3-4 純粋状態 と 混合状態
pure state　　　mixed state

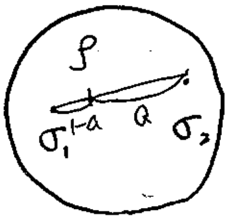
$$\mathcal{S}(\mathcal{H}) = \{\rho \in \mathcal{L}(\mathcal{H}) \mid \rho \geq 0 \quad \mathrm{Tr}\,\rho = 1\}$$

密度作用素全体

$\mathcal{S}(\mathcal{H})$ は 凸集合

$\sigma_1, \sigma_2 \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$

$\rho = a\sigma_1 + (1-a)\sigma_2 \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$



$(a \in (0,1))$

Def mixed state

$\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ は mixed state

$\underset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$ $\exists \sigma_1, \sigma_2\ (\sigma_1 \neq \sigma_2)$, $\exists a \in (0,1)$

$\rho = a\sigma_1 + (1-a)\sigma_2$

Def pure state

$\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ は pure state

$\underset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$ ρ は mixed state ではない

Lem (pure state の特徴付け)

$\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ について以下は同値

(1) ρ は pure state

(2) $\exists |\psi\rangle \in \mathcal{H}$, $\| \psi \| = 1$, $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$

(3) ρ の固有値 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$ $(n = \dim \mathcal{H})$ について

唯一値が 1 他はゼロ.

(4) $\mathrm{rank}\, \rho = 1$

証明 (2) ⇔ (3) ⇔ (4) を示す.

固有値分解を考える.

$$\rho = \sum_{i=1}^{n} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{固有値}}}{\lambda_i} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{固有ベクトル ONS}}}{|e_i\rangle\langle e_i|}$$

(2) ⇔ (3) : 明らか.

$$\mathrm{rank}\, \rho \overset{\text{def}}{=} \dim \overline{\mathrm{Im}\, \rho}$$

$$\mathrm{Im}\, \rho = \{ \rho |x\rangle \mid |x\rangle \in \mathcal{H} \}.$$

image 像

$$\rho|x\rangle = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i |e_i\rangle\langle e_i | x\rangle$$
$$= \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \langle e_i | x\rangle |e_i\rangle$$

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_r > \lambda_{r+1} = \cdots = \lambda_n = 0.$$

としても一般性を失わない.

$$\rho|x\rangle = \sum_{i=1}^{r} \underbrace{\lambda_i \langle e_i|x\rangle}_{c_i \text{とおく}} |e_i\rangle$$

このとき $|x\rangle$ を $\mathcal{H}$ 上で動かすと $(c_1, c_2, \cdots, c_r)$ は $\mathbb{C}^r$ 上を動く

よって．

$$\{\rho|x\rangle \mid |x\rangle \in \mathcal{H}\} = \left\{\sum_{i=1}^{r} c_i|e_i\rangle \,\middle|\, (c_1, \cdots, c_r) \in \mathbb{C}^r\right\}$$

すなわち

rank ρ = (0 でない ρ の固有値の個数)

よって

(4) rank $\rho = 1$

$\Leftrightarrow$ $\lambda_1, \cdots, \lambda_n$ の中で唯一のものが非ゼロ，$\sum \lambda_i = 1$

$\Leftrightarrow$ (3)

(1) $\Rightarrow$ (3)　$\neg(3) \Rightarrow \neg(1)$　(対偶) contraposition cf. 基礎 I

(3) $\lambda_1, \cdots \lambda_n$ の唯一値が 1 他はゼロ が成立しないと考えると，

$1 > \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_r > \lambda_{r+1} = \cdots = \lambda_n = 0$．

($\lambda_1, \cdots \lambda_r$ まで非ゼロ) 2個以上非ゼロ，である

このとき固有値分解は

$$\rho = \sum_{i=1}^{r} \lambda_i |e_i\rangle\langle e_i|$$

$$= \overset{a}{\lambda_1} \underbrace{|e_1\rangle\langle e_1|}_{\sigma_1} + \overset{1-a}{(1-\lambda_1)} \sum_{i=2}^{r} \frac{\lambda_i}{1-\lambda_1} \underbrace{|e_i\rangle\langle e_i|}_{\sigma_2}$$

$$\mathrm{Tr}\,\sigma_2 = \sum_{i=2}^{r} \frac{\lambda_i}{1-\lambda_1} = \frac{\sum_{i=2}^{r} \lambda_i}{1-\lambda_1}$$ 　一方．$\mathrm{Tr}\,\rho = \sum_{i=1}^{r} \lambda_i = 1$ より

$= 1$．

$\sigma_2 \geq 0$ は明らかなので $\sigma_2 \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$．

$\sigma_1 \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$も明らか.

$\sigma_1 \neq \sigma_2$ も明らか

よって $\neg(1)$: mixed state が示された.

$(2) \Rightarrow (1)$ を示す.(背理法,帰謬法)

$(2) \Rightarrow (1) \equiv \neg(2) \vee (1)$

$\equiv \neg((2) \wedge \neg(1))$

$(2) \wedge \neg(1)$ が常に偽(false)であることを示す.

---

(2)を仮定する.又,(1)が成立しないとする. ⇝ 矛盾.

(2) $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$, $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, $\|\psi\| = 1$

(1)が成立しない ρ = mixed state なので

$\exists \sigma_1, \sigma_2$ $(\sigma_1 \neq \sigma_2)$, $\exists a \in (0,1)$

$\rho = a\sigma_1 + (1-a)\sigma_2$

とかける.よって.

$|\psi\rangle\langle\psi| = a\sigma_1 + (1-a)\sigma_2$

ここで.ONS $\underset{|\psi\rangle}{\underset{\shortparallel}{|e_1\rangle}}$, $|e_2\rangle, \cdots, |e_n\rangle$

となるものを取る.

$\langle e_k | \underset{\shortparallel(2)}{\rho} | e_l \rangle \overset{\neg(1)}{=} a\langle e_k|\sigma_1|e_l\rangle + (1-a)\langle e_k|\sigma_2|e_l\rangle$

$\langle e_k|e_1\rangle\langle e_1|e_l\rangle$

$$\shortparallel$$

$$\begin{cases} 1 & (k,l) = (1,1) \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

(1) ρ は pure state

(2) $\exists |\psi\rangle \in \mathcal{H}$, $\|\psi\| = 1$, $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$

(2) ⇒ (1) の証明

(2) を仮定する，(1) が成立しないと仮定して矛盾を導く（背理法）

(1) が成立しないとすると，

$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ は mixed state なので，

① $|\psi\rangle\langle\psi| = a\sigma_1 + (1-a)\sigma_2 \quad (\sigma_1 \neq \sigma_2)$

となる $\sigma_1, \sigma_2 \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$, $0 < a < 1$ が存在

ここで，ONS として

$$|e_1\rangle = |\psi\rangle,\ |e_2\rangle,\ \cdots,\ |e_n\rangle$$

となるものを取ってくると ① より

$k = 2, 3, \cdots, n$ について

$$0 = \langle e_k | \underset{\overset{\shortparallel}{e_1}}{\psi} \rangle\langle\psi| e_k\rangle = a\underbrace{\langle e_k|\sigma_1 e_k\rangle}_{\geq 0} + (1-a)\underbrace{\langle e_k|\sigma_2 e_k\rangle}_{\geq 0}$$

直交

これより各項がゼロ，$a > 0$ より

$$\underbrace{\langle e_k|\sigma_1 e_k\rangle}_{\shortparallel} = 0$$

$$\langle e_k|\sqrt{\sigma_1}\sqrt{\sigma_1}e_k\rangle = \langle\sqrt{\sigma_1}e_k|\sqrt{\sigma_1}e_k\rangle$$

よって

$$\sqrt{\sigma_1}|e_k\rangle = 0 \quad \therefore \quad \sigma_1|e_k\rangle = 0$$

左から $\sqrt{\sigma_1}$ をかける

$\langle e_k|\sigma = 0$

$(k \neq 1)$

よって $(k,l) \neq (1,1)$ について

$$\langle e_k | \sigma e_l \rangle = 0 \quad \text{—} \quad ②$$

一方で

$$1 = \mathrm{Tr}\,\sigma_1 = \sum_{k=1}^{n} \langle e_k | \sigma_1 e_k \rangle = \langle e_1 | \sigma_1 e_1 \rangle \quad \text{—} \quad ③$$

よって σ_1 の成分表示より，②③から

$$\sigma_1 = \sum_{k=1}^{n} \sum_{l=1}^{n} \langle e_k | \sigma_1 e_l \rangle |e_k\rangle\langle e_l|$$

$$= |e_1\rangle\langle e_1| = |\psi\rangle\langle\psi|$$

同様にして $\sigma_2 = |\psi\rangle\langle\psi|$ も成立

よって $\sigma_1 = \sigma_2$ となるが

これは①の $\sigma_1 \neq \sigma_2$ と矛盾 //

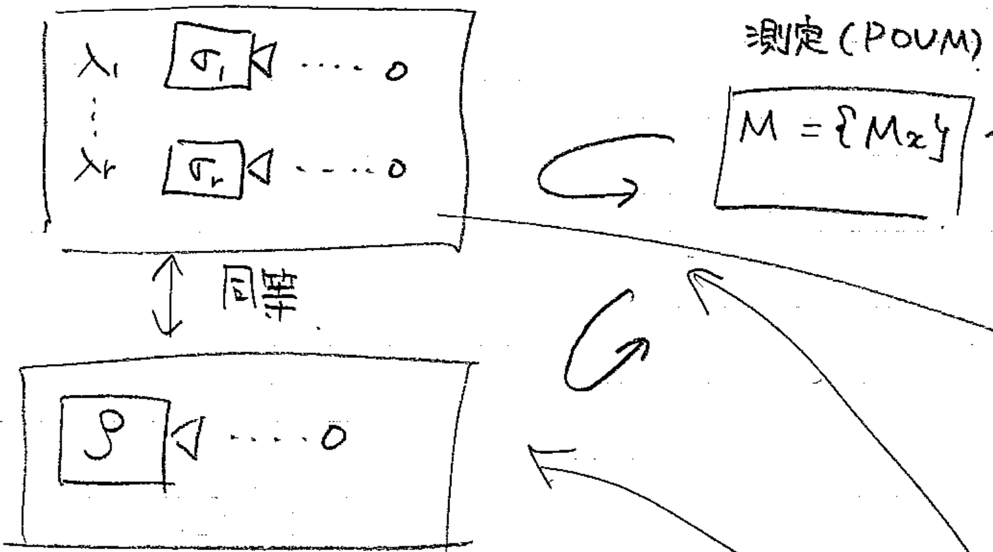
3-5 混合状態について.

$$\mathfrak{S}(\mathcal{H}) \ni \rho = \sum_{i=1}^{r} \underbrace{\lambda_i}_{\text{非負}} \underbrace{|e_i\rangle\langle e_i|}_{\text{pure state}}$$

rank $\rho = r$.

これは, pure state $\sigma_i = |e_i\rangle\langle e_i|$ $\quad i=1,2,\cdots,r$

の確率 $\lambda_1,\cdots\lambda_r$ についての重ね合わせ.



$M_x \geq 0, \ \sum_x M_x = I.$

(確率 λ_i で粒子発生源を選ぶ)

上の状況で同時確率

$$p(i,x) = \underset{\substack{\uparrow \\ \text{選ばれた発生源}}}{p(i)}\, p(x|i)$$

$$= \lambda_i \operatorname{Tr} \sigma_i M_x$$

$$p(x) = \sum_{i=1}^{r} \lambda_i \operatorname{Tr} \sigma_i M_x$$

$$= \operatorname{Tr}\left(\sum_{i=1}^{r} \lambda_i \sigma_i\right) M_x$$

$$= \operatorname{Tr} \rho M_x.$$

上の状況≡下の状況

この粒子に対する測定から両者を区別することはできない.

注意

$$\rho = \sum_{i=1}^{r} \lambda_i |e_i\rangle\langle e_i| \quad (\text{固有値分解})$$

以外にも

$$\rho = \sum_{j=1}^{m} \underset{\uparrow \text{確率}}{a_j} |f_j\rangle \underset{\uparrow \text{ONS とは限らない}}{\langle f_j|}$$

となる純粋状態への分解は無数にある。

例

$\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$$

$$\rho = \frac{1}{2}\underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}(1\ 0)}_{|e_1\rangle\langle e_1|} + \frac{1}{2}\underbrace{\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}(0\ 1)}_{|e_2\rangle\langle e_2|}$$

$$= \frac{1}{2}\left\{\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}}_{|f_1\rangle} \cdot \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}(1\ 1)}_{\langle f_1|}\right\} + \frac{1}{2}\left\{\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}}_{|f_2\rangle} \cdot \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}(1\ -1)}_{\langle f_2|}\right\}$$