


DIPARTIMENTO
DI MATEMATICA



SAPIENZA
UNIVERSITÀ DI ROMA

Appunti sui qubit per il corso di IFM anno 2022-2023

© 2020 di Dario Benedetto con licenza attribuzione - non commerciale
- condividi allo stesso modo 4.0 internazionale CC BY-NC-SA 4.0 

Dario Benedetto - <http://brazil.mat.uniroma1.it/dario>

Sapienza Università di Roma
Dipartimento di Matematica
Piazzale Aldo Moro n. 5, 00185 Roma
www.mat.uniroma1.it

Qubit 2022/2023

in aggiornamento

26 maggio 2023

Indice

1	Variabili aleatorie e spazi di Hilbert	3
2	Qubit	3
3	Gli esperimenti quantistici	5
4	Le matrici di Pauli	6
5	Dinamica	8
6	Il prodotto tensore di due spazi di Hilbert	10
7	Due qubit	12
8	Operatori densità	15
9	Tracce parziali	16

Introduzione

La scoperta/costruzione della meccanica quantistica è una delle parti più affascinanti della storia della fisica e della scienza in generale, e ha comportato lo sviluppo di importanti idee matematiche. Tuttavia la sua reale comprensione richiede ampie basi di fisica, e molto tempo a disposizione. Facendo forza sulle tipica capacità dei matematici di muoversi con sicurezza una volta stabilite le regole del gioco, farò qui una rapida introduzione agli aspetti matematici più semplici della meccanica quantistica, utilizzando un esempio che sembra di grande rilevanza per le applicazioni future, il qubit.

Ho seguito il primo dei seguenti testi. Il secondo è testo divulgativo ma con qualche spunto tecnico, e può essere una lettura utile e interessante.

- Bernhard Thaller **Advanced Visual Quantum Mechanics**
- L. Susskind, A. Friedman **Meccanica quantistica** - il minimo indispensabile per fare della (buona) fisica, Raffaello Cortina Editore

La notazione di Dirac

Per i vettori in \mathbb{C}^n d'ora in poi userò la notazione bra-ket di Dirac: $|v\rangle$ è un vettore (di tipo ket), $\langle v|$ è l'elemento del duale individuato dal teorema di rappresentazione di Riesz ed è il vettore di tipo bra. Dunque con

$$\langle v_1|v_2\rangle$$

indico sia l'azione dell'elemento del duale $\langle v_1|$ sul vettore $|v_2\rangle$, sia il prodotto scalare tra $|v_1\rangle$ e $|v_2\rangle$.

Indicherò con $|u\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $|d\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ la base canonica in \mathbb{C}^2 . Un'osservazione importante: se $|v\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = a_1|u\rangle + a_2|d\rangle$ allora $\langle v| = \bar{a}_1\langle u| + \bar{a}_2\langle d|$. Ne segue che se $|w\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$ allora

$$|v\rangle\langle w| = \begin{pmatrix} a_1\bar{b}_1 & a_1\bar{b}_2 \\ a_2\bar{b}_1 & a_2\bar{b}_2 \end{pmatrix}.$$

1 Variabili aleatorie e spazi di Hilbert

Con grande approssimazione, la meccanica quantistica può essere pensata come un diverso modo di descrivere fenomeni probabilistici.

In probabilità classica discreta, si assegna lo spazio degli eventi $\Omega = \{e_1, \dots, e_n\}$ e si assegnano le probabilità p_i con le quali i singoli eventi possono verificarsi, con in vincoli $p_i \geq 0$ e $\sum_i p_i = 1$. Inoltre spesso agli eventi vengono assegnati numeri, che considererò solo reali, realizzando così una variabile aleatoria. Per esempio, costruisco una variabile aleatoria x assegnando all'evento e_i il numero x_i ; il valore atteso di x è

$$\mathbb{E}x = \sum x_i p_i.$$

Più in generale un'osservabile $f(x)$ ha valore atteso

$$\mathbb{E}(f(x)) = \sum f(x_i) p_i.$$

Il curioso modo quantistico di implementare questo schema consiste nell'identificare gli eventi elementari e_i , $i = 1 \dots n$ con una base dello spazio \mathbb{C}^n . Considero dunque come eventi gli elementi di una base $|e_i\rangle$ di \mathbb{C}^n , e per fissare i valori delle probabilità p_i , considero un vettore unitario $|v\rangle = \sum v_i |e_i\rangle$ identificando $|v_i|^2$ con p_i . Si noti che $|v\rangle$ e $e^{i\alpha}|v\rangle$, con $\alpha \in \mathbb{R}$ identificano danno gli stessi valori di probabilità. Il vettore unitario $|v\rangle$ è lo **stato del sistema**.

Per fissare la variabile aleatoria che assegna x_i all'evento e_i , considero l'operatore

$$A = \sum_{i=1}^n x_i |e_i\rangle\langle e_i|$$

che, per l'assunzione di realtà degli x_i risulta autoaggiunto. Noto che

$$\langle v|Av\rangle = \sum_{ij} \langle v|e_i\rangle \langle e_i|A|e_j\rangle \langle e_j|v\rangle = \sum_{ij} \bar{v}_i v_j x_j \delta_{ij} = \sum_i |v_i|^2 x_i = \mathbb{E}x$$

Gli **osservabili** del sistema sono dunque gli operatori autoaggiunti, e il valore atteso della corrispondente variabile aleatoria si ottiene valutando la forma quadratica sullo stato del sistema.

Nell'esempio di probabilità classica che ho fatto, quello dell'estrazione di evento tra n possibilità, e_i sono gli eventi elementari e gli osservabili sono le funzioni da Ω in \mathbb{R} . Assegnato uno "stato", cioè i valori delle probabilità p_i degli eventi e_i , sono note tutte le probabilità degli osservabili, cioè delle funzioni degli eventi a valori reali.

Nel caso quantistico la struttura degli osservabili è molto più ricca: gli osservabili sono tutti gli operatori autoaggiunti: assegnare uno stato permette di determinare le probabilità assegnate ai valori di un osservabile, però a partià di stato posso considerare altri osservabili (cioè altri operatori autoaggiunti). Cambiare osservabile può quindi voler dire cambiare lo spazio degli "eventi elementari", mantenendo fisso lo stato del sistema. Esploriamo il caso del qubit, cioè della variabile aleatoria dicotomica nel caso quantistico.

2 Qubit

Un esempio di evento dicotomico nel formalismo quantistico è dato dalla scelta dello spazio \mathbb{C}^2 e di una coppia di vettori orogonali, per esempio $|u\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $|d\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Uno stato v ha la forma

$$v = v_1|u\rangle + v_2|d\rangle$$

e $|v_1|^2$ è la probabilità che si verifichi $|u\rangle$, $|v_2|^2$ è la probabilità che si verifichi $|d\rangle$. Considero anche l'osservabile

$$\sigma_3 = |u\rangle\langle u| - |d\rangle\langle d|$$

cioè la matrice

$$\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

che rappresenta la variabile aleatoria che assegna $+1$ a $|u\rangle$ e -1 a $|d\rangle$. Ci sono molte situazioni fisiche descritte da questo sistema. Ne considero due.

Spin

Alcune particelle sono dotate di una qualità fisica, dalle dimensioni del momento angolare, misurabile attraverso opportuni esperimenti (tra cui quello di Stern e Gerlach). Alcune particelle hanno spin che può assumere valori interi (i bosoni), altre il cui spin può assumere valori semi-interi (i fermioni). Per una particella di spin $1/2$, un apparato sperimentale che misura lo spin nella direzione dell'asse z darà risultato $1/2$ o $-1/2$, con probabilità che dipendono dallo stato del sistema. Poiché lo spin viene immaginato come un momento angolare, la rotazione oraria viene identificata con il vettore di \mathbb{R}^3 che punta verso l'alto, quella antioraria con il vettore di \mathbb{R}^3 che punta verso il basso. Per questo indico gli stati quantistici corrispondenti con le lettere u -up e d -down.

L'osservabile che sto considerando è

$$\frac{1}{2}\sigma_3$$

che restituisce $1/2$ a $|u\rangle$ e $-1/2$ a $|d\rangle$.

Fotoni polarizzati

Le equazioni di Maxwell nel vuoto ammettono onde piane come soluzioni, caratterizzate dal fatto che il campo elettrico E e quello magnetico B sono in ogni punto perpendicolari tra

loro, e perpendicolari alla direzione di propagazione dell'onda che dunque consiste in una oscillazione trasversale. Indico con $\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$ i versori di una terna cartesiana di riferimento, e considero un'onda che si propaga nella direzione x con velocità c :

$$E = |E| \hat{k}_2 e^{2\pi i(x-ct)/\lambda}$$

$$cB = |E| \hat{k}_3 e^{2\pi i(x-ct)/\lambda}$$

dove λ è la lunghezza d'onda, $|E|$ è l'ampiezza del campo elettrico, e \hat{k}_2, \hat{k}_3 sono due versori ortogonali in modo che $\hat{i}, \hat{k}_2, \hat{k}_3$ sia una terna ortogonale orientata come $\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$.

Un'onda così fatta è **polarizzata** nel piano individuato da \hat{i}, \hat{k}_2 . Se mettiamo un filtro polarizzato parallelo al piano \hat{i}, \hat{j} , passeranno solo alcuni fotoni. Per la precisione, se

$$\hat{k}_2 = \cos \alpha \hat{i} + \sin \alpha \hat{j}$$

la probabilità che un fotone passi è $\cos^2 \alpha$, che non passi è $\sin^2 \alpha$. A livello di \mathbb{C}^2 , descrivo il sistema con l'evento $|u\rangle$ (il fotone passa) e l'evento ortogonale $|d\rangle$ (il fotone non passa), e lo stato del sistema come

$$|v\rangle = \cos \alpha |u\rangle + \sin \alpha |d\rangle.$$

L'osservabile che sto considerando è

$$\frac{1}{2}(\mathbf{I} + \sigma_3)$$

che coincide con $|u\rangle\langle u|$ e restituisce 1 a $|u\rangle$ e 0 a $|d\rangle$.

Restando sull'esempio della luce polarizzata, cosa accade se ruoto il filtro di 45° intorno all'asse \hat{i} , in verso antiorario? Passeranno con certezza i fotoni polarizzati nella direzione

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{j} + \hat{k})$$

e non passeranno quelli polarizzati nella direzione ortogonale

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{j} - \hat{k})$$

A livello \mathbb{C}^2 , ho **cambiato base**:

$$|r\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|u\rangle + |d\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$|l\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|u\rangle - |d\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

L'osservabile che sto considerando è

$$\frac{1}{2}(\mathbf{I} + \sigma_1)$$

dove

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Infatti questa matrice è

$$\sigma_1 = |r\rangle\langle r| - |l\rangle\langle l|$$

e dunque ha $|r\rangle$ e $|l\rangle$ come autovettori, di autovalori $+1$ e -1 rispettivamente.

Come interpreto questa nuova base in termini di spin? La scelta della base $|r\rangle$ e $|l\rangle$ corrisponde a posizionare il rivelatore in una direzione ortogonale all'asse z , che chiamo asse x . L'osservabile considerato è

$$\frac{1}{2}\sigma_2.$$

3 Gli esperimenti quantistici

Estraete una pallina dall'urna e osservatene il colore, per esempio bianco. Se la riosservate, il colore rimarrà bianco, e non c'è più nulla di probabilistico. Consideriamo una particella dotata di spin $1/2$, e misuratene lo spin lungo l'asse z . Se osservate spin $1/2$ e poi rifate la misura, osserverete con certezza spin $1/2$ in quella direzione.

Però la similitudine classico/quantistico finisce qui: nel caso quantistico potete decidere di rimisurare lo spin ma in un'altra direzione, per esempio x . In accordo con la rappresentazione in \mathbb{C}^2 , otterrete $\pm\frac{1}{2}$ con probabilità $1/2$. Quindi il sistema non ha perso la sua natura probabilistica,

Quello che accade, in generale, è che fare una misura di un osservabile $A = \sum x_i |e_i\rangle\langle e_i|$ per uno stato quantistico $v = \sum_i v_i |e_i\rangle$, restituisce x_i con probabilità $|v_i|^2$, e, se la misura dà x_i , lo stato del sistema **cambia** e diventa $|e_i\rangle$ (o meglio $e^{i\alpha}|e_i\rangle$ per un inconoscibile valore reale α). Questo fenomeno prende il nome di “collasso della funzione d'onda” ed è uno dei punti più concettualmente spiazzanti delle teorie quantistiche. D'altra parte questa assunzione, cioè che il sistema misurato percepiti in un autovettore dell'operatore relativo alla grandezza che ho misurato, rendere perfettamente conto di quello che realmente accade negli esperimenti. Per esempio, se considerate un fascio di luce polarizzata orizzontalmente, un filtro polarizzato a 45 gradi farà passare solo metà della luce, e un secondo filtro orizzontale dimezzerà ancora il flusso luminoso, senza nessun ricordo della polarizzazione iniziale.

4 Le matrici di Pauli

È chiaro che deve esistere un operatore σ_2 , diagonalizzato da una base di \mathbb{C}^2 , che corrisponda a misurare spin nella direzione y . Ogni elemento di questa base deve avere coefficienti di modulo quadro $1/2$ nei vettori delle due basi già considerate: $|u\rangle, |d\rangle$ e $|r\rangle, |l\rangle$. In effetti in \mathbb{C}^2 si possono trovare terne di basi con questa proprietà (ma non quaterne). La base mancante è

$$|i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad |o\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

I nomi stanno per “in” e “out”, così come r e l stanno per “right” e “left” (ma ovviamente i nomi non sono importanti). L'operatore corrispondente è

$$\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

che è proprio $|i\rangle\langle i| - |o\rangle\langle o|$.

Le matrici σ_h sono le matrici di Pauli e hanno le seguenti proprietà, di facile dimostrazione.

Proposizione 4.1 (Proprietà delle matrici di Pauli). *Per ogni h e k in $1, 2, 3$:*

i) hanno traccia nulla: $\text{Tr } \sigma_h = 0$

ii) $\sigma_h^2 = \mathbf{I}$

iii) $\sigma_1 \sigma_2 = i \sigma_3$ (etc.)

iv) $[\frac{1}{2} \sigma_h, \frac{1}{2} \sigma_k] = i \varepsilon_{hkr} \frac{1}{2} \sigma_r$

Si noti che iv) ha un'analogia formale con le relazioni di commutazione delle componenti del momento della quantità di moto classico:

$$\{\ell_h, \ell_k\} = \varepsilon_{hkr} \ell_r$$

(il ruolo delle parentesi di Poisson è svolto commutatore diviso per i). Questa analogia fa parte del motivo per cui lo spin viene considerato come un "momento angolare" intrinseco della particella.

Per esercizio, si provi che la sottoalgebra degli operatori a coefficienti reali generata da \mathbf{I} , $-i\sigma_h$ è una realizzazione dei quaternioni.

Indico con $S_{\mathbb{R}^3}$ il bordo della palla unitaria in \mathbb{R}^3 , e con $S_{\mathbb{C}^2}$ il bordo della palla unitaria in \mathbb{C}^2 , cioè l'insieme degli stati del sistema.

Teorema 4.1. *Se A è un operatore autoaggiunto su \mathbb{C}^2 , allora*

$$A = \alpha \mathbf{I} + \rho \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$$

dove $\alpha, \rho \in \mathbb{R}$, $\rho \geq 0$, $\mathbf{n} \in S_{\mathbb{R}^3}$ e

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \sum_h n_h \sigma_h.$$

Inoltre $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ ha autovalori ± 1 .

Dettagli al lettore.

Vale la pena determinare $|n\rangle$ autostato di autovalore 1 per $\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$. Devo risolvere

$$\begin{pmatrix} n_3 & n_1 - in_2 \\ n_1 + in_2 & -n_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

Dalla prima equazione ottengo

$$(n_1 - in_2)x_2 = (1 - n_3)x_1$$

Pertanto posso scegliere x_1 proporzionale a $n_1 - in_2$ e x_2 proporzionale a $1 - n_3$. Normalizzando a 1 definisco

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(1 - n_3)}} \begin{pmatrix} n_1 - in_2 \\ 1 - n_3 \end{pmatrix}$$

Scrivendo \mathbf{n} in coordinate polari $\mathbf{n} = (\sin \vartheta \cos \varphi, \sin \vartheta \sin \varphi, \cos \vartheta)$ si ottiene

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(1 - \cos \vartheta)}} \begin{pmatrix} \sin \vartheta e^{-i\varphi} \\ \cos \vartheta \end{pmatrix}$$

Ovviamente questo vettore è definito a meno di un coefficiente complesso di modulo 1. Però è unico se si richiede che la seconda componente sia reale positiva.

Teorema 4.2. Per ogni stato $|v\rangle \in S_{\mathbb{C}^2}$ esiste unico $\mathbf{v} \in S_{\mathbb{R}^3}$ tale che $|v\rangle$ è autovettore di autovalore 1 di $\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\sigma}$.

Usando la rappresentazione polare dei numeri complessi, posso scrivere

$$|v\rangle = \begin{pmatrix} \rho_1 e^{i\alpha_1} \\ \rho_2 e^{i\alpha_2} \end{pmatrix} = e^{i\alpha_2} \begin{pmatrix} \rho_1 e^{i(\alpha_1 - \alpha_2)} \\ \rho_2 \end{pmatrix}$$

con $\rho_1^2 + \rho_2^2 = 1$ e $\rho_i \geq 0$. Esiste dunque $\eta \in [0, \pi/2)$ tale che $\rho_1 = \cos \eta$, $\rho_2 = \sin \eta$. Sia $\vartheta = 2\eta$. Allora $\sin \vartheta = 2 \sin \eta \cos \eta$, $1 - \cos \vartheta = 2 \sin^2 \eta$. Scegliendo $n \in S_{\mathbb{R}^2}$ di coordinate ϑ e $\varphi = -(\alpha_1 - \alpha_2)$ si ha

$$|v\rangle = e^{i\alpha_2} |n\rangle.$$

Con un po' di lavoro, si può mostrare che operando una rotazione in \mathbb{C}^2 attraverso un operatore unitario U a determinante 1, si opera una rotazione in \mathbb{R}^3 di n . In questo modo si definisce un omeomorfismo non iniettivo da SU_2 a SO_3 (in realtà è un rivestimento doppio).

Concludo questa sezione tornando all'esempio dei fotoni polarizzati. Mentre nel caso dello spin è chiara la corrispondenza tra le tre basi ortonormali standard e la posizione del rilevatore di spin lungo i tre assi cartesiani nello spazio reale, è meno ovvio cosa accade con la luce polarizzata. Nel caso della luce ho illustrato la corrispondenza tra r e l con le autofunzioni del rilevatore inclinato di 45 gradi. Dobbiamo trovare a cosa corrispondono i vettori della base i, o . Considero l'onda piana

$$E_1 = |E| \hat{i} e^{2\pi i(x-ct)/\lambda}$$

e l'onda piana ruotata di 90 gradi e sfasata di $\pi/2$:

$$E_2 = |E| \hat{j} e^{2\pi i(x-ct)/\lambda + i\pi/2}.$$

Ricordo che $e^{i\pi/2} = i$. Le sovrappongo normalizzandole

$$E = |E| e^{2\pi i(x-ct)/\lambda} \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{i} + i\hat{j})$$

Per capire come è fatta quest'onda ne considero la parte reale. Indicando con $\phi(t) = 2\pi(x - ct)/\lambda$ ho

$$|E| \frac{1}{\sqrt{2}} (\cos \phi(t) \hat{j} - \sin \phi(t) \hat{k})$$

il cui modulo è $|E|$ per ogni t . Nel piano \hat{j}, \hat{k} il vettore E ruota con velocità costante e modulo costante. Si tratta di un'onda **polarizzata circolarmente**. Un filtro polarizzatore orizzontale lungo l'asse \hat{j} fa passare la metà della luce (attenzione: dovete usare tutta l'espressione complessa in cui i coefficienti di \hat{j} e \hat{k} hanno modulo quadro 1/2, e non la sola parte reale). Lo stato "ortogonale" è l'onda polarizzata circolarmente nell'altro verso:

$$E = |E| e^{2\pi i(x-ct)} \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{j} - i\hat{k})$$

Si noti che considerando E nel piano complesso e identificando \hat{j} con $|u\rangle$ e \hat{k} con $|d\rangle$ le combinazioni lineari delle onde piane nello spazio fisico che danno l'onda inclinata di 45 gradi e l'onda polarizzata circolarmente sono esattamente le stesse che definisco la base $|r\rangle$, $|l\rangle$ e la base $|i\rangle$ e $|o\rangle$.

5 Dinamica

La dinamica del sistema deve necessariamente verificare il requisito di conservare la norma degli stati, che è 1. Assumendo inoltre la linearità del flusso, si ottiene la caratterizzazione della dinamica. Supponiamo infatti che il flusso sia dato da un operatore lineare unitario $U(t)$. Dunque lo stato al tempo t si ottiene dallo stato al tempo 0 con

$$|v(t)\rangle = U(t)|v(0)\rangle.$$

Sia G il generatore del flusso, cioè l'operatore lineare

$$G = \left. \frac{\partial}{\partial t} \right|_0 U$$

Deve valere $U^*U = \mathbf{I}$. Derivando in t e ponendo $t = 0$ si ottiene

$$G^* + G = 0$$

cioè G deve essere antiautoaggiunto. Sia

$$H = iG$$

G è antiautoaggiunto se e solo se H è autoaggiunto.

Dunque l'equazione di evoluzione quantistica è

$$i\partial_t|v\rangle = H|v\rangle$$

dove H è un operatore autoaggiunto, detto hamiltoniano. Si provi per esercizio il viceversa: se $G = iH$ con H autoaggiunto, allora il flusso $U(t)$ è unitario.

Sia $|e_i\rangle$, $i = 1, \dots, n$ una base di autovettori in cui H è diagonalizzato

$$H = \sum_i E_i |e_i\rangle\langle e_i|$$

e sia $|v\rangle = \sum_i v_i |e_i\rangle$ il dato iniziale. Allora

$$|v(t)\rangle = \sum_i e^{-iE_i t} v_i |e_i\rangle$$

La dinamica non fa altro che moltiplicare per una fase i coefficienti di $|v\rangle$ nella base che diagonalizza H . Questo fatto implica che la distribuzione di probabilità dei valori dell'osservabile H rimane invariata nel tempo.

Nei sistemi fisici l'operatore H è l'analogo quantistico dell'energia del sistema. L'evoluzione **conserva** l'energia nel senso descritto sopra. In particolare, il sistema preparato nell'autostato di energia E_i rimane in quell'autostato. Sia A un altro osservabile, cioè un operatore autoaggiunto. Se $[A, H] = 0$, allora esiste una base di autovettori comune ai due operatori, dunque la dinamica non cambia nemmeno la distribuzione di probabilità dei valori di A . Il sistema però è effettivamente in evoluzione. Faccio un esempio, considerando una particella con spin in un campo magnetico \mathbf{B} . L'operatore hamiltoniano risulta proporzionale a $\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ che esprime l'interazione dello spin con il campo. Per semplicità considero B orientato come

l'asse z , e dunque $H = b\sigma_3$, con $b > 0$. Suppongo che il sistema sia nello stato iniziale $|r\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$. Gli autovettori di H sono $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ di autovalore b , e $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ di autovalore $-b$. Dunque

$$|v(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-ibt} \\ e^{ibt} \end{pmatrix} = e^{-ibt} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{2ibt} \end{pmatrix}$$

Mentre la distribuzione di probabilità dell'esito della misura di σ_3 rimane invariata, quella dell'esito della misura di σ_1 cambia. Infatti,

$$|v(t)\rangle = \frac{1}{2}(e^{ibt} + e^{-ibt})|r\rangle - \frac{1}{2}(e^{ibt} - e^{-ibt})|l\rangle = \cos(bt)|r\rangle - \sin(bt)|l\rangle$$

Lo stato $|v(t)\rangle$ sta dunque "ruotando" in analogia con quello che accade a una trottola soggetta a un campo di gravità. Le probabilità di ottenere ± 1 misurando σ_1 sono, rispettivamente, $\cos^2(bt)$, $\sin^2(bt)$. Si noti che se $bt = \pi/2$, lo stato coincide con $|l\rangle$.

Non è difficile comprendere che componendo diversi flussi per diversi hamiltoniani si riesca a realizzare una qualunque trasformazione unitaria per un qubit. Questa fatto, esteso ai sistemi di più qubit, è alla base della teoria della computazione quantistica.

Si noti in particolare che σ_n sono operatori unitari, in quanto autoaggiunti con $\sigma_n^2 = \mathbf{I}$. Questo operatore "ruota" di 90° la base degli stati di spin ortogonali a \mathbf{n} (???)

Nel caso di una particella soggetta a una energia potenziale $V(x)$, lo stato del sistema è una funzione $\psi(x, t)$ in $L^2(\mathbb{R}^3)$, l'operatore H è

$$H\psi = -\frac{1}{2}\Delta\psi + V(x)\psi$$

cioè ha una parte proporzionale al laplaciano (che rappresenta l'energia cinetica) e l'operatore di moltiplicazione per V . Il numero $|\psi(x, t)|$ si interpreta come densità di probabilità spaziale della particella. Il valore atteso dell'energia potenziale è

$$\int |\psi(x)|^2 V(x) dx,$$

in accordo con l'interpretazione di $|\psi(x)|^2$ come densità di probabilità della posizione della particella.

Il valore atteso dell'energia cinetica è invece

$$(\psi, -\Delta/2\psi) = \frac{1}{2} \int |\nabla\psi|^2.$$

L'equazione per ψ è l'equazione di Schrödinger (in varie di queste espressioni c'è una costante fisica, \hbar , che ho messo a 1).

6 Il prodotto tensore di due spazi di Hilbert

Supponiamo di considerare una particella nello spazio, descritta da una funzione $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ ma dotata di spin, cioè di uno stato descritto da un qubit. Come descrivo questi due aspetti del sistema? Considerando l'osservabile σ_3 , devo poter descrivere la probabilità di avere spin

1/2 e spin $-1/2$ al variare del punto x in cui si trova la particella. Sembra dunque sensato descrivere lo stato come

$$\begin{pmatrix} \psi^+(x) \\ \psi^-(x) \end{pmatrix} = \psi^+(x)|u\rangle + \psi^-(x)|d\rangle$$

richiedendo che $\psi^\pm \in L^2(\mathbb{R}^3)$ con il vincolo

$$\|\psi^+\|_2^2 + \|\psi^-\|_2^2 = 1$$

La struttura matematica che sta sotto questo esempio è quella di prodotto tensore di spazi di Hilbert.

Dati H e K spazi di Hilbert. Sia $\{|e_i\rangle\}_i \in \mathbb{N}$ una base per H e sia $\{|g_j\rangle\}_j \in \mathbb{N}$ una base per K . Lo spazio $H \otimes K$ è lo spazio delle forme bilineari da $H' \times K'$ in \mathbb{C} . Siano $|x\rangle \in H$, e $|y\rangle \in K$. Sia $|x\rangle \otimes |y\rangle$ la forma bilineare definita da

$$|x\rangle \otimes |y\rangle(\langle a|, \langle b|) = \langle a|e\rangle \langle b|g\rangle$$

In $H \otimes K$ ci saranno tutte le combinazioni lineari di forme bilineari di questo tipo. Usando la decomposizione dei vettori di H e K nella base, si ottiene che le forme possono essere scritte come

$$\sum_{ij} c_{ij} |e_i\rangle \otimes |g_j\rangle$$

Il prodotto scalare su $H \otimes K$ si definisce in modo naturale definendo il prodotto scalare come

$$(|x_1\rangle \otimes |y_1\rangle, |x_2\rangle \otimes |y_2\rangle) = \langle x_1|x_2\rangle \langle y_1|y_2\rangle,$$

e poi estendendolo alle combinazioni lineari. Se, come temo, questa costruzione risulta un po' incomprensibile, è il caso di proporre un'altra. Come sopra ho H e K con delle loro basi. Posso considerare lo spazio delle coppie di elementi della base di H e della base di K . Indicherò queste coppie come

$$|e_i\rangle \otimes |g_j\rangle$$

e definisco $H \otimes K$ considerando le coppie costruite come una base di questo spazio, imponendo

$$(|e_i\rangle \otimes |g_j\rangle, |e_h\rangle \otimes |g_k\rangle) = \delta_{ih} \delta_{jk}$$

Il prodotto scalare si definisce sui generici elementi di $H \otimes K$ per combinazione lineare sugli elementi della base. Di dimostra in modo relativamente facile che questo prodotto scalare è invariante per cambiamento di base nei due spazi.

Qualche esempio può chiarire, tenendo a mente la versione semplificata: prima faccio le coppie di elementi della base, e poi costruisco il prodotto tensore come combinazione lineare. Considero $L^2(\Omega)$ e una sua base ϕ_i . $L^2(\Omega) \otimes L^2(\Omega)$ ha come base $\phi_i \otimes \phi_j$. Posso realizzare questa base considerando $\phi_i(x)\phi_j(y)$ e definendo il prodotto scalare come quello in $L^2(\Omega)$. In pratica

$$L^2(\Omega) \otimes L^2(\Omega) = L^2(\Omega).$$

Si noti, invece, che

$$L^2(\Omega) \times L^2(\Omega) = L^2(\Omega; \mathbb{C}^2)$$

che è lo spazio L^2 delle funzioni da Ω a valori vettore nel piano complesso. Il prodotto scalare in quest'ultimo spazio è la somma dei prodotti scalari delle due componenti, mentre

nel prodotto tensore, nel caso di elementi della forma $|x\rangle \otimes |y\rangle$ è il prodotto dei prodotti scalari. Si noti che, per linearità

$$0 = 0|x\rangle \otimes |y\rangle = |x\rangle \otimes |0\rangle = |0\rangle \otimes |y\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle.$$

Altri due esempi:

$$\mathbb{C}^3 \times \mathbb{C}^2 = \mathbb{C}^5$$

infatti gli elementi di questo spazio sono le coppie ordinate di un vettore a tre componenti e un vettore a due. Invece

$$\mathbb{C}^3 \otimes \mathbb{C}^2 \simeq \mathbb{C}^6$$

infatti gli elementi di questo spazio hanno una base formata da 3×2 elementi:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Supponiamo che A sia un operatore su H e B un operatore su K . Si definisce l'operatore $A \otimes B$ da $H \otimes K$ in sé definendolo prima sugli elementi del tipo $|x\rangle \otimes |y\rangle$ come

$$A \otimes B |x\rangle \otimes |y\rangle = |Ax\rangle \otimes |By\rangle$$

e poi estendendolo per linearità. Considerare $A \otimes B$ corrisponde a misurare A per il primo sottosistema e B per il secondo. La variabile aleatoria corrispondente è il prodotto (tensore) delle variabili: se A ha autovalori λ_i e B ha autovalori μ_j , il loro prodotto tensore ha autovalori $\lambda_i \mu_j$.

7 Due qubit

Siamo ora in grado di affrontare un sistema composto da due qubit. Lo spazio degli stati è $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$, che è isomorfo a \mathbb{C}^4 . Dati $|u\rangle$ e $|v\rangle$, scriverò per semplicità $|u\rangle \otimes |v\rangle = |uv\rangle$. Con questa notazione, una base dello spazio è data da

$$|uu\rangle, |ud\rangle, |du\rangle, |dd\rangle.$$

Si tratta di una base di **stati prodotto**: gli osservabili sui due qubit sono probabilisticamente indipendenti. Combinazioni lineari di stati prodotto in genere non sono stati prodotto (così come la somma di prodotti di funzioni di due variabili diverse non è una funzione prodotto). Consideriamo ora un operatore A a un qubit. L'operatore $A \otimes \mathbf{I}$ si limita a misurare A sul primo qubit, l'operatore $\mathbf{I} \otimes A$ misura A sul secondo qubit. Consideriamo ora il valore atteso del primo operatore su uno stato prodotto

$$\langle uv|A \otimes \mathbf{I}|uv\rangle = \langle u|A|u\rangle \langle v|v\rangle = \langle u|A|u\rangle$$

Come si vede, questo valore atteso è indipendente dallo stato del secondo qubit.

Per poter lavorare agevolmente con due qubit è utile rappresentarli in \mathbb{C}^4 . Identifico la base canonica $|uu\rangle, |ud\rangle, |du\rangle, |dd\rangle$ con

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

È utile capire come rappresentare in \mathbb{C}^4 il prodotto tensoriale di operatori $A \otimes B$. Indico con a_{ij} gli elementi di A , e con b_{ij} gli elementi di B . Consideriamo il blocco 2×2 in alto a sinistra della rappresentazione matriciale di $A \otimes B$. Si tratta degli elementi di matrice in cui nel primo spazio ho sempre $|u\rangle$, e sono gli elementi

$$\begin{pmatrix} \langle uu|A \otimes B|uu\rangle & \langle uu|A \otimes B|ud\rangle \\ \langle ud|A \otimes B|uu\rangle & \langle ud|A \otimes B|ud\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} \\ a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} \end{pmatrix}$$

Identità analoghe valgono per gli altri 4 blocchi. Si arriva così all'espressione a blocchi

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B \\ a_{21}B & a_{22}B \end{pmatrix}$$

(Esiste un'espressione analoga che distribuisce A con i coefficienti di B , ma è più complessa; si noti, per esempio, che b_{11} moltiplica gli elementi di A nelle posizioni $(1, 1), (1, 3), (3, 1), (3, 3)$.) Questa operazione tra matrici 2×2 che restituisce una matrice 4×4 prende anche il nome di **prodotto di Kronecker**.

Non tutti gli operatori su $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ sono prodotti tensore di due operatori. Per esempio

$$\mathcal{S} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

è l'operatore che scambia $|ud\rangle$ con $|du\rangle$, e scambia anche $|uu\rangle$ con $|uu\rangle$ e $|dd\rangle$ con $|dd\rangle$ (cioè li lascia invariati). Pertanto \mathcal{S} è l'operatore che **scambia** i due qubit, infatti trasforma $|xy\rangle$ in $|yx\rangle$ (lo si provi per esercizio). Si noti che

$$\mathcal{S} = \mathbf{I} - 2\mathcal{P}$$

dove

$$\mathcal{P} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Non è difficile osservare che $|uu\rangle$ e $|dd\rangle$ sono autovettori di autovalore nullo di \mathcal{P} , e lo stesso vale per

$$|t_3\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}}(|ud\rangle + |du\rangle).$$

Al contrario

$$|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|ud\rangle - |du\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

è autovettore di autovalore 1, inoltre \mathcal{P} è proprio il proiettore su $|s\rangle$ (esercizio).

Si chiama **base di Bell** la base formata da $|s\rangle$ (detto singoletto), e dagli stati di tripletto $|t_3\rangle$,

$$|t_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|uu\rangle - |dd\rangle), \quad |t_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|uu\rangle + |dd\rangle).$$

Per quello che segue è anche utile considerare l'operatore

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^3 \sigma_i \otimes \sigma_i$$

che rappresenta l'energia di interazione dei due spinori.

Calcolo i prodotti di Kronecker tra le matrici di Pauli

$$\begin{aligned} \sigma_1 \otimes \sigma_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_2 \otimes \sigma_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_3 \otimes \sigma_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Dunque

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathcal{S} - 2\mathcal{P} = \mathbf{I} - 4\mathcal{P}.$$

La base di Bell diagonalizza $\mathcal{P}, \mathcal{S}, \mathcal{H}$, con lo stato di singoletto di autovalore 1, -1, -3, rispettivamente, mentre gli stati di tripletto hanno autovalori 0, 1, 1, rispettivamente.

Usando le espressioni esplicite scritte sopra, è facile provare che

$$\sigma_i \otimes \sigma_i |s\rangle = -|s\rangle$$

Sul singoletto, dunque, lo spin delle due componenti è necessariamente opposto. Per combinazione lineare, si prova facilmente che lo stesso è vero per $(\mathbf{n} \cdot \sigma) \otimes (\mathbf{n} \cdot \sigma)$. Misuriamo, invece σ_3 solo sul primo qubit:

$$\sigma_3 \otimes \mathbf{I} |s\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}(|dd\rangle + |uu\rangle) = |t_2\rangle$$

Dunque il valore atteso della misura del primo spin nella direzione z è

$$\langle s | \sigma_3 \otimes \mathbf{I} | s \rangle = 0.$$

Questo vuol dire che c'è la massima incertezza sul valore delle due componenti dello spin (lungo qualunque direzione), ma sappiamo con certezza che la misura delle due componenti deve essere opposta.

Lo stato di singoletto è uno stato **entangled** (come anche gli stati di tripletto). Riteniamo meglio questo fatto dopo aver esplorato come descrivere un sottosistema di un sistema quantistico.

8 Operatori densità

Analogamente alla descrizione probabilistica di un sistema di EDO data dall'equazione di Liouville, si può descrivere l'evoluzione di un sistema quantistico data una distribuzione di probabilità sul dato iniziale, evolvendo ogni dato iniziale con l'equazione di Schrödinger. Uno dei formalismi più utili per questo problema è quello degli operatori densità, che ora introduco, riscrivendo in un modo diverso il valore atteso di un'osservabile A .

Sia $|v\rangle$ uno stato; il valore atteso di A è $\langle v | A | v \rangle$. Supponiamo di assegnare con probabilità π_i lo stato $|v_i\rangle$, con $i = 1, \dots, N$. Si noti che non sto richiedendo nulla sui v_i , possono essere più di n (la dimensione dello spazio) e possono non essere ortogonali.

La misura dell'osservabile A ha due fonti di casualità: la scelta casuale dello stato (e si tratta di una casualità di tipo classico), e il fatto che la misura di A restituisce dei valori casuali, con probabilità in accordo con lo sviluppo dello stato negli autostati di A . In ogni caso, il valore atteso è evidentemente dato da

$$\sum_i \pi_i \langle v_i | A | v_i \rangle.$$

Manipolo questa espressione. Poiché A è autoaggiunto, lo diagonalizzo come

$$A = \sum_{j=1}^n \lambda_j |e_j\rangle \langle e_j|.$$

Inserendo questa espressione nel valore atteso ottengo

$$\sum_{i=1}^N \pi_i \sum_{j=1}^n \lambda_j \langle v_i | e_j \rangle \langle e_j | v_i \rangle$$

che riscrivo, cambiando l'ordine delle somme e raccogliendo e_j a destra e sinistra, come

$$\sum_{j=1}^n \lambda_j \langle e_j | \left(\sum_{i=1}^N \pi_i |v_i\rangle \langle v_i| \right) | e_j \rangle$$

Questa espressione suggerisce di associare alla "mistura" di stati l'operatore

$$\rho = \sum_{i=1}^N \pi_i |v_i\rangle \langle v_i|$$

che prende il nome di “operatore densità”. Il valore atteso di A è dunque

$$\sum_{j=1}^n \lambda_j \langle e_j | \rho | e_j \rangle = \text{Tr}(A\rho).$$

dove a destra c'è la traccia della matrice $A\rho$.

È utile di ricordare che

$$\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA).$$

e soprattutto che la traccia è invariante per trasformazioni unitarie. Questo fatto è vero anche in dimensione infinita, ma bisogna lavorarci un po', si può vedere il Reed, Simon “Methods of modern mathematical physics”, vol I, Functional Analysis.

Abbiamo visto che se abbiamo una descrizione statistica di un sistema quantistico, cioè se scegliamo degli stati con certe probabilità, i valori attesi degli osservabili si ottengono mediante l'operazione di traccia del prodotto dell'operatore associato all'osservabile per la matrice densità che descrive la mistura di dati.

In generale, un **operatore densità** è un operatore autoaggiunto ρ semidefinito positivo, e di traccia 1. È facile verificare che

$$\rho = \sum_{i=1}^N \pi_i |v_i\rangle \langle v_i|$$

è autoaggiunto se π_i sono reali, che è semidefinito positivo se π_i sono non negativi. Se la somma dei π_i è 1, allora la traccia è 1. Infatti, per quanto dimostrato sopra

$$\text{Tr}(\rho) = \text{Tr}(\mathbf{I}\rho) = \sum_i \pi_i \langle v_i | \mathbf{I} | v_i \rangle = \sum_i \pi_i = 1.$$

Se scegliamo con probabilità 1 un singolo stato v , l'operatore ρ è esattamente il proiettore su v . È abbastanza facile mostrare che se ρ è un proiettore, la condizione di traccia 1 implica che sia il proiettore su uno stato. Gli operatori densità che sono proiettori sono detti “stati puri”. In caso contrario si parla di “miscela”.

Infine, se l'evoluzione degli stati è governata dall'equazione di Schrödinger di hamiltoniano H

$$i \partial_t |v\rangle = H |v\rangle$$

allora l'evoluzione temporale di ρ obbedisce all'equazione

$$i \partial_t \rho = [H, \rho]$$

Si noti che questa equazione ha un segno opposto rispetto all'equazione per gli osservabili. Questo fatto non è strano; nel caso classico, l'equazione di Liouville (che è l'equazione per le distribuzioni di probabilità sugli stati) è formalmente l'equazione aggiunta dell'equazione del trasporto (che è l'equazione di evoluzione degli osservabili). Nel caso quantistico, l'analogo dell'equazione di Liouville è l'equazione per ρ , l'analogo dell'equazione del trasporto è l'equazione per gli osservabili.

Sia nel caso classico di una PDE, sia nel caso quantistico, con equazione aggiunta dell'equazione $\partial_t u = Au$ intendo quella che ha come operatore A^* . Per esercizio, mostrare che l'equazione per la densità deve essere l'aggiunta dell'equazione per gli osservabili (nel caso quantistico basta considerare la traccia come una sorta di prodotto scalare).

9 Tracce parziali

In un sistema quantistico a due componenti, gli stati vivono nel prodotto tensore degli spazi degli stati delle componenti. Consideriamo un sistema in $H_1 \otimes H_2$. Per gli stati di questo sistema si possono considerare osservabili relativi ai due sottosistemi: per esempio

$$A_1 \otimes \mathbf{I}_2$$

corrisponde a misurare A_1 sul sottosistema che vive in H_1 , ignorando le componenti in H_2 . Per sistemi classici, la descrizione di un sistema a due componenti si fa mediante una variabile aleatoria che accoppia i due sistemi, di densità congiunta $f(x_1, x_2, v_1, v_2)$. Descrivere il comportamento della sola prima componente corrisponde a considerare la 1-marginale di f :

$$f_1(x_1, v_1) = \int dx_2 dv_2 f(x_1, x_2, v_1, v_2)$$

e analogamente per la seconda componente.

L'analogo quantistico della "marginalizzazione" è la traccia parziale dell'operatore densità. La definizione formale è facile: sia ρ un operatore densità in $H_1 \otimes H_2$. Si chiama traccia parziale rispetto al sistema 2. l'operatore densità $\rho^{(1)}$ in H_1 che verifica l'identità

$$\text{Tr}(A\rho^{(1)}) = \text{Tr}(A \otimes \mathbf{I}_2 \rho)$$

per ogni osservabile A . Notando che B è un operatore semidefinito positivo se e solo se $\text{Tr}(BC) \geq 0$ per ogni operatore positivo C (si usi la base in autostati di A) non è difficile mostrare che $\rho^{(1)}$ è semidefinito positivo e inoltre che ha traccia 1, ed è il risultato di un'operazione che prende il nome di **traccia parziale**.

Vediamo come si fa concretamente questa operazione nel caso di due qubit. Sia ρ un operatore densità, e siano $\tilde{\rho}_{ij}$ con $i, j = 1, 2$ i 4 blocchi 2×2 in cui si può dividere. Calcolo

$$A \otimes \mathbf{I} \rho = \begin{pmatrix} a_{11} \mathbf{I} & a_{12} \mathbf{I} \\ a_{21} \mathbf{I} & a_{22} \mathbf{I} \end{pmatrix} \rho = \begin{pmatrix} a_{11}\tilde{\rho}_{11} + a_{12}\tilde{\rho}_{21} & a_{12}\tilde{\rho}_{12} + a_{12}\tilde{\rho}_{22} \\ a_{21}\tilde{\rho}_{11} + a_{22}\tilde{\rho}_{21} & a_{21}\tilde{\rho}_{12} + a_{22}\tilde{\rho}_{22} \end{pmatrix}$$

La sua traccia è, evidentemente

$$a_{11} \text{Tr} \tilde{\rho}_{11} + a_{12} \text{Tr} \tilde{\rho}_{21} + a_{21} \text{Tr} \tilde{\rho}_{12} + a_{22} \text{Tr} \tilde{\rho}_{22} = \text{Tr} \left(A \begin{pmatrix} \text{Tr} \tilde{\rho}_{11} & \text{Tr} \tilde{\rho}_{21} \\ \text{Tr} \tilde{\rho}_{12} & \text{Tr} \tilde{\rho}_{22} \end{pmatrix} \right)$$

Dunque

$$\rho^{(1)} = \begin{pmatrix} \text{Tr} \tilde{\rho}_{11} & \text{Tr} \tilde{\rho}_{21} \\ \text{Tr} \tilde{\rho}_{12} & \text{Tr} \tilde{\rho}_{22} \end{pmatrix}$$

Determino $\rho^{(2)}$

$$\mathbf{I} \otimes A \rho = \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & A \end{pmatrix} \rho = \begin{pmatrix} A\tilde{\rho}_{11} & A\tilde{\rho}_{12} \\ A\tilde{\rho}_{21} & A\tilde{\rho}_{22} \end{pmatrix}$$

La cui traccia è

$$\text{Tr}(A(\tilde{\rho}_{11} + \tilde{\rho}_{22}))$$

Pertanto

$$\rho^{(2)} = \tilde{\rho}_{11} + \tilde{\rho}_{22}.$$

È da notare che se nel caso classico siamo in presenza di due particelle distribuite in modo indipendente, la f è fattorizzata nel prodotto di f_1 e f_2 . Analogamente, nel caso quantistico, l'indipendenza tra i due sistemi si traduce nel fatto che ρ sarà il prodotto tensore delle sue tracce parziali. Però c'è un'importante differenza tra il caso classico e quello quantistico. Se nel caso classico consideriamo uno "stato puro", cioè una δ di Dirac in un punto (x_1, x_2, v_1, v_2) , le sue marginali sono ancora ovviamente δ , cioè "stati puri". Non è così nel caso quantistico. Per esempio, sia $\rho = |s\rangle\langle s|$ dove s è lo stato di singoletto in $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ dato da

$$|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|ud\rangle - |du\rangle)$$

ρ rappresenta uno stato puro. È facile osservare che in questo caso

$$\rho^{(1)} = \rho^{(2)} = \frac{1}{2} \mathbf{I}$$

da cui

$$\text{Tr}(A\rho^{(i)}) = \frac{1}{2}(\lambda_1 + \lambda_2)$$

cioè il valore atteso di A è la media degli autovalori. Questo vuol dire che i due autovalori di qualunque operatore autoaggiunto hanno probabilità uguale. In pratica $\rho^{(i)}$ è una miscela di massima incertezza su qualunque osservabile. Per esercizio, si calcolino le tracce parziali delle matrici densità (stati puri) $|t_i\rangle\langle t_i|$, per $i = 1, 2, 3$.

Si osservi che un operatore densità per un qubit ha necessariamente la forma

$$\frac{1}{2}(\mathbf{I} + r\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})$$

con r reale in $[0, 1]$ (lo si provi per esercizio), ed è un proiettore se e solo se $r = 1$ (e in tal caso è il proiettore su $|n\rangle$). Dunque i vettori $r\mathbf{n}$ con $r \in [0, 1]$ che descrivono la sfera tridimensionale di raggio 1, sono in biiezione con gli operatori densità per un qubit. In questo contesto la sfera prende il nome di sfera di Bloch: sul suo bordo ci sono gli stati puri, al suo interno ci sono gli stati miscela. Lo stato più miscelato è quello che si ha per $r = 0$, cioè $\rho = \mathbf{I}/2$. In tal caso, per qualunque A ,

$$\text{Tr}(A\rho) = \frac{1}{2}(\lambda_1 + \lambda_2)$$

dove λ_i sono i due autovalori di A . Il fatto che il valore atteso di A sia la media degli autovalori indica che una misura restituisce gli autovettori di A con uguale probabilità.