P}$ ориентирован параллельно градиенту поля ($\vec{P}^{(A)}$) и минимальна, в случае его антипараллельной ориентации. В частности, если пучок не поляризован ($\vec{P} \;=\; 0$), то для любого фильтра:

$$\left\langle A \right| \varrho \left| A \right\rangle = 1/2. \tag{4.41}$$

В соответствии с (4.38) P_x, P_y, P_z представляют собой тот минимальный набор данных, который необходим для определения матрицы плотности спина $1/2$.

Таким образом, начальной информацией о пучке является значение трех компонент вектора $\vec{P}$. Если вектор $\vec{P}$ известен, то (4.38) содержит всю информацию о пучке.

Если $|\vec{P}| = 1$, то система (пучок) находится в чистом спиновом состоянии. В этом случае достаточно двух параметров для описания системы (например, углы θ и φ вектора $\vec{P}$).

Если $|\vec{P}| \;<\; 1$, то пучок находится в смешанном состоянии. Такие состояния характеризуются тремя параметрами ($|\vec{P}|, \theta, \varphi$).

4.4 Разложения Шмидта (Schmidt)

Теорема. *Пусть $|\Psi\rangle-$ чистое состояние составной системы $A + B$. Тогда существуют ортонормированные состояния $|i_A\rangle$ системы A и ортонормированные состояния $|i_B\rangle$ системы B такие, что*

$$|\Psi_{AB}\rangle = \sum_i \lambda_i\, |i_A\rangle\, |i_B\rangle \tag{4.42}$$

где λ_i- неотрицательные числа, удовлетворяющие условию $\sum\limits_i \lambda_i^2 \;=\; 1$. λ_i- называются коэффициенты Шмидта.

Докажем теорему в случае, когда A и B имеют пространство состояний одной размерности.

Пусть $|j\rangle$ и $|k\rangle$— образуют произвольный ортонормированный базис для систем A и B, соответственно, тогда $|\Psi\rangle$ может быть представлено в виде

$$|\Psi_{AB}\rangle = \sum_{j,k} a_{jk} \, |j\rangle \, |k\rangle \,, \quad a_{jk} = \left\langle jk \,\middle|\, \Psi_{AB} \right\rangle. \tag{4.43}$$

Набор чисел a_{jk} образует эрмитово-сопряженную комплексную матрицу a, которую можно привести к диагональному виду. Представим матрицу a в виде $a = udv$, где d— диагональная матрица с неотрицательными элементами, а u и v— унитарные матрицы. Тогда (4.43) можно переписать в виде

$$|\Psi_{AB}\rangle = \sum_{i,j,k} u_{ij} d_{ii} v_{ik} \, |j\rangle \, |k\rangle \,. \tag{4.44}$$

Переопределим базис состояний в A и B

$$|i_A\rangle = \sum_j u_{ji} \, |j\rangle \qquad \text{и} \qquad |i_B\rangle = \sum_k v_{ik} \, |k\rangle \,, \tag{4.45}$$

и обозначим $d_{ii} = \lambda_i$. В результате из (4.44) находим:

$$|\Psi_{AB}\rangle = \sum_i \lambda_i \, |i_A\rangle \, |i_B\rangle \,. \tag{4.46}$$

В силу унитарности u и v, наборы состояний $|i_A\rangle$ и $|i_B\rangle$ в (4.45) образуют полную ортонормированную систему или базис Шмидта. Это и определяет содержание теоремы (4.42).

Число ненулевых значений λ_i в (4.46) или (4.42) называется числом Шмидта для состояния $|\Psi_{AB}\rangle$. Это число характеризует степень запутанности состояний сложной системы.