λυση ενός τέτοιου 2x2 πίνακα είναι πολύ χρήσιμοι οι πίνακες Pauli τους οποίους ορίζουμε αμέσως παρακάτω.

Οι πίνακες Pauli είναι τρεις και συμβολίζονται ως σ_i, όπου $i = 1, 2, 3$ (ή $i = x, y, z$). Οι πίνακες αυτοί είναι unitary και Ερμιτιανοί, και συνεπώς έχουν τις εξής ιδιότητες: $\sigma_i^+ = \sigma_i$ και $\sigma_i^+ = \sigma_i^{-1}$. Επιπλέον, οι πίνακες αυτοί έχουν μηδενικό ίχνος, δηλαδή $Tr(\sigma_i) = 0$, καθώς επίσης ισχύει ότι $\sigma_i^2 = \mathbb{1}$.

Μια επιπλέον ιδιότητα των πινάκων αυτών είναι ότι ικανοποιούν τη σχέση $Tr[\sigma_i \sigma_j] = 2\delta_{ij}$, ενώ ο μεταθέτης ($[A, B] \equiv AB - BA$) και ο αντιμεταθέτης ($\{A, B\} = AB + BA$) των πινάκων αυτών γράφονται $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i \sum_{k=1}^{3} \varepsilon_{ijk} \sigma_k$ και $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij} \mathbb{1}$, αντίστοιχα. Παραπάνω, χρησιμοποιήσαμε το σύμβολο Levi-Civita, το οποίο είναι ουσιαστικά ένας αντισυμμετρικός τανυστής για τον οποίο ισχύει

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} +1, & \text{αν } (i,j,k), (j,k,i), (k,i,j) \\ -1, & \text{αν } (k,j,i), (j,i,k), (i,k,j) \\ 0, & \text{αν } i=j \text{ ή } j=k \text{ ή } k=i \end{cases}$$

δηλαδή δίνει αποτέλεσμα +1 για άρτιο αριθμό μεταθέσεων των δεικτών του, −1 για περιττό αριθμό μεταθέσεων και 0 για την περίπτωση όπου κάποιος δείκτης επαναλαμβάνεται. Συνολικά λοιπόν για τους πίνακες Pauli έχουμε

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} \mathbb{1} + i \sum_{k=1}^{3} \varepsilon_{ijk} \sigma_k \qquad (281)$$

Οι παραπάνω ιδιότητες των πινάκων Pauli ισχύουν για οποιαδήποτε βάση κι αν επιλέξουμε για να τους εκφράσουμε. Σε αυτή λοιπόν τη γενική βάση, και εφόσον έχουμε τρεις πίνακες Pauli, μπορούμε να ορίσουμε το διάνυσμα Pauli $\vec{\sigma} = \sigma_x \hat{e}_x + \sigma_y \hat{e}_y + \sigma_z \hat{e}_z$, όπου $\hat{e}_x, \hat{e}_y, \hat{e}_z$ τα Καρτεσιανά διανύσματα βάσης του $\mathbb{R}^3$. Θυμίζοντας ότι το εξωτερικό γινόμενο δύο διανυσμάτων μπορεί να γραφεί με τη βοήθεια του συμβόλου Levi-Civita ως $\vec{a} \times \vec{b} = \sum_{i,j,k=1}^{3} \varepsilon_{ijk} a_i b_j \hat{e}_k$, τότε μπορούμε με τη βοήθεια του διανύσματος Pauli [δείτε και την εξ (281)]

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{a})(\vec{\sigma}\cdot\vec{b}) = (\vec{a}\cdot\vec{b})\mathbb{1} + i\vec{\sigma}(\vec{a}\times\vec{b}) \qquad (282)$$

Αν τώρα, αντί για τυχαία διανύσματα $\vec{a}$ και $\vec{b}$ είχαμε ένα μοναδιαίο διάνυσμα $\hat{e}$, τότε θα ήταν

$$(282) \Rightarrow (\vec{\sigma}\cdot\hat{e})(\vec{\sigma}\cdot\hat{e}) = \overbrace{(\hat{e}\cdot\hat{e})}^{1}\mathbb{1} + i\vec{\sigma}\overbrace{(\hat{e}\times\hat{e})}^{0} = \mathbb{1},$$

όπου $\hat{e}$ οποιοδήποτε μοναδιαίο διάνυσμα. Επομένως, με βάση τα παραπάνω, η ποσότητα $e^{i\theta\hat{e}\vec{\sigma}}$

μπορεί να γραφτεί

$$e^{i\theta(\hat{e}\cdot\vec{\sigma})} = \mathbb{1} + i\theta(\hat{e}\vec{\sigma}) - \frac{1}{2}\theta^2\underbrace{(\hat{e}\vec{\sigma})^2}_{=\mathbb{1}} - \frac{1}{3!}i\theta^3\underbrace{(\hat{e}\cdot\vec{\sigma})^3}_{=\hat{e}\vec{\sigma}} + \dots$$

$$= (\cos\theta)\,\mathbb{1} + i(\sin\theta)\,\hat{e}\cdot\vec{\sigma} \qquad (283)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε τις σειρές Taylor ημιτόνου, συνημιτόνου και εκθετικής συνάρτησης. Το διάνυσμα Pauli λοιπόν, μας βοηθάει να περιγράψουμε οποιαδήποτε στροφή πάνω σε μια μοναδιαία σφαίρα [δείτε και εξ. (3.26) στις σημειώσεις "Ειδικά θέματα κβαντομηχανικής"].

Αν τώρα χρησιμοποιήσουμε την ορθοκανονική βάση $B = \{|0\rangle, |1\rangle\}$ για να εκφράσουμε τους πίνακες Pauli, τότε θα έχουμε

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| \qquad (284a)$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = -i\left(|0\rangle\langle 1| - |1\rangle\langle 0|\right) \quad (284b)$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1| \quad (284c)$$

Στη συνέχεια, θα δούμε την εφαρμογή των πινάκων Pauli πάνω στα διανύσματα βάσης $|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ και $|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Ξεκινώντας από τον σ_x έχουμε ότι

$$\sigma_x |0\rangle = \left(|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|\right)|0\rangle = |1\rangle ,$$

$$\sigma_x |1\rangle = \left(|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|\right)|1\rangle = |0\rangle ,$$

δηλαδή ο πίνακας σ_x μας πηγαίνει από τη μία κατάσταση του qubit στην άλλη (bit flip). Όσο αναφορά τον σ_y είναι

$$\sigma_y |0\rangle = -i\left(|0\rangle\langle 1| - |1\rangle\langle 0|\right)|0\rangle = i|1\rangle$$

$$\sigma_y|1\rangle = -i(|0\rangle\langle 1| - |1\rangle\langle 0|)|1\rangle = -i|0\rangle ,$$

δηλαδή με τον σ_y έχουμε μετάβαση από τη μία κατάσταση στην άλλη, αλλά έχουμε επιπλέον και μία εισαγωγή φάσης $\pm i$. Τέλος, για τον σ_z έχουμε

$$\sigma_z|0\rangle = (|0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|)|0\rangle = |0\rangle ,$$

$$\sigma_z|1\rangle = (|0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|)|1\rangle = -|1\rangle ,$$

όπου βλέπουμε ότι ο τελεστής σ_z αφήνει ανεπηρέαστο το διάνυσμα $|0\rangle$ ενώ προσθέτει μία φάση -1 στο διάνυσμα $|1\rangle$ (ουσιαστικά τα διανύσματα $|0\rangle$ και $|1\rangle$ είναι ιδιοδιανύσματα του σ_z).

Παρατηρούμε λοιπόν ότι με τη χρήση των πινάκων Pauli μπορούμε να πραγματοποιούμε τους στοιχειώδεις μετασχηματισμούς (μετάβαση από τη μία κατάσταση στην άλλη και εισαγωγή φάσης) στις καταστάσεις ενός qubit. Στον κλάδο της Πληροφορικής στην κλασική φυσική, υπεύθυνες για τέτοιες στοιχειώδεις μετατροπές ενός bit (π.χ. $0 \rightarrow 1$) είναι οι λεγόμενες λογικές πύλες. Στον κλάδο της Κβαντικής Πληροφορίας τώρα, οι πίνακες Pauli μπορούν να αποτελέσουν τη βάση για τον ορισμό λεγόμενων κβαντικών πυλών, οι οποίες αποτελούν το κβαντικό ανάλογο των λογικών πυλών.

Στην Κβαντική Πληροφορία λοιπόν, όπως είδαμε η γνώση των πράξεων με πίνακες είναι αναγκαία. Μιας και για να εφαρμόσουμε ένα μετασχηματισμό, έναν πίνακα δηλαδή, σε μία τυχαία χρονική στιγμή στην κατάσταση ενός qubit, είναι πολύ βολικό να εκφράσουμε την κατάσταση του qubit με τη βοήθεια ενός πίνακα. Ο πίνακας αυτός ονομάζεται πίνακας πυκνότητας, συμβολίζεται με ρ και είναι ένας διαφορετικός τρόπος να εκφράσουμε την κατάσταση ενός qubit. Η μεθοδολογία του πίνακα πυκνότητας δεν εφαρμόζεται μόνο στα qubits, αλλά είναι μία γενική μεθοδολογία που μπορούμε να αναπτύξουμε για κάθε κβαντικό σύστημα και μπορεί να εφαρμοστεί σε κάθε κλάδο της Κβαντικής Φυσικής (ότι κάναμε στην Κβαντική Οπτική με τα πλάτη πιθανότητας, θα μπορούσαμε να το κάνουμε ισοδύναμα και με τον πίνακα πυκνότητας).

Έστω λοιπόν ότι έχουμε ένα κβαντικό σύστημα που περιγράφεται από την ορθοκανονική βάση στη $B = \{|1\rangle, |2\rangle, \ldots\}$. Η κατάσταση του συστήματος σε μία τυχαία χρονική στιγμή t μπορεί να γραφεί, όπως γνωρίζουμε,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t)\, |n\rangle \qquad (285)$$

Αν η $|\psi(t)\rangle$ είναι κανονικοποιημένη, τότε

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \sum_n \sum_m a_n(t)\, a_m^*(t) \langle m | n \rangle =$$

$$= \sum_n \sum_m a_n(t)\, a_m^*(t)\, \delta_{mn} =$$

$$= \sum_n |a_n(t)|^2 = 1 \qquad (286)$$

Τώρα, η μέση (αναμενόμενη) τιμή ενός τελεστή $\hat{Q}$ σε χρόνο t θα είναι

$$\langle \hat{Q}(t) \rangle = \langle \psi(t) | \hat{Q} | \psi(t) \rangle = \sum_n \sum_m a_m^*(t)\, a_n(t) \langle m | Q | n \rangle =$$

$$= \sum_n \sum_m a_m^*(t)\, a_n(t)\, Q_{mn} = \sum_{n,m} a_m^*(t)\, a_n(t)\, Q_{mn}$$

$$(287)$$

όπου $Q_{mn} = \langle m | \hat{Q} | n \rangle$.

Σύμφωνα με τα παραπάνω, ορίζουμε τον τελεστή

$$\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| \ , \qquad (288)$$

όπου ο τελεστής αυτός θα έχει στοιχεία μήτρας

$$\rho_{mn}(t) \equiv \langle m | \rho(t) | n \rangle = \langle m | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | n \rangle =$$

$$= \langle m | \left(\sum_p a_p(t) | p \rangle \right) \left(\sum_q a_q^*(t) \langle q | \right) | n \rangle =$$

$$= \sum_p a_p(t) \underbrace{\langle m | p \rangle}_{\delta_{mp}} \sum_q a_q^*(t) \underbrace{\langle q | n \rangle}_{\delta_{qn}} =$$

$$= a_m(t)\, a_n^*(t) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \rho_{mn}(t) = a_m(t)\, a_n^*(t) \qquad (289)$$

Ο τελεστής $\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ που ορίσαμε παραπάνω ονομάζεται πίνακας πυκνότητας (density matrix) ή τελεστής πυκνότητας (density operator).

Μπορούμε να ξαναγράψουμε τον πίνακα πυκνότητας ως

$$\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| = \sum_{n,m} a_n(t)\, a_m^*(t)\, |n\rangle\langle m| \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \rho(t) = \sum_{n,m} \rho_{nm}(t)\, |n\rangle\langle m| = \rho^+(t) \qquad (290)$$

Από την εξ. (286) τώρα, και σύμφωνα με τα παραπάνω, έχουμε ότι

$$\sum_n |a_n(t)|^2 = 1 \Rightarrow \sum_n \rho_{nn}(t) = 1 \Rightarrow Tr\,[\rho(t)] = 1 \qquad (291)$$

δηλαδή το ίχνος του πίνακα πυκνότητας θα ισούται πάντα με τη μονάδα. Αυτό είναι κάτι το οποίο θα επιτρέπει να αναμένουμε μιας και τα διαγώνια στοιχεία του πίνακα πυκνότητας αντιστοιχούν στις πιθανότητες των εκάστοτε καταστάσεων στις οποίες μπορεί να βρεθεί το σύστημά μας.

Προφανώς, το άθροισμα όλων των πιθανοτήτων θα ισούται με μονάδα. Επομένως, για τα διαγώνια στοιχεία μπορούμε να γράψουμε

$$\rho_{nn}(t) = a_n(t)\, a_n^*(t) = |a_n(t)|^2 \qquad (292)$$

όπου η ποσότητα $\rho_{nn}(t)$ ονομάζεται πληθυσμός της κατάστασης $|n\rangle$.

Όσο αναφορά τα μη-διαγώνια στοιχεία του πίνακα πυκνότητας, αυτά γράφονται

$$\rho_{mn}(t) = a_m(t)\, a_n^*(t) \qquad (293)$$

και περιγράφουν υπερθέσεις των κβαντικών καταστάσεων $|n\rangle$ και $|m\rangle$ λόγω της αλληλεπίδρασης του συστήματός μας με το περιβάλλον του. Για ένα απομονωμένο σύστημα τα μη-διαγώνια στοιχεία του πίνακα πυκνότητας θα είναι μηδενικά και έτσι ο πίνακας πυκνότητας θα είναι διαγωνοποιημένος, όπου το κάθε στοιχείο της διαγωνίου του θα μας δίνει τον πληθυσμό της εκάστοτε κατάστασης. Αν, όμως, το σύστημά μας αλληλεπιδρά με το περιβάλλον του (όπως π.χ. ένα qubit με ένα ηλεκτρικό πεδίο), τότε τα μη-διαγώνια στοιχεία του πίνακα πυκνότητας θα είναι μη-μηδενικά και θα περιέχουν πληροφορία σχετικά με την αλληλεπίδραση του συστήματός μας με το περιβάλλον του (στην περίπτωσή μας του qubit με το ηλεκτρικό πεδίο → θυμηθείτε επίσης ότι για την περίπτωση αυτή θεωρήσαμε $H_{int} = -\vec{p}_{12} \vec{E}$, δηλαδή η Χαμιλτονιανή αλληλ "επάγει" μια σύζευξη μεταξύ των καταστάσεων $|1\rangle$ και $|2\rangle$ και επομένως αυτή η αλληλ θα περιέχεται στα μη-διαγώνια στοιχεία $\rho_{12}(t)$ και $\rho_{21}(t)$). Για το λόγο αυτό λέμε ότι τα μη-διαγώνια στοιχεία συνδέονται με τις οπτικές ιδιότητες του συστήματος μας οι οποίες προφανώς προκύπτουν από την αλληλεπίδραση του συστήματός μας με Η/Μ ακτινοβολία.

Επιπλέον, όπως ίσως είναι προφανές από τα παραπάνω, τα διαγώνια και τα μη-διαγώνια στοιχεία του πίνακα πυκνότητας παίρνουν τιμές μεταξύ του 0 και του 1, δηλαδή $0 \leq \rho_{mn}(t) \leq 1 \quad \forall m,n$.

Επίσης, από την εξ. (293) προκύπτει για τα μη-διαγώνια στοιχεία ότι $\rho_{mn}(t) = \rho^*_{nm}(t)$.

Τώρα, θυμίζοντας ότι στην αναπαράσταση μητρών έχουμε

$$|\psi(t)\rangle \longrightarrow \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \end{pmatrix} \quad , \quad \langle\psi(t)| \longrightarrow \left(a_1^*(t) \;\; a_2^*(t) \;\; \ldots \right)$$

τότε ο πίνακας πυκνότητας γράφεται

$$\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| = \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \end{pmatrix} \left(a_1^*(t) \;\; a_2^*(t) \;\; \ldots \right) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \rho(t) = \begin{pmatrix} \overset{\rho_{11}(t)}{|a_1(t)|^2} & \overset{\rho_{12}(t)}{a_1(t)a_2^*(t)} & \ldots \\ \underset{\rho_{21}(t)}{a_2^*(t)a_1(t)} & \underset{\rho_{22}(t)}{|a_2(t)|^2} & \ldots \\ \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \qquad (294)$$

Για μια καθαρή κατάσταση, όπως η $|\psi(t)\rangle$ που έχουμε παραπάνω, ο πίνακας πυκνότητας έχει την επιπλέον ιδιότητα

$$\rho^2(t) = |\psi(t)\rangle\underbrace{\langle\psi(t)||\psi(t)\rangle}_{=1}\langle\psi(t)| = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| = \rho(t) \qquad (295)$$

Κλείνοντας, θα σημειώσουμε άλλες δύο παρατηρήσεις για τον πίνακα πυκνότητας. Αν $\hat{Q}$ ένας τελεστής, τότε η μέση τιμή του σε χρόνο t θα είναι [δείτε και την εξ. (287)]

$$\langle \hat{Q}(t) \rangle = \sum_{n,m} a_m^*(t)\, a_n(t)\, Q_{mn} = \sum_{n,m} \rho_{nm}(t)\, Q_{mn} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \langle \hat{Q}(t) \rangle = \sum_n [\rho(t)\, Q]_{nn} = \mathrm{Tr}[\rho(t)\, Q] \qquad (296)$$

δηλαδή για να βρούμε τη μέση τιμή του μεγέθους $\hat{Q}$ παίρνουμε το ίχνος του γινομένου του πίνακα πυκνότητας $\rho(t)$ με τον πίνακα Q.

Τέλος, για να βρούμε την εξίσωση χρονικής εξέλιξης για τον πίνακα πυκνότητας ξεκινάμε από τη χρονικά εξαρτημένη εξίσωση Schrödinger η οποία μας δίνει

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}(t)\,|\psi(t)\rangle \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t)\,|\psi(t)\rangle$$

και παίρνοντας το Ερμιτιανό συζυγές της παραπάνω εξίσωσης έχουμε (θυμίζουμε $(AB)^{+} = B^{+}A^{+}$)

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\langle\psi(t)| = \langle\psi(t)|\underbrace{\hat{H}^{+}(t)}_{=\hat{H}(t)} \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}\langle\psi(t)| = \frac{+i}{\hbar}\langle\psi(t)|\hat{H}(t)$$

Χρησιμοποιώντας τις παραπάνω εξισώσεις, παίρνουμε για τον πίνακα πυκνότητας ότι

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = \left(\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle\right)\langle\psi(t)| + |\psi(t)\rangle\left(\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi(t)|\right) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t)\underbrace{|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|}_{=\rho(t)} + \frac{i}{\hbar}\underbrace{|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|}_{=\rho(t)}\hat{H}(t) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}(t)\rho(t) - \rho(t)\hat{H}(t)\right] \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}(t), \rho(t)\right] \qquad (296)$$

Η παραπάνω εξίσωση είναι πολύ σημαντική μιας και μας δίνει τη χρονική εξέλιξη του πίνακα πυκνότητας. Ουσιαστικά, η εξ. (296) παίζει το ρόλο της εξίσωσης Schrödinger στην εικόνα Heisenberg.

Συνοψίζοντας λοιπόν για τον πίνακα πυκνότητας έχουμε τις εξής ιδιότητες: i) $\rho = \rho^{+}$, ii) $Tr[\rho] = 1$, iii) $\rho^2 = \rho$, και iv) $Tr[\rho^2] = 1$. Οι ιδιότητες αυτές ισχύουν για την περίπτωση όπου έχουμε μία καθαρή κατάσταση. (σημειώνουμε ότι για τις μεικτές καταστάσεις, οι οποίες είναι οι γενικότερες δυνατές στην Κβαντομηχανική, ισχύει ότι $\rho^2 \neq \rho$ και επομένως $Tr[\rho^2] \neq 1$, και πιο συγκεκριμένα $Tr[\rho^2] < 1$).

Αφού ορίσαμε τον πίνακα πυκνότητας, ας δούμε πώς μπορούμε να τον εκμεταλλευτούμε για να περιγράψουμε την κατάσταση ενός qubit.

Είδαμε παραπάνω ότι τα διαγώνια στοιχεία του πίνακα πυκνότητας σχετίζονται με τον πληθυσμό της εκάστοτε κατάστασης, ενώ τα μη-διαγώνια στοιχεία σχετίζονται με την αλ/ση του συστήματός μας με το περιβάλλον του. Επομένως, τα διαγώνια στοιχεία του πίνακα πυκνότητας θα είναι πάντοτε πραγματικά, ενώ τα μη-διαγώνια θα είναι εν γένει μιγαδικά. Έτσι λοιπόν, ο πίνακας πυκνότητας ενός qubit, ο οποίος είναι ένας 2 x 2 πίνακας μιας και το qubit έχει δύο πιθανές καταστάσεις, θα γράφεται στη γενική του μορφή ως

$$\rho = \begin{pmatrix} z & x-iy \\ x+iy & 1-z \end{pmatrix} \qquad (297)$$

όπου $x, y, z \in \mathbb{R}$. Μιας και η μόνη απαίτηση για τα διαγώνια στοιχεία είναι το άθροισμά τους να ισούται με τη μονάδα, τότε για λόγους συμμετρίας μπορούμε να αναδιατάξουμε την εξ. (297) και να γράψουμε ότι

$$\rho = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}+z & x-iy \\ x+iy & \frac{1}{2}-z \end{pmatrix} \qquad (298)$$

Στη συνέχεια, αναλύοντας την εξ. (298) παίρνουμε

$$\rho = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}+z & x-iy \\ x+iy & \frac{1}{2}-z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}+z & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}-z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & x-iy \\ x+iy & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\mathbb{1}} + z\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}}_{\sigma_z} + x\underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}_{\sigma_x} + y\underbrace{\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}}_{\sigma_y} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \rho = \frac{1}{2}\mathbb{1} + (x\sigma_x + y\sigma_y + z\sigma_z) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \rho = \frac{1}{2}\left(\mathbb{1} + \vec{r}\cdot\vec{\sigma}\right) \qquad (299)$$

όπου $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ το διάνυσμα Pauli καθώς και $\vec{r} = (x, y, z)$. Μιας και τα x, y, z είναι τυχαία βγάλαμε ως κοινό παράγοντα το 1/2 θεωρώντας ότι ο επιπλέον παράγοντας εμπεριέχεται στον ορισμό των x, y, z (το γιατί το κάναμε αυτό θα φανεί στη συνέχεια) Η εξ. (299) είναι ουσιαστικά ο γενικότερος τρόπος για να εκφράσουμε έναν πίνακα 2×2 ο οποίος είναι Ερμιτιανός $(\rho = \rho^{+})$ και έχει ίχνος μονάδα $(Tr[\rho] = 1)$. Τώρα, μιας και για το ίχνος ενός τελεστή $\hat{A}$ ισχύει η ιδιότητα $Tr[\hat{A}|\psi\rangle\langle\psi|] = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$, τότε έχουμε για το διάνυσμα $\vec{r}$ της εξ. (299) ότι

$$\vec{r} = \mathrm{Tr}[\rho\vec{\sigma}] \qquad (300)$$

Για την περίπτωση όπου έχουμε μία καθαρή κατάσταση, δηλαδή $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$, θα είναι $\vec{r} = \langle\psi|\vec{\sigma}|\psi\rangle$.
Επίσης, θυμίζουμε ότι ισχύει $\rho^2 = \rho$ και $\mathrm{Tr}[\rho^2] = \mathrm{Tr}[\rho]$. Εκμεταλλευόμενοι και τις ιδιότητες των πινάκων Pauli παίρνουμε

$$\mathrm{Tr}[\rho^2] = \frac{1}{4}\mathrm{Tr}[(\mathbb{1}+\vec{r}\cdot\vec{\sigma})^2] = \frac{1}{4}\mathrm{Tr}[\mathbb{1} + 2\vec{r}\cdot\vec{\sigma} + (\vec{r}\cdot\vec{\sigma})^2]$$

$$= \frac{1}{4}\Big(\underbrace{\mathrm{Tr}[\mathbb{1}]}_{2} + 2\,\mathrm{Tr}[\vec{r}\cdot\vec{\sigma}] + \mathrm{Tr}[(\vec{r}\cdot\vec{\sigma})^2]\Big) =$$

$$= \frac{1}{4}\Big(2 + \sum_{i=1}^{3}\mathrm{Tr}[r_i\sigma_i] + \mathrm{Tr}\Big[\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3} r_i r_j \sigma_i\sigma_j\Big]\Big) =$$

$$= \frac{1}{4}\Big(2 + \sum_{i=1}^{3} r_i\,\underbrace{\mathrm{Tr}[\sigma_i]}_{0} + \sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3} r_i r_j\,\underbrace{\mathrm{Tr}[\sigma_i\sigma_j]}_{2\delta_{ij}}\Big) =$$

$$= \frac{1}{4}(2 + 2|\vec{r}|^2) = \frac{1}{2}(1+|\vec{r}|^2)$$

Όμως, είδαμε ότι για μία καθαρή κατάσταση ισχύει ότι $Tr[\rho^2] = 1$ (για μεικτή $Tr[\rho^2] < 1$), και έτσι από την παραπάνω σχέση συμπεραίνουμε ότι $|\vec{r}|^2 = 1$. Επιπλέον, σημειώστε ότι από το γεγονός ότι $|\vec{r}|^2 = 1 \Rightarrow |\vec{r}| = 1$ και από την εξ. (300) έχουμε

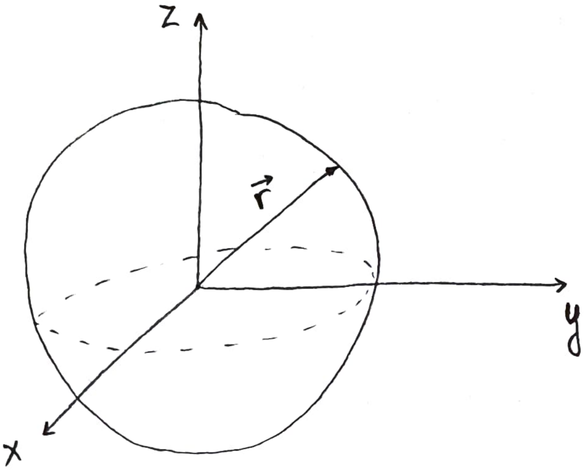
$$\vec{r} = Tr[\rho\vec{\sigma}] = \langle\psi|\vec{\sigma}|\psi\rangle \Rightarrow \vec{r}\cdot\vec{r} = 1 = \langle\psi|\vec{r}\cdot\vec{\sigma}|\psi\rangle \Rightarrow$$

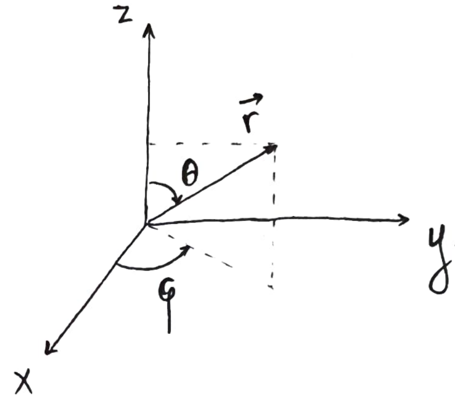
$$\Rightarrow \vec{r}\cdot\vec{\sigma}|\psi\rangle = |\psi\rangle \qquad (301)$$

Συνοψίζοντας τα παραπάνω αποτελέσματα βρίκαμε ότι αν $|\psi\rangle$ είναι ένα νορμαλισμένο διάνυσμα το οποίο περιγράφει την κατάσταση ενός qubit, τότε η αναμενόμενη τιμή του διανύσματος Pauli

$\langle \psi | \vec{\sigma} | \psi \rangle$ είναι απλά ένα διάνυσμα $\vec{r} \in \mathbb{R}$ με $|\vec{r}| = 1$. Επιπλέον, το $|\psi\rangle$ είναι ιδιοδιάνυσμα του τελεστή $\vec{r} \cdot \vec{\sigma}$ με ιδιοτιμή $+1$.

Από το γεγονός λοιπόν ότι (300) $\Rightarrow \vec{r} = Tr[\rho \vec{\sigma}] \Rightarrow$ $\Rightarrow \vec{r} = \langle \psi | \vec{\sigma} | \psi \rangle$, προκύπτει ότι για την εκάστοτε κατάσταση $|\psi\rangle$ ενός qubit μπορούμε να αντιστοιχίσουμε κάθε φορά ένα μοναδιαίο διάνυσμα $\vec{r}$. Με άλλα λόγια μπορούμε να απεικονίσουμε μία τυχαία κατάσταση $|\psi\rangle$ ενός qubit πάνω σε μία μοναδιαία σφαίρα, όπως φαίνεται παρακάτω. Η σφαίρα αυτή ονομάζεται σφαίρα Bloch και στην επιφάνειά της μπορούμε να απεικονίσουμε κάθε καθαρή κατάσταση ενός qubit. Στη σφαίρα Bloch, εκτός από





την κατάσταση ενός qubit, μπορούμε να δούμε με έναν παραστατικό τρόπο το πως αυτή η κατάσταση μεταβάλλεται δρώντας με ένα unitary τελεστή $\hat{U}$ πάνω στην αρχική κατάσταση, δηλαδή $|\varphi'\rangle = \hat{U}|\varphi\rangle$. Η νέα κατάσταση $|\varphi'\rangle$ θα παριστάνεται από ένα άλλο σημείο πάνω στη σφαίρα Bloch μιας και στην κατάσταση αυτή θα αντιστοιχεί ένα νέο μοναδιαίο διάνυσμα $\vec{r}' = \langle\varphi'|\vec{\sigma}|\varphi'\rangle$. Επομέ-