# 1 Operátor hustoty

Popisujeme-li vývoj *uzavřeného* kvantového systému, vystačíme si většinou s pojmem *čistého stavu*. Jedná se o vektor v Hilbertově prostoru $\mathscr{H}$, který je danému kvantovému systému přidružen. Na daném Hilbertově prostoru je definován skalární součin, my si tento budeme značit v souhlase s Diracovou notací jako $\langle\cdot|\cdot\rangle$. Spolu s vektory Hilbertova prostoru uvažujeme i zobrazení, která na těchto vektorech působí. Neboť se omezujeme pouze na konečněrozměrné Hilbertovy prostory, jsou všechny operátory definované na daném Hilbertově prostoru h omezené, a tedy $\mathcal{B}(\mathscr{H})$ představuje množinu všech operátorů. Omezené operátory samotné tvoří další Hilbertův prostor, zavedeme-li na něm *Hilbert-Schmidtův skalární součin* následujícím způsobem. Mějme dva operátory $A, B \in \mathcal{B}(\mathscr{H})$, pak jejich skalární součin je definován vztahem

$$(A, B) \equiv \mathrm{Tr}(A^\dagger B), \tag{1}$$

kde $A^\dagger$ je operátor hermitovsky sdružený k operátoru $A$ a $\mathrm{Tr}(\cdot)$ značí stopu operátoru, viz sekci **??**. V prostoru operátorů můžeme dále vydělit množinu všech *pozorovatelných* $\{A \in \mathcal{B}(\mathscr{H}) | A^\dagger = A\}$ *na prostoru* $\mathscr{H}$ tvořenou hermitovskými operátory. Jak bylo předesláno, dosud se pracovalo především s čistými stavy, vektory. Operátory představující vývoj systému či měření vzaly vektor a vrátili jiný vektor. Když jsme měli jistou pozorovatelnou $A$, dostali jsme jejím změřením na daném čistém stavu $|\psi\rangle$ číslo, které bylo vlastním číslem operátoru $A$ a které jsme interpretovali jako výsledek měření. Pokud přitom nebyl vektor $|\psi\rangle$ vlastním vektorem pro $A$, obdrželi jsme různá čísla s různou pravděpodobností výskytu.

Důležité bylo si uvědomit, že vše, co o daném stavu kvantového systému jsme schopni zjistit, jsou průměrné hodnoty nejrůznějších veličin. Výsledek jediného měření na daném stavu neměl valné hodnoty. Rozlišujme nyní na chvíli důsledně dva pojmy, stav systému $\psi$ a jemu příslušný vektor $|\psi\rangle$. Stavem systému máme na mysli soubor všech jeho vlastností. Pro popis stavu kvantového systému tak je nezbytné uvést střední hodnoty $\langle A\rangle_\psi$ všech pozorovatelných $A$ na daném stavu působících. V případě stavů uzavřených systémů byla situace jednodušší v tom, že místo vypisování všech těchto středních hodnot jsme měli prostředek, jak je snadno spočítat. Tímto prostředkem byl vektor $|\psi\rangle$, z něhož jsme odpovídající střední hodnotu pozorovatelné $A$ obdrželi vypočtením výrazu $\langle\psi|A|\psi\rangle$, který jsme prohlásili za střední hodnotu $\langle A\rangle_\psi$. Pokud se dal stav systému takto popsat pomocí vektoru, nazvali jsme ho čistým stavem.

Použijme analogický postup v širším kontextu. Opusťme zažitou představu čistých stavů a definujme si stav jako zobrazení, které každé pozorovatelné přiřazuje reálné číslo, na které naklademe pár podmínek. Máme tedy přesně to, co chceme. Dané zobrazení vezme pozorovatelnou $A$ a vrátí odpovídající střední hodnotu $\langle A\rangle$. Korektní definice zní následovně.

**Definice 1.1. Stavem systému** nazveme lineární funkcionál $S : \mathcal{B}(\mathscr{H}) \to \mathbb{R}$ splňující dodatečné podmínky:

1. Normalizace: $S(\mathbb{I}) = 1$. (To jest, na identitu vrátí jedničku.)
2. Pozitivita: $S(A^\dagger A) \geq 0$, $\forall A \in \mathcal{B}(\mathscr{H})$. (To jest, na každý pozitivní operátor vrátí nezáporné číslo.)

Rieszova věta říká, že pro každý lineární funkcionál $S$ najdeme operátor $\rho \in \mathcal{B}(\mathscr{H})$ tak, že $S(A) = (\rho, A) = \mathrm{Tr}(\rho^\dagger A)$ pro každý $A \in \mathcal{B}(\mathscr{H})$. O tomto operátoru si ukážeme, že je hermitovský a má jednotkovou stopu. Pro důkaz $\rho = \rho^\dagger$ ukážeme, že $(\rho, A) = (\rho^\dagger, A)$ pro každý operátor $A \in \mathcal{B}(\mathscr{H})$. Rovnost však stačí ukázat pro $A$ hermitovkské, jelikož skalární součin je bilineární a každý operátor $A \in \mathcal{B}(\mathscr{H})$ je možné napsat jako součet dvou hermitovských operátorů $A = A_1 + iA_2 = (A + A^\dagger)/2 + i\left(i(-A + A^\dagger)/2\right)$. Nyní využijeme toho, že $S(\cdot)$ je reálné číslo, a tedy $S(\cdot) = S(\cdot)^*$. Pak dostáváme $(\rho, A) = \mathrm{Tr}(\rho^\dagger A) = S(A) = S(A)^* = \mathrm{Tr}(\rho^\dagger A)^* = \mathrm{Tr}(\rho^T A^*) = \mathrm{Tr}((\rho^T A^*)^T) = \mathrm{Tr}(A^\dagger \rho) = \mathrm{Tr}(\rho A^\dagger) = \mathrm{Tr}(\rho A) = (\rho^\dagger, A)$. Z normalizační podmínky navíc vyplývá $1 = S(\mathbb{I}) = \mathrm{Tr}(\rho^\dagger \mathbb{I}) = \mathrm{Tr}(\rho)$. Druhá definiční vlastnost nám přitom zajišťuje $0 \leq S(C) = \mathrm{Tr}(\rho C)$ pro všechny pozitivní operátory $C$. Pokud zvolíme $C = |\psi\rangle\langle\psi|$, tak $\mathrm{Tr}(\rho C) = \mathrm{Tr}(\rho|\psi\rangle\langle\psi|) = \langle\psi|\rho|\psi\rangle \geq 0$ pro všechny $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$. Operátor $\rho$ je tedy dokonce pozitivní.

**Definice 1.2.** Operátor z úvah výše se nazývá **operátor hustoty**, popř. **matice hustoty**. Neboť pozitivita již vynucuje hermitovost, tak lze operátor hustoty charakterizovat jako *pozitivní operátor s jednotkovou stopou*, tj. $\rho \geq 0$ a $\mathrm{Tr}(\rho) = 1$.

Z definičních vlastností plyne, že obecný operátor hustoty lze vyjádřit ve tvaru $\rho = \sum_i \lambda_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$, kde $\lambda_i \geq 0$, $\sum_i \lambda_i = 1$ a $\{\psi_i\}_i$ je ortonormální báze tvořená jeho vlastními vektory. Vidíme, že ač jsme si stav definovali jako jistý lineární funkcionál, veškerou práci se stavem daného systému lze redukovat na počítání s jemu odpovídající maticí hustoty. V následujícím budeme pojmy *operátor hustoty* a *stav* volně zaměňovat.

Množinu všech stavů na daném Hilbertově prostoru $\mathscr{H}$ označíme $\mathcal{S}(\mathscr{H})$. Jedná se o konvexní množinu, neboť konvexní kombinace operátorů hustoty je opět operátor hustoty. Extremálními body této množiny jsou přitom *čisté stavy*, tj. stavy, jejichž operátor hustoty je projektor $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ pro nějaké $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$. Máme-li zadán operátor hustoty, jak snadno zjistit, zda popisuje čistý stav? Nutnou a postačující podmínku uvádí následující tvrzení.

**Věta 1.1.** *Operátor hustoty $\rho \in \mathcal{S}(\mathscr{H})$ popisuje čistý stav právě tehdy, když* $\mathrm{Tr}(\rho^2) = 1$.

*Důkaz.* Pro důkaz implikace zleva si stačí uvědomit, že když je operátor hustoty $\rho$ čistý stav, tak existuje vektor $|\psi\rangle \in \mathscr{H}$ takový, že $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ je projektor. Platí tedy $\rho^2 = \rho$ a z normalizace operátoru hustoty ihned $\mathrm{Tr}(\rho^2) = \mathrm{Tr}(\rho) = 1$. Pro důkaz opačné implikace uvažujme obecný tvar operátoru hustoty, $\rho = \sum_i \lambda_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$, kde $\{|\psi_i\rangle\}_i$ je ortonormální báze a $\{\lambda_i\}_i$ tvoří pravděpodobnostní rozdělení. Jednoduchými výpočty zjistíme, že $\rho^2 = \sum_i \lambda_i^2 |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$, jehož stopa je $\mathrm{Tr}(\rho^2) = \sum_i \lambda_i^2$. Neboť je $\lambda_i \geq 0$ a $\sum_i \lambda_i = 1$, z podmínky $\mathrm{Tr}(\rho^2) = 1$ už rovnou plyne, že právě jedno vlastní číslo $\lambda_{i_0}$ je jednička a ostatní jsou nuly. Kdyby tomu tak nebylo, tak by všechna nenulová vlastní čísla splňovala $\lambda_i < 1$, což implikuje $\lambda_i^2 < \lambda_i$. Máme tedy $1 = \sum_i \lambda_i > \sum_i \lambda_i^2$, což je spor s předpoklady dokazované implikace. Celkem tak máme $\rho = \lambda_{i_0} |\psi_{i_0}\rangle\langle\psi_{i_0}| = |\psi_{i_0}\rangle\langle\psi_{i_0}|$ a $\rho$ je tak čistý stav. □

V případě dvourozměrného Hilbertova prostoru lze operátory hustoty vyjádřit pomocí Pauliho matic. **Pauliho matice** jsou tři $2 \times 2$ matice tvaru

$$\sigma_X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_Y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{2}$$

Operátory hustoty jsou pak tvaru $\rho = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + \tau_1\sigma_X + \tau_2\sigma_Y + \tau_3\sigma_Z)$, kde $\vec{\tau} = (\tau_1, \tau_2, \tau_3) \in \mathbb{R}^3$ je vektor, jehož velikost je $\|\vec{\tau}\| \leq 1$, jinak by $\rho$ nebyl pozitivní operátor. Pro $\|\vec{\tau}\| = 1$ popisuje $\rho$ čistý stav.

## 1.1 Evoluce operátoru hustoty v uzavřeném systému

Výše jsme uvedli, že se budeme zabývat otevřenými systémy. Udělejme na chvíli krok zpět a koukněme se, jak se operátor hustoty $\rho$ chová v případě uzavřeného systému. Uvažujme $\rho(t) = \sum_i \lambda_i |\psi_i(t)\rangle\langle\psi_i(t)|$ coby funkci času, kde jednotlivé bazické vektory $|\psi_i(t)\rangle$ podléhají Schrödingerově rovnici

$$\mathrm{i}\,\frac{\mathrm{d}\,|\psi_i(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = H|\psi_i(t)\rangle, \tag{3}$$

Zderivujeme-li operátor hustoty $\rho(t)$ podle času a dosadíme-li za vzniklé výrazy ze Schrödingerovy rovnice, dospíváme k rovnici tvaru

$$\frac{\mathrm{d}\,\rho(t)}{\mathrm{d}t} = -\mathrm{i}\,[H, \rho(t)] \equiv L(\rho(t)), \tag{4}$$

kde jsme si definovali zobrazení $L : \mathcal{B}(\mathscr{H}) \to \mathcal{B}(\mathscr{H})$, jež se nazývá **Liouvilleův operátor**. Jedná se o antihermitovský lineární superoperátor zachovávající stopu (viz později). Právě uvedenou rovnici budeme moci porovnat s evoluční rovnicí obecného operátoru hustoty, až budeme studovat vývoj otevřených systémů.

Časový vývoj operátoru hustoty lze explicitně v případě uzavřeného systému vyjádřit ve tvaru

$$\rho(t) = U(t)\,\rho(0)\,U^\dagger(t), \tag{5}$$

kde $U(t)$ je jednoparametrický systém jistých unitárních operátorů. Stále platí, že časovým vývojem přejde čistý stav opět na čistý stav. U otevřených systémů už vývoj stavu nepůjde popsat pomocí unitárního operátoru tímto způsobem.

## 1.2 Popis složeného systému

Velmi důležitým konceptem v kvantové teorii je pojem složeného systému. Každému kvantovému systému je přidružen Hilbertův stavový prostor $\mathscr{H}$. V axiomatickém přístupu kvantové teorie se postuluje, že Hilbertův prostor systému složeného ze systémů $A$ a $B$ je roven tenzorovému součinu $\mathscr{H} = \mathscr{H}_A \otimes \mathscr{H}_B$ Hilbertova prostoru $\mathscr{H}_A$ systému $A$ a Hilbertova prostoru $\mathscr{H}_B$ systému $B$. Množina všech omezených operátorů na prostoru složeného systému je přitom rovna $\mathcal{B}(\mathscr{H}) = \mathcal{B}(\mathscr{H}_A \otimes \mathscr{H}_B) = \mathcal{B}(\mathscr{H}_A) \otimes \mathcal{B}(\mathscr{H}_B)$. Víme tedy, jak ze dvou systémů udělat systém jeden, jakým postupem ale postupovat v opačném směru? Mějme operátor hustoty $\rho$ popisující společný stav podsystémů $A$ a $B$. Jak vypadá stav podsystému $A$ samotného?

Kdybychom jako $\rho_A$ označili stav samotného podsystému $A$, platila by pro libovolnou pozorovatelnou $M_A$ působící pouze na podsystému $A$ samozřejmá rovnost $\langle M_A \rangle_{\rho_A} = \mathrm{Tr}(\rho_A\, M_A)$. Neboť pozorovatelná $M_A$ nijak neovlivňuje podsystém $B$, měla by platit i rovnost vztažená k celému systému $\langle M_A \rangle_{\rho_A} = \mathrm{Tr}(\rho M)$, kde $\rho$ je stav celého systému a $M$ je pozorovatelná $M_A$

chápaná jako operátor na celém systému. Dohromady tedy $\mathrm{Tr}(\rho M) = \mathrm{Tr}(\rho_A M_A)$. Pokud je celkový stav faktorizovaného tvaru $\rho = \rho_A \otimes \rho_B$, je zřejmě $M = M_A \otimes \mathbb{I}$. Rovnost středních hodnot je pak splněna, neboť $\mathrm{Tr}(\rho M) = \mathrm{Tr}((\rho_A \otimes \rho_B)(M_A \otimes \mathbb{I})) = \mathrm{Tr}(\rho_A M_A)\,\mathrm{Tr}(\rho_B) = \mathrm{Tr}(\rho_A M_A)$. Existuje i jiný tvar vyjma $M = M_A \otimes \mathbb{I}$? Pro všechny $\rho_A$ a $\rho_B$ musí být splněno $\mathrm{Tr}((\rho_A \otimes \rho_B)\,M) = \mathrm{Tr}((\rho_A \otimes \rho_B)\,(M_A \otimes \mathbb{I}))$, to znamená $\mathrm{Tr}((\rho_A \otimes \rho_B)\,(M - M_A \otimes \mathbb{I})) = 0$. Žádný jiný tvar operátoru $M$ již tedy neexistuje. Pro faktorizovaný stav systému $\rho = \rho_A \otimes \rho_B$, kde $M_A$ je pozorovatelná na podsystému $A$, je odpovídající pozorovatelná $M$ působící na celém systému tvaru $M = M_A \otimes \mathbb{I}$. Neboť je množina faktorizovaných stavů totální v prostoru operátorů, platí získaný výsledek pro všechny stavy $\rho$.

Musí tedy platit $\mathrm{Tr}(\rho_A M_A) = \mathrm{Tr}(\rho(M_A \otimes \mathbb{I}))$. Rozepíšeme-li si stopu explicitně v ortonormální bázi $\{|i^{(A)}\rangle|j^{(B)}\rangle\}_{ij}$, dostáváme $\mathrm{Tr}(\rho(M_A \otimes \mathbb{I})) = \sum_{ij}\langle i^{(A)}|\langle j^{(B)}|(\rho(M_A \otimes \mathbb{I}))|i^{(A)}\rangle|j^{(B)}\rangle = \sum_i \langle i^{(A)}|(\sum_j \langle j^{(B)}|\rho|j^{(B)}\rangle)M_A|i^{(A)}\rangle$. Když si označíme $\rho_A = \sum_j \langle j^{(B)}|\rho|j^{(B)}\rangle$, je poslední výraz roven $\sum_i \langle i^{(A)}|\rho_A M_A|i^{(A)}\rangle = \mathrm{Tr}(\rho_A M_A)$, kde nyní jde stopa již jen přes podsystém $A$.

**Definice 1.3.** Vzorec $\sum_j \langle j^{(B)}|\rho|j^{(B)}\rangle$, kterým jsme v předchozím odstavci zavedli operátor $\rho_A$, nazýváme **částečná stopa** operátoru $\rho$ přes podsystém $B$ (angl. *partial trace over subsystem B*) a značíme $\mathrm{Tr}_B(\rho)$. Neboli

$$\rho_A = \sum_j \langle j^{(B)}|\rho|j^{(B)}\rangle = \mathrm{Tr}_B(\rho). \tag{6}$$

Dobrá, máme zavedený operátor $\rho_A$, který splňuje požadovanou rovnost středních hodnot, jaký vztah má ale tento operátor ke skutečnému systému $A$? Ukážeme, že je tento operátor určen jednoznačně. K danému podsystému tedy existuje právě jeden operátor schopný konzistentně popisovat střední hodnoty libovolných pozorovatelných na tomto podsystému. Pro spor nechť existuje nějaký jiný operátor $\tilde{\rho}_A$, pro nějž $\mathrm{Tr}(M_A \tilde{\rho}_A) = \mathrm{Tr}(M\rho)$. Tento operátor lze rozložit do báze prostoru $\mathcal{B}(\mathscr{H}_A)$ tvořené hermitovskými operátory $\{B_i\}_i$. Dostáváme tak rozvoj do Fourierových koeficientů způsobem

$$\tilde{\rho}_A = \sum_i B_i(B_i, \tilde{\rho}_A) = \sum_i B_i\,\mathrm{Tr}(B_i \tilde{\rho}_A) = \sum_i B_i\,\mathrm{Tr}((B_i \otimes \mathbb{I})\rho) = \sum_i B_i\,\mathrm{Tr}(B_i \rho_A) = \rho_A, \tag{7}$$

což je spor. Operátor $\rho_A$ je tedy určen jednoznačně a můžeme ho interpretovat jako stav podsystému $A$. Poznamenejme ještě důležitou věc, že informace obsažená ve stavech jednotlivých podsystémů *není* schopna v obecném případě reprodukovat stav celého systému. Pokud mezi oběma podsystémy existují korelace, provedením částečné stopy tyto korelace z popisu systému vypadnou.

## 1.3 Schmidtův rozklad

Při práci se stavy i při důkazech nejrůznějších tvrzení je velmi užitečné následující tvrzení, díky kterému lze každý čistý stav vyjádřit v jistém pěkném tvaru. Tomuto vyjádření se říká **Schmidtův rozklad** (angl. *Schmidt decomposition*).

**Věta 1.2.** Schmidtův rozklad. *Nechť* $|\psi\rangle \in \mathscr{H}_A \otimes \mathscr{H}_B$ *je čistý stav. Pak existuje ortonormální báze* $\{|e_j^{(A)}\rangle\}_j$ *prostoru* $\mathscr{H}_A$ *a ortonormální báze* $\{|f_j^{(B)}\rangle\}_j$ *prostoru* $\mathscr{H}_B$ *takové, že*

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{d} \alpha_j |e_j^{(A)}\rangle \otimes |f_j^{(B)}\rangle, \tag{8}$$

*kde* $d = \min\{\dim \mathscr{H}_A, \dim \mathscr{H}_B\}$*. Koeficienty* $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \ldots, \alpha_d)$ *lze navíc vždy volit jako nezáporná čísla splňující rovnost* $\|\vec{\alpha}\| = \||\psi\rangle\|$.

*Důkaz.* Uvažujme stav podsystému $A$, $\rho_A = \mathrm{Tr}_B(|\psi\rangle\langle\psi|)$. Tento lze jistě rozložit do ortonormální báze vlastních vektorů, $\rho_A = \sum_i \alpha_i^2 |e_i^{(A)}\rangle\langle e_i^{(A)}|$. Vlastní čísla operátoru $\rho_A$ lze psát ve tvaru kvadrátu, neboť jsou díky pozitivitě operátoru nezáporná. Dále určitě můžeme vyjádřit vektor $|\psi\rangle$ ve tvaru $|\psi\rangle = \sum_i |e_i^{(A)}\rangle \otimes |\varphi_i^{(B)}\rangle$, kde $|\varphi_i^{(B)}\rangle$ jsou nějaké vhodné vektory z prostoru $\mathscr{H}_B$. Pak platí $\rho_A = \mathrm{Tr}_B(|\psi\rangle\langle\psi|) = \mathrm{Tr}_B(\sum_{ij} |e_i^{(A)}\rangle\langle e_j^{(A)}| \otimes |\varphi_i^{(B)}\rangle\langle\varphi_j^{(B)}|) = \sum_{ij} |e_i^{(A)}\rangle\langle e_j^{(A)}| \,\mathrm{Tr}(|\varphi_i^{(B)}\rangle\langle\varphi_j^{(B)}|)$. Využijeme-li vztahu $\mathrm{Tr}(|a\rangle\langle b|) = \langle b|a\rangle$, redukuje se poslední výraz na $\sum_{ij} |e_i^{(A)}\rangle\langle e_j^{(A)}| \langle\varphi_j^{(B)}|\varphi_i^{(B)}\rangle$. Tento výsledek můžeme porovnat s prvním vyjádřením operátoru $\rho_A$ uvedeným výše, abychom shrnuli $\langle\varphi_j^{(B)}|\varphi_i^{(B)}\rangle = \alpha_i^2 \delta_{ij}$. Vektory $\{|\varphi_i^{(B)}\rangle\}_i$ jsou tedy navzájem kolmé a po vhodném přeškálování z nich můžeme vytvořit ortonormální bázi $|f_i^{(B)}\rangle \coloneqq \frac{1}{\alpha_i}|\varphi_i^{(B)}\rangle$. Vektor $|\psi\rangle$ lze tak psát ve tvaru $|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |e_i^{(A)}\rangle \otimes |f_i^{(B)}\rangle$, což bylo dokázati. □

**Definice 1.4.** Koeficientům $\alpha_1, \ldots, \alpha_d$ v rozkladu (8) se říká **Schmidtovy koeficienty**. Počet nenulových Schmidtových koeficientů ve Schmidtově rozkladu se nazývá **Schmidtovo číslo** či **Schmidtova hodnost** (angl. *Schmidt number* či *Schmidt rank*). Schmidtovu hodnost stavu $\rho$ budeme označovat symbolem $\mathrm{rank}\,\rho$.

Největším rozdílem mezi obecným rozkladem operátoru a jeho Schmidtovým rozkladem je v tom, že ve druhém jmenovaném sčítáme jen přes jeden index, ke každému bazickému vektoru prostoru $\mathscr{H}_A$ přísluší právě jeden bazický vektor prostoru $\mathscr{H}_B$. Ze Schmidtova rozkladu lze však vyčíst daleko více. Například vezmeme-li si vektor $|\psi\rangle$ ve vyjádření (8), jeho redukované stavy jsou tvarů $\rho_A = \sum_i \alpha_i^2 |e_i^{(A)}\rangle\langle e_i^{(A)}|$ a $\rho_B = \sum_i \alpha_i^2 |f_i^{(B)}\rangle\langle f_i^{(B)}|$. Operátory hustoty obou podsystémů mají tedy *stejné spektrum*! V souvislosti se Schmidtovým rozkladem je užitečné uvést následující proceduru.

**Poznámka 1.1.** Uvažujme nějaký systém $A$ s operátorem hustoty $\rho_A = \sum_i \alpha_i^2 |e_i\rangle\langle e_i| \in \mathscr{H}_A$, který není obecně čistý. Potom ke studovanému systému $A$ lze uměle přidat pomocný systém $B$ o Hilbertově prostoru $\mathscr{H}_B$ tak, že existuje čistý stav $|\psi\rangle \in \mathscr{H}_A \otimes \mathscr{H}_B$ splňující $\rho_A = \mathrm{Tr}_B(|\psi\rangle\langle\psi|)$. Jinými slovy, ke každému operátoru hustoty $\rho_A$ z prostoru $\mathscr{H}_A$ lze najít čistý stav $|\psi\rangle$ v prostoru $\mathscr{H}_A \otimes \mathscr{H}_B$ tak, že $\rho_A$ lze interpretovat jako stav podsystému $A$, kdy se přitom celý systém $A + B$ nachází v čistém stavu $|\psi\rangle$. Prostoru $\mathscr{H}_B$ se v angličtině říká *ancilla* a jeho dimenzi lze položit rovnou Schmidtově číslu operátoru $\rho_A$, tj. $\dim \mathscr{H}_B = \mathrm{rank}\,\rho_A$. Využívajíce postupu při důkazu předchozí věty lze zjevně položit $|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |e_i\rangle|f_i\rangle$, kde $\{|f_i\rangle\}_i$ je nějaká ortonormální báze prostoru $\mathscr{H}_B$.

Právě popsané matematické hříčce vhodně přidávající pomocný systém k původní úloze se říká **purifikace** či **vyčišťování** (angl. *purification*). Pro znalé připomínáme, že právě uvedená purifikace (stavů) nemá nic společného s *purifikací provázání.*

**Poznámka 1.2.** *„Monogamie stavů“: Čisté stavy nemohou být korelovány s jiným systémem.* Mějme složený systém $A+B$ ve stavu $\rho \in \mathcal{S}(\mathscr{H}_A \otimes \mathscr{H}_B)$, přičemž stav podsystému $A$ nechť je čistý, $\mathrm{Tr}_B(\rho) = \rho_A = |\psi\rangle\langle\psi|$ pro jisté $|\psi\rangle \in \mathscr{H}_A$. Pak stav tohoto podsystému nevykazuje žádné korelace se stavem systému $B$. Důvod je následující. Vzhledem k předchozí poznámce můžeme vždy zavést pomocný systém $C$ a najít vektor $|\omega\rangle \in \mathscr{H}_A \otimes \mathscr{H}_B \otimes \mathscr{H}_C$ tak, že $\mathrm{Tr}_C(|\omega\rangle\langle\omega|) = \rho$. Tento vektor je tedy purifikací stavu $\rho$, současně je ale i purifikací stavu $|\psi\rangle$. To lze jen tak, že $|\omega\rangle = |\psi\rangle \otimes |\varphi_{BC}\rangle$ pro jisté $|\varphi_{BC}\rangle \in \mathscr{H}_B \otimes \mathscr{H}_C$. Celkem tedy $\rho = \mathrm{Tr}_C(|\omega\rangle\langle\omega|) = |\psi\rangle\langle\psi| \otimes \mathrm{Tr}_C(|\varphi_{BC}\rangle\langle\varphi_{BC}|)$. Vidíme tedy explicitně, že stav složeného systému $A+B$ je ve faktorizovaném tvaru, jenž nepřipouští žádné korelace mezi oběma podsystémy.

## 1.4 Klasifikace stavů podle korelací

Uvažujme dva Hilbertovy prostory $\mathscr{H}_1$ a $\mathscr{H}_2$ a množinu stavů definovaných na jejich tenzorovém součinu, $\mathcal{S}(\mathscr{H}_1 \otimes \mathscr{H}_2)$. Tuto množinu lze rozdělit na podmnožiny tvořené vždy stavy, jejichž tvar je podobný co do jejich přípravy a kvantových vlastností. Základní dělení na čisté a smíšené stavy jsme již nastínili v předchozích sekcích, následující seznam uvádí další podpřípady.

- **Smíšené stavy** – Odpovídající operátor hustoty není projektor.
  - **Faktorizované stavy** – Stav $\rho$ je faktorizovaný, pokud lze zapsat ve tvaru tenzorového součinu $\rho = \rho_1 \otimes \rho_2$, kde $\rho_i \in \mathcal{S}(\mathscr{H}_i)$. Tyto stavy zřejmě tvoří podmnožinu separabilních stavů.
  - **Separabilní stavy** – Stav $\rho$ je separabilní, pokud lze zapsat ve tvaru sumy faktorizovaných stavů $\rho = \sum_i \alpha_i \rho_1^{(i)} \otimes \rho_2^{(i)}$, kde $\rho_1^{(i)} \in \mathcal{S}(\mathscr{H}_1)$, $\rho_2^{(i)} \in \mathcal{S}(\mathscr{H}_2)$ a $\{\alpha_i\}_i$ tvoří pravděpodobnostní rozdělení, tj. $\alpha_i > 0$ a $\sum_i \alpha_i = 1$. Takovýmto stavům se také říká *statistické směsi* či *klasicky korelované stavy.* Korelace v měřeních na takovýchto stavech lze totiž popsat čistě klasicky, žádné kvantové efekty není třeba uvažovat. V tom se tato rodina stavů zásadně liší od té následující tvořené provázanými stavy. Obecný tvar separabilního stavu se zdá být dost obecný. Naprosto libovolný operátor lze rozložit do tvaru $A = \sum_i \alpha_i E_i \otimes F_i$, kde $\{E_i\}_i$ je ortonormální báze v $\mathcal{B}(\mathscr{H}_1)$ a podobně $\{F_i\}_i$ je ortonormální báze v $\mathcal{B}(\mathscr{H}_2)$. Nejdůležitější rozdíl tohoto obecného případu od případu separabilních stavů je v tom, že nyní operátory $E_i$ a $F_i$ samotné musejí být operátory hustoty.
  - **Provázané stavy** – Všechny stavy, které nejsou separabilní, se nazývají provázané. Tyto stavy vykazují čistě kvantové korelace, které lze využít při kvantovém počítání. Kvantové korelace se silně využívají například v případě kvantové teleportace.
- **Čisté stavy** – Odpovídající operátor hustoty je projektor.

- **Neprovázané stavy** – Čistý stav $|\psi\rangle$ je neprovázaný, pokud lze zapsat ve tvaru $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$. Vidíme, že se jedná o analogii faktorizovaných stavů ve smíšeném případě. Na druhou stranu, vektor, který bychom vyjádřili analogicky případu separabilních smíšených stavů, již nebude čistý. Zbývají nám tak již pouze provázané stavy.
- **Provázané stavy** – Čistý stav $|\psi\rangle$ je provázaný, pokud není neprovázaný. Obecně je tedy tvaru $|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |e_i\rangle \otimes |f_i\rangle$, viz (8). Stav $|\psi\rangle$ je přitom provázaný právě tehdy, když má alespoň dva nenulové koeficienty $\alpha_i$, tj. $\operatorname{rank}|\psi\rangle \geq 2$. Z množiny provázaných stavů se vydělují **maximálně provázané stavy** $|\Omega\rangle$. Jedná se o stavy, pro něž jsou stavy podsystémů *maximálně smíšené*. Jinými slovy, čistý stav $|\Omega\rangle$ je maximálně provázaný právě tehdy, když $\rho_1 \equiv \mathrm{Tr}_2(|\Omega\rangle\langle\Omega|) = \frac{1}{d_1}\mathbb{I}_1$ a $\rho_2 \equiv \mathrm{Tr}_1(|\Omega\rangle\langle\Omega|) = \frac{1}{d_2}\mathbb{I}_2$. Ze Schmidtova rozkladu plyne $d_1 = d_2 = d$, maximálně provázaný stav je tedy tvaru $|\Omega\rangle = \sum_i \frac{1}{\sqrt{d}}|e_i\rangle \otimes |f_i\rangle$.