1 Matice hustoty a smíšené kvantové stavy

Ve fyzice se setkáváme se situacemi, kdy nelze experimentálně získat úplnou informaci o stavu systému v daný okamžik (např. z důvodu příliš velkého počtu částic, nedostatečné kvality aparatury, či z nemožnosti dostatečně rychle zpracovat získaná data). V takovém případě se uchylujeme ke statistickému popisu. Nejprve si připomeneme, jak ke statistickému popisu přistupuje klasická hamiltonovská fyzika.

Ve statistické fyzice je stav systému popsán funkcí $\rho : TM \mapsto \mathbb{R}_0^+$, nazývanou **hustota pravděpodobnosti**, určující pravděpodobnostní rozdělení na fázovém prostoru. Tato funkce musí splňovat normalizační podmínku

$$\int_{TM} \rho(x,p)dx\,dp = 1.$$

Střední hodnota pozorovatelné A popsané funkcí $a(x,p)$ ve stavu určeném hustotou pravděpodobnosti ρ je dána

$$\langle A\rangle_\rho = \int_{TM} a(x,p)\rho(x,p)\,dx\,dp.$$

Vývoj hustoty pravděpodobnosti v čase řídí rovnice kontinuity (viz [**?**])

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\sum_{k=1}^{3N}\left[\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho\frac{dx_k}{dt}\right) + \frac{\partial}{\partial p_k}\left(\rho\frac{dp_k}{dt}\right)\right].$$

Za předpokladu, že pohyb každého bodu fázového prostoru je určen Hamiltonovými pohybovými rovnicemi

$$\frac{dx_k}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_k}, \quad \frac{dp_k}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_k},$$

plyne odsud pro časový vývoj hustoty pravděpodobnosti Liouvillova věta

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = \sum_{k=1}^{3N}\left[\frac{\partial H}{\partial x_k}\frac{\partial\rho}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial\rho}{\partial x_k}\right] = \{H,\rho\}. \tag{1.1}$$

Poznámka. Nenechme se zmást formální podobností s časovým vývojem časově nezávislé pozorovatelné, určeným též Poissonovou závorkou, ovšem s opačným znaménkem:

$$\frac{da}{dt} = \{a,H\} = -\{H,a\}.$$

V analogii očekáváme, že kvantové hustoty pravděpodobnosti budou operátory na $\mathscr{H}$, které každému stavu přiřadí pravděpodobnost, že se v něm systém nachází.

V dalším odvozování uvažujeme konečný počet normalizovaných stavů $(|\psi_m\rangle)_{m=1}^n$, ve kterých se systém může nacházet. Zobecnění výsledků, jež obdržíme, na spočetný počet stavů se formulují jako postuláty.

Stav systému v kvantové mechanice je popsán vektorem $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$. Tomuto stavu je možno přiřadit projektor $\hat{P}_{|\psi\rangle} = |\psi\rangle\langle\psi|$. Projektor $\hat{P}_{|\psi\rangle}$ má tu vlastnost, že stav $|\psi\rangle$ (a libovolný jeho komplexní násobek)[1] je jeho vlastním stavem příslušejícím vlastnímu číslu 1 a že stavy ortogonální na $|\psi\rangle$ patří do nulového prostoru (jádra). To budeme interpretovat, že stavu $|\psi\rangle$ je přiřazena pravděpodobnost 1 a všem stavům kolmým na $|\psi\rangle$ nulová.

Pokud stav systému neznáme s jistotou, ale víme, že s pravděpodobností p_m mu lze přiřadit vektor $|\psi_m\rangle$, mohli bychom zobecněním stejné myšlenky tuto vědomost vyjádřit operátorem

$$\hat{\rho} = \sum_{m=1}^{n} p_m |\psi_m\rangle\langle\psi_m|. \tag{1.2}$$

Ukážeme, že takto sestavený operátor skutečně obsahuje veškeré informace pro popis kvantového systému a předpovědi výsledků měření.

Definice 1.1. Buď $\hat{B}$ operátor na $\mathscr{H}$, $(|i\rangle)_{i\in\mathscr{I}}$ ortonormální báze $\mathscr{H}$. Potom definujeme **stopu operátoru** $\hat{B}$ dle předpisu

$$\operatorname{Tr}\hat{B} = \sum_i \langle i|\hat{B}|i\rangle.$$

S touto definicí je podmínku normalizace

$$\sum_{m=1}^{n} p_m = 1$$

možno na úrovni $\hat{\rho}$ vyjádřit jako $\operatorname{Tr}\hat{\rho} = 1$.

Se stopou operátoru se v této kapitole budeme setkávat často, shrňme proto (bez důkazů) několik jejích základních vlastností. Ty platí pro třídu tzv. jaderných operátorů, o kterých se přednáší více ve funkcionální analýze; v případech, které budou pro nás relevantní, nejsou předpoklady limitujícím faktorem.

1. Stopa je lineární: $\operatorname{Tr}\left(\alpha\hat{A} + \beta\hat{B}\right) = \alpha\operatorname{Tr}\hat{A} + \beta\operatorname{Tr}\hat{B}$.

2. Hodnota $\operatorname{Tr}\hat{B}$ nezávisí na výběru báze $(|i\rangle)$, jinými slovy je též invariantní vůči podobnostní transformaci $\hat{B} \mapsto \hat{S}\hat{B}\hat{S}^{-1}$. Volbou báze, v níž je operátor diagonalizovatelný, snadno odvodíme $\operatorname{Tr}\hat{B} = \sum\sigma(\hat{B})$, kde sčítání bere v úvahu algebraické násobnosti.[2]

[1] Obzvlášť si všimněme, že takto přiřazený projektor nezávisí na výběru fáze, tedy $\hat{P}_{|\psi\rangle} = \hat{P}_{e^{i\varphi}|\psi\rangle}$, $\forall\varphi \in \mathbb{R}$.

[2] Připomeňme, že další známý invariant podobnostních transformací, determinant, je zase roven součinu všech hodnot spektra.

3. Pravidlo **cyklické záměny**: $\mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = \mathrm{Tr}(\hat{B}\hat{A})$. To platí, i pokud operátory $\hat{A}$, $\hat{B}$ zobrazují mezi různými Hilbertovy prostory (například pokud odpovídají obdélníkovým maticím) a dokonce i pro bra, resp. kety. V případě součinu více operátorů platí v libovolném uzávorkování, např. $\mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{B}\hat{C}) = \mathrm{Tr}\big((\hat{A}\hat{B})\hat{C}\big) = \mathrm{Tr}(\hat{C}\hat{A}\hat{B})$, ne však $\mathrm{Tr}(\hat{C}\hat{B}\hat{A})$.

Věta 1.2. Nechť $\hat{\rho}$ je operátor definovaný dle (1.2) s pravděpodobnostmi $p_m > 0$. Pak pro každé $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ platí

$$\langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle \geq 0.$$

(tedy $\hat{\rho}$ je pozitivní operátor).

Důkaz. Dle definice $\hat{\rho}$ platí

$$\hat{\rho}|\psi\rangle = \sum_{m=1}^{n} p_m |\psi_m\rangle\langle\psi_m|\psi\rangle.$$

Vynásobením této rovnosti zleva bra $\langle\psi|$ dostáváme

$$\langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle = \sum_{m=1}^{n} p_m |\langle\psi_m|\psi\rangle|^2,$$

což je součet samých nezáporných členů. □

Operátor (1.2) je tedy pozitivní, má jednotkovou stopu a navíc (jak snadno nahlédneme z jeho definice) je samosdružený. Kvantová mechanika postuluje, že každý takový operátor popisuje možný fyzikální stav systému.

Definice 1.3 (Postulát 1)**.** Stavy v kvantové mechanice jsou popsány operátory $\hat{\rho}$ nazývanými **matice hustoty** (operátor hustoty, statistický operátor) s vlastnostmi

(i) $\mathrm{Tr}\,\hat{\rho} = 1$,

(ii) $\hat{\rho}$ je samosdružený ($\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger$),

(iii) $\hat{\rho}$ je pozitivní ($\forall|\psi\rangle \in \mathscr{H} : \langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle \geq 0$).

Matice hustoty mající hodnost rovnu jedné (což jsou právě všechny projektory na jednorozměrné podprostory $\mathscr{H}$) nazýváme **čisté stavy**. Všechny ostatní stavy nazýváme **smíšené**.

Poznámka. Podmínky $(i) + (iii)$ implikují omezenost $\hat{\rho}$.

Protože výpočet hodnosti není v obecném případě praktický, setkáváme se i s jinými ekvivalentními způsoby, jak poznat čisté stavy od smíšených, případně míru smíšenosti kvantifikovat. Základní takovou měrou je **čistota stavu** definovaná jako $\mathrm{Tr}\big(\hat{\rho}^2\big)$. Čisté stavy splňují $\mathrm{Tr}\,\hat{\rho}^2 = 1$ a pro všechny ostatní leží čistota v intervalu $(0, 1)$.

Čisté stavy popisuje matice hustoty tvaru $\hat{\rho}_{|\psi\rangle} = |\psi\rangle\langle\psi|$. Přechod zpět k vektorovému vyjádření $|\psi\rangle$ je nejednoznačný, matice hustoty smazává informaci o komplexní fázi vektoru. To však fyzikálně ničemu nevadí, protože víme, že i ve vektorové formulaci kvantové mechaniky fáze (stejně jako délka vektoru) nemá vůbec žádnou fyzikální podstatu. V jistém ohledu je tak formulace pomocí matice hustoty dokonce blíže měřitelné realitě díky tomu, že tuto nejednoznačnost v popisu stavu neobsahuje.

Poznamenejme ještě, že ani v rámci projektorů není rozklad (1.2) jednoznačný: v obecném případě může existovat více různých kombinací stavů a jejich přiřazených pravděpodobností, které dávají stejné $\hat{\rho}$. Pomocí vzorců, které jsou vyjádřené prostřednictvím $\hat{\rho}$, pak takové situace není možné vzájemně od sebe poznat, jejich chování je identické.

Věnujme se nyní časovému vývoji $\hat{\rho}$. Předpokládejme, že se vývoj každého ze stavů $|\psi_m(t)\rangle$ řídí Schrödingerovou rovnicí

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi_m(t)\rangle = \hat{H}|\psi_m(t)\rangle, \quad \text{resp.} \quad -i\hbar\frac{d}{dt}\langle\psi_m(t)| = \langle\psi_m(t)|\hat{H} \tag{1.3}$$

a že k jiné změně směsi (např. dalšímu směšování) stavů nedochází. Časový vývoj matice hustoty $\hat{\rho}$ je tedy možno zapsat

$$\hat{\rho}(t) = \sum_{m=1}^{n} p_m|\psi_m(t)\rangle\langle\psi_m(t)|$$

Zderivováním poslední rovnosti podle času a dosazením časových derivací stavů z (1.3) dostáváme

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}\hat{\rho}(t) &= i\hbar\sum_{m=1}^{n} p_m\left[\frac{-i}{\hbar}\hat{H}|\psi_m(t)\rangle\langle\psi_m(t)| + \frac{i}{\hbar}|\psi_m(t)\rangle\langle\psi_m(t)|\hat{H}\right] = \\ &= \hat{H}\hat{\rho}(t) - \hat{\rho}(t)\hat{H} = \left[\hat{H},\hat{\rho}(t)\right]. \end{aligned}$$

Poznámka. V tomto případě platí přesná analogie s klasickou statistickou mechanikou, viz (1.1). Znamená to ale také to, že je zde opačné znaménko (opačné pořadí v komutátoru), než u časového vývoje operátoru v Heisenbergově obrazu (**??**)!

Definice 1.4 (Postulát 2)**.** Pro izolovaný fyzikální systém se časový vývoj matice hustoty $\hat{\rho}(t)$ řídí rovnicí[3]

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{\rho}(t) = \left[\hat{H},\hat{\rho}(t)\right]. \tag{1.4}$$

Poznámka. V soustavách, které nejsou izolované, může docházet i ke změnám pravděpodobnostního rozdělení. Pro soustavy, které mohou jednosměrně interagovat s klasickým okolím, pak existuje úplnější verze výše uvedeného vztahu, známá jako řídící rovnice (*master equation*). Lindbladova verze této rovnice je

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho} = \frac{-i}{\hbar}\left[\hat{H},\hat{\rho}\right] + \sum_{k=1}^{N^2-1}\gamma_k\left(L_k\hat{\rho}L_k^\dagger - \frac{1}{2}\left\{L_k^\dagger L_k,\hat{\rho}\right\}\right), \tag{1.5}$$

[3] Známá je jako *von Neumannova rovnice*.

kde N je dimenze matice hustoty $\hat{\rho}$, γ_k jsou kladné konstanty popisující sílu interakce s prostředím a L_k jsou Lindbladovy operátory, které musí být bezestopé. Je tudíž plně vyjádřitelná pomocí operátoru $\hat{\rho}$, bez nutnosti znát detaily jeho rozkladu (1.2). V tomto předmětu se jí nebudeme hlouběji věnovat.

Podívejme se nyní, jak bude potřeba upravit naše dosavadní znalosti o měření fyzikálních veličin v kvantové fyzice. Ve srovnání s minulým semestrem bude třeba přeformulovat

- pravděpodobnost naměření výsledku a pozorovatelné $\hat{A}$,
- střední hodnotu pozorovatelné $\hat{A}$ v daném fyzikálním stavu,
- změnu stavu v důsledku měření.

Ve všech případech samozřejmě platí, že můžeme výsledky spočítat v jednotlivých členech $|\psi_m\rangle$ rozkladu (1.2) a spočítat průměr vážený odpovídajícími pravděpodobnostmi. Tak budeme postupovat i při odvození očekávaných tvarů, které pak potvrdíme formou postulátů.

Mějme ortonormální bázi vektorů $(|a,k\rangle)_{k=1}^{l}$ tvořící vlastní podprostor operátoru $\hat{A}$ (přiřazeného měřitelné veličině A) příslušející jeho vlastní hodnotě a, tedy

$$\hat{A}|a,k\rangle = a|a,k\rangle \quad k = 1,\ldots,l.$$

Ze zimy víme, že pravděpodobnost $W_{\hat{A}=a,|\psi\rangle}$, že při měření pozorovatelné $\hat{A}$ na systému ve stavu $|\psi\rangle$ naměříme hodnotu a, je rovna

$$W_{\hat{A}=a,|\psi\rangle} = \sum_{k=1}^{l} |\langle\psi|a,k\rangle|^2 = \sum_{k=1}^{l} \langle\psi|a,k\rangle\langle a,k|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{P}_{\hat{A}=a}|\psi\rangle,$$

kde $\hat{P}_{\hat{A}=a}$ je projekční operátor splňující

$$\hat{P}_{\hat{A}=a} = \sum_{k=1}^{l} |a,k\rangle\langle a,k| = \hat{P}^{\dagger}_{\hat{A}=a}, \quad \hat{P}_{\hat{A}=a} = \hat{P}^{2}_{\hat{A}=a}. \tag{1.6}$$

Je přirozené očekávat, že pravděpodobnost $W_{\hat{A}=a,\hat{\rho}}$ naměření $\hat{A} = a$ na systému popsaného maticí hustoty $\hat{\rho}$ definované dle (1.2) bude rovna

$$W_{\hat{A}=a,\hat{\rho}} = \sum_{m=1}^{n} p_m W_{\hat{A}=a,|\psi_m\rangle} = \sum_{m=1}^{n} p_m \langle\psi_m|\hat{P}_{\hat{A}=a}|\psi_m\rangle.$$

K úpravě do pěknějšího tvaru si dopomůžeme následujícím trikem, který pak využijeme i do budoucna. Buď $(|i\rangle)_{i\in\mathscr{I}}$ (libovolná) ortonormální báze $\mathscr{H}$, potom

$$\begin{aligned}
W_{\hat{A}=a,\hat{\rho}} &= \sum_{m=1}^{n} p_m \sum_i \langle\psi_m|i\rangle\langle i|\hat{P}_{\hat{A}=a}|\psi_m\rangle && \text{(rozklad jednotky)}\\
&= \sum_{m=1}^{n} \sum_i \langle i|\hat{P}_{\hat{A}=a}|\psi_m\rangle p_m \langle\psi_m|i\rangle && \text{(čísla komutují)}\\
&= \operatorname{Tr}\left(\hat{P}_{\hat{A}=a} \sum_{m=1}^{n} |\psi_m\rangle p_m \langle\psi_m|\right) && \text{(definice stopy a linearita)}\\
&= \operatorname{Tr}\left(\hat{P}_{\hat{A}=a}\hat{\rho}\right) && \text{(definice } \hat{\rho}\text{).}
\end{aligned}$$

Tyto pravděpodobnosti můžeme využít k výpočtu střední hodnoty při měření operátoru $\hat{A}$ na stavu $\hat{\rho}$ (označme $\langle\hat{A}\rangle_{\hat{\rho}}$) – využitím linearity stopy:

$$\langle\hat{A}\rangle_{\hat{\rho}} = \sum_{a\in\sigma(\hat{A})} a W_{\hat{A}=a,\hat{\rho}} = \operatorname{Tr}\Big(\underbrace{\textstyle\sum_{a\in\sigma(\hat{A})} a\hat{P}_{\hat{A}=a}}_{\text{spektrální rozklad } \hat{A}}\,\hat{\rho}\Big) = \operatorname{Tr}\left(\hat{A}\hat{\rho}\right).$$

Ke stejnému výsledku můžeme alternativně dospět i použitím vzorce pro $\langle\hat{A}\rangle_{|\psi_m\rangle}$:

$$\begin{aligned}
\langle\hat{A}\rangle_{\hat{\rho}} &= \sum_{m=1}^{n} p_m \langle\hat{A}\rangle_{|\psi_m\rangle} = \sum_{m=1}^{n} p_m \langle\psi_m|\hat{A}|\psi_m\rangle = \sum_{m=1}^{n} p_m \sum_i \langle\psi_m|\hat{A}|i\rangle\langle i|\psi_m\rangle =\\
&= \sum_{m=1}^{n} \sum_i \langle i|\psi_m\rangle p_m \langle\psi_m|\hat{A}|i\rangle = \sum_{m=1}^{n} \operatorname{Tr}\left(p_m|\psi_m\rangle\langle\psi_m|\hat{A}\right) = \operatorname{Tr}\left(\hat{\rho}\hat{A}\right).
\end{aligned}$$

Zbývá nám vyřešit, jak se změní matice hustoty $\hat{\rho}$, provedeme-li na systému měření pozorovatelné $\hat{A}$. Mějme čistý stav $|\psi\rangle$, na němž naměříme hodnotu a pozorovatelné $\hat{A}$. V důsledku měření přejde systém do stavu $\hat{P}_{\hat{A}=a}|\psi\rangle$, kde $\hat{P}_{\hat{A}=a}$ je projektor na vlastní podprostor příslušející vlastní hodnotě a (projekční postulát). Tento stav není normalizovaný, ale lze normalizovat právě tehdy, když existuje nenulová pravděpodobnost události. Fázi přiřazenou v nové normalizaci kvantová mechanika ponechává neurčenou.

Pokud výsledek a získáme při měření smíšeného stavu $\hat{\rho}$, uvažujme opět konvexní kombinaci výsledných stavů po projekci, ale s pravděpodobnostmi p_m ještě vynásobenými pravděpodobnostmi, že konkrétní stav $|\psi_m\rangle$ výsledek a vůbec dá:

$$\hat{\rho}^{?}_{\hat{A}=a} = \sum_{a\in\sigma(\hat{A})} p_m \langle\psi_m|\hat{P}_{\hat{A}=a}|\psi_m\rangle \frac{\left(\hat{P}_{\hat{A}=a}|\psi_m\rangle\right)\left(\hat{P}_{\hat{A}=a}|\psi_m\rangle\right)^{\dagger}}{\left(\hat{P}_{\hat{A}=a}|\psi_m\rangle\right)^{\dagger}\left(\hat{P}_{\hat{A}=a}|\psi_m\rangle\right)} \tag{1.7}$$

Druhý člen (skalární součin) se pokrátí s jmenovatelem třetího díky samosdruženosti projektorů a jejich idempotenci (1.6) a zůstane

$$\hat{\rho}^{?}_{\hat{A}=a} = \sum_{a\in\sigma(\hat{A})} p_m \hat{P}_{\hat{A}=a}|\psi_m\rangle\langle\psi_m|\hat{P}^{\dagger}_{\hat{A}=a} = \hat{P}_{\hat{A}=a}\hat{\rho}\hat{P}_{\hat{A}=a}.$$

Takový stav by ale nebyl správně normalizovaný. Ukazuje se, že jeho stopa je

$$\operatorname{Tr}\hat{\rho}^{?}_{\hat{A}=a} = \operatorname{Tr}\big(\hat{P}_{\hat{A}=a}\hat{\rho}\hat{P}_{\hat{A}=a}\big) = \operatorname{Tr}\big(\hat{\rho}\hat{P}^{2}_{\hat{A}=a}\big) = W_{\hat{A}=a,\hat{\rho}}.$$

Důvod je jednoduchý, upravené pravděpodobnosti $p_m\langle\psi_m|\hat{P}_{\hat{A}=a}|\psi_m\rangle$ vystupující v (1.7) netvoří pravděpodobností rozdělení. Jejich součtem místo jednotky je pravděpodobnost, že k měření a vůbec dojde. Celý výraz bychom tedy jí měli vydělit, protože při zkoumání stavu po měření nás už zajímají jen situace, kdy měření proběhlo úspěšně.[4] To vlastně znamená operátor $\operatorname{Tr}\hat{\rho}^{?}_{\hat{A}=a}$ opravit vydělením jeho vlastní stopou:

$$\hat{\rho}_{\hat{A}=a} = \frac{\hat{\rho}^{?}_{\hat{A}=a}}{\operatorname{Tr}\hat{\rho}^{?}_{\hat{A}=a}} = \frac{\hat{P}_{\hat{A}=a}\hat{\rho}\hat{P}_{\hat{A}=a}}{\operatorname{Tr}\big(\hat{P}_{\hat{A}=a}\hat{\rho}\hat{P}_{\hat{A}=a}\big)}.$$

Vidíme, že všechny výsledky výše je možné vyjádřit pomocí operátoru $\hat{\rho}$ bez potřeby znalosti jeho kompozice tvaru (1.2). To shrnuje náš třetí postulát.

Definice 1.5 (Postulát 3)**.** Při měření pozorovatelné $\hat{A}$ na kvantovém stavu popsaném maticí hustoty $\hat{\rho}$ může výsledek $a \in \sigma(\hat{\rho})$ nastat s pravděpodobností

$$W_{\hat{A}=a,\hat{\rho}} = \operatorname{Tr}\big(\hat{P}_{\hat{A}=a}\hat{\rho}\big). \tag{1.8}$$

Kvantový stav v tom případě přejde na

$$\hat{\rho}_{\hat{A}=a} = \frac{\hat{P}_{\hat{A}=a}\hat{\rho}\hat{P}_{\hat{A}=a}}{\operatorname{Tr}\big(\hat{P}_{\hat{A}=a}\hat{\rho}\hat{P}_{\hat{A}=a}\big)}. \tag{1.9}$$

Střední hodnota pozorovatelné $\hat{A}$ odpovídající těmto výsledkům je rovna

$$\langle\hat{A}\rangle_{\hat{\rho}} = \operatorname{Tr}\left(\hat{\rho}\hat{A}\right) = \operatorname{Tr}\left(\hat{A}\hat{\rho}\right). \tag{1.10}$$

Formalizmus smíšených stavů nám umožňuje klást si i nový druh otázky, na který „vektorová“ kvantová mechanika nemohla nabídnout smysluplnou odpověď – jmenovitě, jak popisovat měření, u kterých výsledek nedokážeme rozlišit (např. z důvodu velkého množství měření, měření provedené jiným pozorovatelem, omezené rozlišovací schopnosti apod.) – a tím ilustrovat kvantovou operaci, u které dochází ke změnám vlastních čísel $\hat{\rho}$.

V takovém případě můžeme jednoduše matice hustoty (1.9) smísit s pravděpodobnostmi, kdy který případ nastane, danými (1.8). Výsledkem je

$$\hat{\rho}_{\hat{A}} = \sum_{a\in\sigma(\hat{A})} \operatorname{Tr}\big(\hat{P}_{\hat{A}=a}\hat{\rho}\big)\frac{\hat{P}_{\hat{A}=a}\hat{\rho}\hat{P}_{\hat{A}=a}}{\operatorname{Tr}\big(\hat{P}_{\hat{A}=a}\hat{\rho}\big)} = \sum_{a\in\sigma(\hat{A})} \hat{P}_{\hat{A}=a}\hat{\rho}\hat{P}_{\hat{A}=a}. \tag{1.11}$$

[4] To jinými slovy říká, že ve výrazu (1.7) jsme správně měli použít *podmíněné* pravděpodobnosti.

Transformace (1.11) typicky vyrábí i z čistých stavů smíšené a smíšeným stavům dále snižuje čistotu. S podobnými operacemi se můžeme setkat i v jiných situacích, než při provádění kvantových měření bez zaznamenávání výsledků. Podobné transformace popisují další jevy doprovázené ztrátou kvantové koherence – vliv tepelného šumu, interakce s okolím v případě nedostatečně odizolovaného systému, ...

Příklad. Matice hustoty na $\mathscr{H} = \mathbb{C}^2$.

Matice hustoty $\hat{\rho} \in \mathbb{C}^{2,2}$ musí dle definice 1.3 splňovat tři podmínky. Při jejím hledáním přejdeme do báze $(\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3, \mathbb{1})$, kde $\hat{\sigma}_i$ jsou Pauliho matice (**??**) a $\mathbb{1}$ představuje jednotkový operátor.

Jelikož $\hat{\sigma}_i = \hat{\sigma}_i^\dagger$ a $\mathbb{1} = \mathbb{1}^\dagger$, je operátor $\hat{\rho}$ definovaný obecná lineární kombinace

$$\hat{\rho} = \sum_{i=1}^{3} \alpha_i \hat{\sigma}_i + \alpha_4 \mathbb{1}, \quad \alpha_i \in \mathbb{C}$$

samosdružený, a tak splněna podmínka (ii), právě tehdy, kdy koeficienty α_i jsou reálné. Dále snadno nahlédneme, že $\operatorname{Tr} \sigma_i = 0$ a $\operatorname{Tr} \mathbb{1} = 2$. Abychom zaručili jednotkovou stopu matice hustoty $\hat{\rho}$, musí být $\alpha_4 = \frac{1}{2}$. Budeme tedy níže hledat její vyjádření $\hat{\rho}$ již jen ve tvaru

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}\left(\mathbb{1} + \sum_{i=1}^{3} \alpha_i \hat{\sigma}_i\right) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+\alpha_3 & \alpha_1 - i\alpha_2 \\ \alpha_1 + i\alpha_2 & 1-\alpha_3 \end{pmatrix}, \tag{1.12}$$

kde bylo užito explicitních tvarů Pauliho matic (**??**) a navíc jsme pro pohodlnost přeznačili $\alpha_i \mapsto \alpha_i/2$. Zbývá nám zaručit pozitivnost $\hat{\rho}$. Snadno nahlédneme, že vlastní čísla matice (1.12) jsou rovna

$$\lambda^{(\pm)} = \frac{1 \pm \sqrt{\alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2}}{2},$$

a tudíž je podmínkou pozitivity $\hat{\rho}$ nerovnost

$$\alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2 \leq 1. \tag{1.13}$$

Poslední nerovnost tvoří množinu, jež bývá nazývána Blochovou koulí. Množina všech kvantových stavů je (i v obecnějších případech) vždy konvexní, přičemž na jejím povrchu leží čisté stavy, uvnitř potom stavy smíšené.

Předpokládejme nyní pro ilustraci čistý stav, tedy rovnost v (1.13). Ta zaručí vlastní čísla $\lambda^{(+)} = 1$ a $\lambda^{(-)} = 0$. Vektor popisující čistý stav $|\psi\rangle$ je vlastním vektorem $\hat{\rho}$ příslušející vlastnímu číslu $\lambda^{(+)} = 1$. Jeden z jeho možných tvarů je

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(1-\alpha_3)}}\begin{pmatrix} \alpha_1 - i\alpha_2 \\ 1-\alpha_3 \end{pmatrix}, \quad \langle\psi|\psi\rangle = 1.$$

Snadno nahlédneme, že

$$|\psi\rangle\langle\psi| = \frac{1}{2(1-\alpha_3)}\begin{pmatrix} \alpha_1 - i\alpha_2 \\ 1-\alpha_3 \end{pmatrix}(\alpha_1 + i\alpha_2, \quad 1-\alpha_3) = \hat{\rho}.$$

Zkoumejme časový vývoj matice hustoty. Předpokládejme hamiltonián $\hat{H}$ ve tvaru $\hat{H} = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}$, $E_1 \leq E_2$. Položme $\alpha_i = \alpha_i(t)$. Víme, že časový vývoj $\hat{\rho}$ se řídí von Neumannovou rovnicí (1.4), která po dosazení $\hat{H}$, $\hat{\rho}$ a po úpravě získává tvar

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{\alpha}_3 & \dot{\alpha}_1 - i\dot{\alpha}_2 \\ \dot{\alpha}_1 + i\dot{\alpha}_2 & \dot{\alpha}_3 \end{pmatrix} = (E_1 - E_2) \begin{pmatrix} 0 & \alpha_1 - i\alpha_2 \\ -\alpha_1 - i\alpha_2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Řešení pro $\alpha_3(t)$ je triviální. Řešení $\alpha_1(t)$, $\alpha_1(t)$ se naleze elegantně přechodem k nové funkci $z(t) = \alpha_1(t) - i\alpha_2(t)$. Časový vývoj matice hustoty $\hat{\rho} = \hat{\rho}(t)$ je pak možno zapsat

$$\hat{\rho}(t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \alpha_3(0) & \left[\alpha_1(0) - i\alpha_2(0)\right] \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(E_1 - E_2)t\right\} \\ \left[\alpha_1(0) + i\alpha_2(0)\right] \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(E_1 - E_2)t\right\} & 1 - \alpha_3(0) \end{pmatrix}.$$

Dále zkusíme určit střední hodnotu energie v čase $t = 0$ ve stavu $\hat{\rho}$ v případě výše zavedených $\hat{\rho}$ a $\hat{H}$. K tomuto účelu si pojmenujeme standardní bázi v prostoru $\mathscr{H} = \mathbb{C}^2$:

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Ze (1.10) víme, že střední hodnota energie systému ve stavu $\hat{\rho}$ je určena

$$\langle \hat{H} \rangle_{\hat{\rho}} = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\hat{H}\right) = \sum_{i=1}^{2} \langle i|\hat{\rho}\hat{H}|i\rangle = \frac{1}{2}\left[E_1(1 + \alpha_3) + E_2(1 - \alpha_3)\right].$$

Snadno nahlédneme $\langle \hat{H} \rangle_{\hat{\rho}} \in \langle E_1, E_2 \rangle$, neboť $\alpha_3 \in \langle -1, 1 \rangle$. Pravděpodobnost $W_{\hat{H}=E_1}$ naměření $\hat{H} = E_1$ je dle (1.8) rovna

$$W_{\hat{H}=E_1} = \mathrm{Tr}\left(\hat{P}_{\hat{H}=E_1}\hat{\rho}\right) = \langle 1|\hat{\rho}|1\rangle = \frac{1}{2}(1 + \alpha_3),$$

protože $\hat{P}_{\hat{H}=E_1}$ představuje projekční operátor tvaru $\hat{P}_{\hat{H}=E_1} = |1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$.

Po průchodu filtrem přechází matice hustoty $\hat{\rho}$ na novou matici $\hat{\rho}_{\hat{H}}$ podle vztahu (1.11). Přímo můžeme psát

$$\hat{\rho}_{\hat{H}} = \sum_{E=E_1,E_2} \hat{P}_{\hat{H}=E}\hat{\rho}\hat{P}_{\hat{H}=E} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \alpha_3 & 0 \\ 0 & 1 - \alpha_3 \end{pmatrix}.$$

Měřením energie tedy byla vytvořena stacionární matice hustoty.

Příklad. Mějme kanonický soubor kvantových jednorozměrných harmonických oscilátorů s určeným multiplikátorem $\beta = \frac{1}{k_B T}$. Určete střední hodnotu energie a její rozptyl. Výsledky ověřte limitními přechody $\beta \to 0$, $\beta \to +\infty$.

Nejpravděpodobnější rozdělení $\rho(x,p)$ klasického kanonického souboru popsaného hamiltoniánem $H(x,p)$ má tvar (viz [**?**])

$$\rho(x,p) = A\ \exp\left\{-\beta H(x,p)\right\},$$

kde A je normalizační konstanta. Očekáváme, že kvantověmechanický soubor určený hamiltoniánem $\hat{H}$ bude popsán maticí hustoty $\hat{\rho}$ definovanou

$$\hat{\rho} = \frac{1}{\operatorname{Tr} e^{-\beta\hat{H}}} e^{-\beta\hat{H}},$$

Dělením stopou $\operatorname{Tr} e^{-\beta\hat{H}}$ je zajištěna jednotková stopa $\hat{\rho}$, samosdruženost $\hat{\rho}$ plyne ze samosdruženosti $\hat{H}$ a pozitivnost $\hat{\rho}$ je evidentní z pozitivity funkce exp ve vyjádření v diagonální bázi. $\hat{\rho}$ je tedy maticí hustoty v korektním smyslu. Ze zimy víme, že soubor vlastních funkcí jednorozměrného harmonického oscilátoru $(|n\rangle)_{n=0}^{+\infty}$ tvoří úplnou ortonormální bázi $\mathscr{H}$. Navíc

$$\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)|n\rangle.$$

Střední hodnotu energie určíme ze (1.10)

$$\langle\hat{H}\rangle_{\hat{\rho}} = \operatorname{Tr}\left(\hat{\rho}\hat{H}\right) = \frac{1}{\operatorname{Tr} e^{-\beta\hat{H}}}\sum_{n=0}^{+\infty}\langle n|e^{-\beta\hat{H}}\hat{H}|n\rangle.$$

S operátorem v exponentu se vypořádáme provedením rozkladu dle jeho spektra, hamiltonián v sumě mimo exponent necháme působit na ket $|n\rangle$

$$\langle\hat{H}\rangle_{\hat{\rho}} = \frac{1}{\sum_{n=0}^{+\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n+\frac{1}{2})}}\sum_{n=0}^{+\infty}\hbar\omega(n+\frac{1}{2})e^{-\beta\hbar\omega(n+\frac{1}{2})}. \tag{1.14}$$

Označne

$$Z(\beta) = \sum_{n=0}^{+\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n+\frac{1}{2})}.$$

Jedná se o geometrickou řadu, jež můžeme sečíst s výsledkem

$$Z(\beta) = \frac{e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} = \frac{1}{2\sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)}.$$

Výraz (1.14) je možno zapsat pomocí $Z(\beta)$

$$\langle\hat{H}\rangle_{\hat{\rho}} = \frac{1}{Z(\beta)}\frac{-dZ(\beta)}{d\beta}$$

a tím snadno najít hledanou střední hodnotu

$$\langle \hat{H} \rangle_{\hat{\rho}} = \frac{\hbar\omega}{2} \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \to \begin{cases} \xrightarrow{\beta\to 0\,(T\to+\infty)} +\infty, \\ \xrightarrow{\beta\to+\infty\,(T\to 0)} \frac{\hbar\omega}{2}. \end{cases}$$

Podobnými úpravami získáme vyjádření pro rozptyl energie

$$(\Delta\hat{H})^2_{\hat{\rho}} = \langle \hat{H}^2 \rangle_{\hat{\rho}} - \langle \hat{H} \rangle^2_{\hat{\rho}} = \left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)^2 \frac{1}{\sinh^2\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)} \to \begin{cases} \xrightarrow{\beta\to 0\,(T\to+\infty)} +\infty, \\ \xrightarrow{\beta\to+\infty\,(T\to 0)} 0. \end{cases}$$

Zamyšlení nad získanými limitními výsledky ponecháme na čtenáři.

1.1 Složené systémy a provázané stavy

Mohlo by se zdát, že smíšené stavy vůbec nemusíme uvažovat v situacích, kdy máme přesné informace o systému, není tomu ale tak.

Připomeňme si nejprve poslední zbývající postulát kvantové mechaniky. Ten je ve formulaci pomocí matice hustoty jen málo odlišný od zimy:

Definice 1.6 (Postulát 4)**.** Pro fyzikální systémy A, B s Hilbertovými prostory $\mathscr{H}_A$, $\mathscr{H}_B$ přiřazujeme složenému systému AB Hilbertův prostor $\mathscr{H}_{AB}$. Jestliže pak systémy A a B jsou nezávisle připraveny ve stavech ρ^A, ρ^B, přiřazujeme složenému systému stav

$$\rho^{AB} = \rho^A \otimes \rho^B. \tag{1.15}$$

Složené stavy můžeme dále superponovat a nyní i míchat. Žádná verze postulátu ale nemluví o opačné úloze – jak zredukovat stav složeného systému na stav, který bychom mohli přiřadit jedné jeho součásti a využívat k počítání výsledků měřených pouze na ní.

Uvažujme pro příklad Hilbertův prostor $\mathbb{C}^4$ daný složením dvou identických systémů, každý s Hilbertovým prostorem $\mathbb{C}^2$ ($\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ je izomorfní $\mathbb{C}^4$), 4 vektory báze takového prostoru označíme

$$\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}, \tag{1.16}$$

což je zkrácený zápis tenzorového součinu, zavedený už v zimě.

Zkoumejme lineární superpozici

$$|\psi_1\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}. \tag{1.17}$$

Na tomto stavu je zajímavé, že pokud změříme jeden z podsystémů, způsobíme kolaps celé vlnové funkce, po němž víme s jistotu také to, v jakém stavu je druhý podsystém (to vede na EPR paradox,[5] diskuzi mezi EPR trojicí a N. Bohrem doporučujeme

[5] A. Einstein, B. Podolsky, N. Rosen 1935

jako zajímavou četbu). To je důsledkem skutečnosti, že neexistují stavy $|a\rangle$ a $|b\rangle$ takové, aby $|\psi_1\rangle = |a\rangle|b\rangle$, jak si snadno ověříme. Stavy, které by takto šly rozložit, se nazývají **faktorizovatelné** nebo **separovatelné**. Všechny ostatní stavy, mezi které patří $|\psi_1\rangle$, se nazývají **provázané**.

(Můžeme dokonce sestavit celou novou ortonormální bázi sestávající pouze z provázaných stavů, když doplníme $|\psi_1\rangle$ o

$$|\psi_2\rangle = \frac{|00\rangle - |11\rangle}{\sqrt{2}},$$
$$|\psi_3\rangle = \frac{|10\rangle + |01\rangle}{\sqrt{2}},$$
$$|\psi_4\rangle = \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}}.$$

Této čtveřici se dohromady říká Bellovy nebo bellovské stavy.)

Pro faktorizované stavy na systému složeném z podsystémů A a B je možné mluvit o stavu, ve kterém se nachází každý z podsystémů zvlášť (až na fázi, která může v tenzorovém součinu být mezi oba činitele libovolně přerozdělena). Pro provázané stavy ale podsystémům přidělit jejich vlastní stav, ze kterého by stav celého systému bylo možno zrekonstruovat, nelze. Matice hustoty však nabízí alespoň částečnou pomoc.

Označme matici hustoty složeného systému ρ^{AB}. Například pro bellovský stav $|\psi_1\rangle$ je

$$\hat{\rho}_1^{AB} = \left(\frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}\right)\left(\frac{\langle 00| + \langle 11|}{\sqrt{2}}\right). \tag{1.18}$$

Připomeňme kritérium čistoty stavu pro kvadrát matice hustoty

$$\operatorname{Tr}\hat{\rho}^2 \leq 1, \tag{1.19}$$

které pro $\hat{\rho}_1^{AB}$ dá jedničku, jak má.

Pokud potřebujeme mluvit odděleně o stavu podsystému A, přiřadíme mu **redukovanou matici hustoty** $\hat{\rho}^A$, který se z $\hat{\rho}^{AB}$ získá operací zvanou **částečná stopa** přes systém B, označenou a definovanou jako

$$\hat{\rho}^A = \operatorname{Tr}_B\left(\hat{\rho}^{AB}\right),$$
$$\operatorname{Tr}_B\left(|a_1 b_1\rangle\langle a_2 b_2|\right) := |a_1\rangle\langle a_2| \operatorname{Tr}\left(|b_1\rangle\langle b_2|\right),$$

pro všechna $|a_1\rangle, |a_2\rangle \in \mathscr{H}_A$, $|b_1\rangle, |b_2\rangle \in \mathscr{H}_B$. Hodnota částečné stopy pro všechny ostatní matice hustoty se získá rozkladem do báze operátorů tvaru $|a_1 b_1\rangle\langle a_2 b_2|$ a předpokladem linearity operace Tr_B.

Takto získaný stav dává správné statistické předpovědi pro veškerá *lokální* měření na podsystému A. Navíc je kompatibilní s opačnou procedurou, kdy známe stavy podsystémů a složenému stavu přiřazujeme tenzorový součin jejich matic hustoty ($\hat{\rho}^A \otimes \hat{\rho}^B$):

$$\operatorname{Tr}_B(\rho^A \otimes \rho^B) = \rho^A.$$

Nejedná se však o reverzibilní operaci. Provázaným stavům složeného systému AB přiřadí částečné stopy přes B, resp. A smíšené stavy $\hat{\rho}^A$, resp. $\hat{\rho}^B$, pro které obecně

$$\rho^A \otimes \rho^B \neq \rho^{AB}.$$

Konkrétně výsledek levé strany předchozí rovnice bude v těchto případech smíšený stav, přestože jsme začínali s čistým.

Vraťme se nyní k našemu bellovskému stavu (1.17) a určeme pro ilustraci redukovanou matici hustoty podsystému A (pro B vychází stejně). Po krátkém výpočtu získáme

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_1^A &= \mathrm{Tr}_B\left(\hat{\rho}_1^{AB}\right) = \mathrm{Tr}_B\left(\frac{|00\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 00| + |00\rangle\langle 11| + |11\rangle\langle 11|}{2}\right) \\ &= \frac{|0\rangle\langle 0|\langle 0|0\rangle + |1\rangle\langle 0|\langle 0|1\rangle + |0\rangle\langle 1|\langle 1|0\rangle + |1\rangle\langle 1|\langle 1|1\rangle}{2} \\ &= \frac{1}{2}\mathbb{1}.\end{aligned}$$

A jelikož stopa jednotkové matice ve dvourozměrném systému je 2, pro získaný stav najdeme čistotu

$$\mathrm{Tr}\left((\hat{\rho}_1^A)^2\right) = \frac{1}{2} \leq 1,$$

takže jsme dostali smíšený stav z čistého. Jedná se dokonce o nejvíce smíšený stav, jaký je na dvourozměrném stavovém prostoru možný: pro libovolné binární měření dává pravděpodobnost $1/2$ pro oba výsledky. Odsud vidíme, že smíšené stavy mají v kvantové mechanice využití i bez statistické neurčitosti.

Čistotu redukovaného stavu (za předpokladu čistého stavu složeného systému) můžeme brát jako možnou míru provázanosti dvou podsystémů. V rámci daného tenzorového rozkladu systému na podsystémy je provázanost stavu nezávislá na volbě jejich jednotlivých bází. To je evidentní z nezávislosti částečné stopy na volbě báze systému, přes nějž ji sčítáme, a nezávislosti čistoty na volbě báze druhého.