Stany czyste i stany mieszane

Wykład 23

Karol Kołodziej

Instytut Fizyki
Uniwersytet Śląski, Katowice
http://kk.us.edu.pl

Literatura: K. Zalewski, *Mały Wykład z Mechaniki Kwantowej*

W mechanice klasycznej czasem określa się stan cząstki dokładnie, np. podając jej pęd i położenie,

Stany czyste i stany mieszane

Literatura: K. Zalewski, *Mały Wykład z Mechaniki Kwantowej*
W mechanice klasycznej czasem określa się stan cząstki dokładnie, np. podając jej pęd i położenie, a czasem podaje się tylko rozkład prawdopodobieństwa dla pędów i położeń cząstki.

Literatura: K. Zalewski, *Mały Wykład z Mechaniki Kwantowej*
W mechanice klasycznej czasem określa się stan cząstki dokładnie, np. podając jej pęd i położenie, a czasem podaje się tylko rozkład prawdopodobieństwa dla pędów i położeń cząstki.
Na przykład w fizyce statystycznej, przy odpowiednich założeniach, dowodzi się, że gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki o pędzie $\vec{p}$ w punkcie $\vec{x}$ wyraża się przez rozkład Boltzmanna:

$$\rho\left(\vec{p},\vec{x}\right) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E(\vec{p},\vec{x})}{k_B T}},$$

gdzie

Stany czyste i stany mieszane

Literatura: K. Zalewski, *Mały Wykład z Mechaniki Kwantowej*

W mechanice klasycznej czasem określa się stan cząstki dokładnie, np. podając jej pęd i położenie, a czasem podaje się tylko rozkład prawdopodobieństwa dla pędów i położeń cząstki.

Na przykład w fizyce statystycznej, przy odpowiednich założeniach, dowodzi się, że gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki o pędzie $\vec{p}$ w punkcie $\vec{x}$ wyraża się przez rozkład Boltzmanna:

$$\rho\left(\vec{p}, \vec{x}\right) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E(\vec{p},\vec{x})}{k_B T}},$$

gdzie

$E\left(\vec{p}, \vec{x}\right)$ jest energią cząstki o pędzie $\vec{p}$ i położeniu $\vec{x}$,

Literatura: K. Zalewski, *Mały Wykład z Mechaniki Kwantowej*
W mechanice klasycznej czasem określa się stan cząstki dokładnie, np. podając jej pęd i położenie, a czasem podaje się tylko rozkład prawdopodobieństwa dla pędów i położeń cząstki.
Na przykład w fizyce statystycznej, przy odpowiednich założeniach, dowodzi się, że gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki o pędzie $\vec{p}$ w punkcie $\vec{x}$ wyraża się przez rozkład Boltzmanna:

$$\rho\left(\vec{p},\vec{x}\right) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E(\vec{p},\vec{x})}{k_B T}},$$

gdzie
$E\left(\vec{p},\vec{x}\right)$ jest energią cząstki o pędzie $\vec{p}$ i położeniu $\vec{x}$,
k_B jest stałą Boltzmana,

Literatura: K. Zalewski, *Mały Wykład z Mechaniki Kwantowej*

W mechanice klasycznej czasem określa się stan cząstki dokładnie, np. podając jej pęd i położenie, a czasem podaje się tylko rozkład prawdopodobieństwa dla pędów i położeń cząstki.

Na przykład w fizyce statystycznej, przy odpowiednich założeniach, dowodzi się, że gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki o pędzie $\vec{p}$ w punkcie $\vec{x}$ wyraża się przez rozkład Boltzmanna:

$$\rho\left(\vec{p},\vec{x}\right) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E(\vec{p},\vec{x})}{k_B T}},$$

gdzie

$E\left(\vec{p},\vec{x}\right)$ jest energią cząstki o pędzie $\vec{p}$ i położeniu $\vec{x}$,

k_B jest stałą Boltzmana,

T temperaturą w skali bezwzględnej,

Literatura: K. Zalewski, *Mały Wykład z Mechaniki Kwantowej*
W mechanice klasycznej czasem określa się stan cząstki dokładnie, np. podając jej pęd i położenie, a czasem podaje się tylko rozkład prawdopodobieństwa dla pędów i położeń cząstki.
Na przykład w fizyce statystycznej, przy odpowiednich założeniach, dowodzi się, że gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki o pędzie $\vec{p}$ w punkcie $\vec{x}$ wyraża się przez rozkład Boltzmanna:

$$\rho\left(\vec{p}, \vec{x}\right) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E(\vec{p}, \vec{x})}{k_B T}},$$

gdzie
$E\left(\vec{p}, \vec{x}\right)$ jest energią cząstki o pędzie $\vec{p}$ i położeniu $\vec{x}$,
k_B jest stałą Boltzmana,
T temperaturą w skali bezwzględnej,
a Z jest współczynnikiem normalizacyjnym.

Literatura: K. Zalewski, *Mały Wykład z Mechaniki Kwantowej*

W mechanice klasycznej czasem określa się stan cząstki dokładnie, np. podając jej pęd i położenie, a czasem podaje się tylko rozkład prawdopodobieństwa dla pędów i położeń cząstki.

Na przykład w fizyce statystycznej, przy odpowiednich założeniach, dowodzi się, że gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki o pędzie $\vec{p}$ w punkcie $\vec{x}$ wyraża się przez rozkład Boltzmanna:

$$\rho\left(\vec{p},\vec{x}\right)=\frac{1}{Z}e^{-\frac{E(\vec{p},\vec{x})}{k_B T}},$$

gdzie

$E\left(\vec{p},\vec{x}\right)$ jest energią cząstki o pędzie $\vec{p}$ i położeniu $\vec{x}$,

k_B jest stałą Boltzmana,

T temperaturą w skali bezwzględnej,

a Z jest współczynnikiem normalizacyjnym.

Stany czyste i stany mieszane

Podobne rozróżnienie istnieje również w mechanice kwantowej.
Stan opisany przez wektor stanu, czy funkcję falową, nazywa się stanem czystym.

Podobne rozróżnienie istnieje również w mechanice kwantowej. Stan opisany przez wektor stanu, czy funkcję falową, nazywa się stanem czystym.

W przestrzeni Hilberta wektorów stanu układu wybieramy ortonormalną bazę $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$, ...

Podobne rozróżnienie istnieje również w mechanice kwantowej.
Stan opisany przez wektor stanu, czy funkcję falową, nazywa się stanem czystym.
W przestrzeni Hilberta wektorów stanu układu wybieramy ortonormalną bazę $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$, ...
Gdybyśmy powiedzieli, że układ znajduje się w stanie

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i \, |\psi_i\rangle \,, \quad \text{albo w stanie} \quad |\psi_{10}\rangle \,,$$

to określilibyśmy stan czysty układu.

Stany czyste i stany mieszane

Podobne rozróżnienie istnieje również w mechanice kwantowej.
Stan opisany przez wektor stanu, czy funkcję falową, nazywa się stanem czystym.
W przestrzeni Hilberta wektorów stanu układu wybieramy ortonormalną bazę $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$, ...
Gdybyśmy powiedzieli, że układ znajduje się w stanie

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i \, |\psi_i\rangle \,, \quad \text{albo w stanie} \quad |\psi_{10}\rangle \,,$$

to określilibyśmy stan czysty układu.

Stany czyste i stany mieszane

Jeśli zamiast tego powiedzielibyśmy, że układ znajduje się

- z prawdopodobieństwem p_1 w stanie $|\psi_1\rangle$
- z prawdopodobieństwem p_2 w stanie $|\psi_2\rangle$
- itd.

i że pomiędzy tymi możliwościami nie ma interferencji, to określilibyśmy stan mieszany układu.

Stany czyste i stany mieszane

Jeśli zamiast tego powiedzielibyśmy, że układ znajduje się

- z prawdopodobieństwem p_1 w stanie $|\psi_1\rangle$
- z prawdopodobieństwem p_2 w stanie $|\psi_2\rangle$
- itd.

i że pomiędzy tymi możliwościami nie ma interferencji, to określilibyśmy stan mieszany układu.

Stan czysty $|\psi\rangle = c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle$ na ogół zmieni się jeśli zmienimy fazę wektora $|\psi_1\rangle$ lub $|\psi_2\rangle$.

Jeśli zamiast tego powiedzielibyśmy, że układ znajduje się

- z prawdopodobieństwem p_1 w stanie $|\psi_1\rangle$
- z prawdopodobieństwem p_2 w stanie $|\psi_2\rangle$
- itd.

i że pomiędzy tymi możliwościami nie ma interferencji, to określilibyśmy stan mieszany układu.
Stan czysty $|\psi\rangle = c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle$ na ogół zmieni się jeśli zmienimy fazę wektora $|\psi_1\rangle$ lub $|\psi_2\rangle$.

Rzeczywiście dokonując transformacji:

$$|\psi_1\rangle \;\; \longrightarrow \;\; e^{i\varphi_1}\,|\psi_1\rangle\,, \qquad |\psi_2\rangle \;\; \longrightarrow \;\; e^{i\varphi_2}\,|\psi_2\rangle$$

otrzymamy inny stan

$$|\psi'\rangle = c_1 e^{i\varphi_1}\,|\psi_1\rangle + c_2 e^{i\varphi_2}\,|\psi_2\rangle\,,$$

podczas, gdy stan mieszany, dla którego prawdopodobieństwa wybrania stanów $|\psi_1\rangle$ i $|\psi_2\rangle$ wynoszą odpowiednio $|c_1|^2$ i $|c_2|^2$, pozostanie niezmieniony przy takiej operacji.

Rzeczywiście dokonując transformacji:

$$|\psi_1\rangle \;\; \longrightarrow \;\; e^{i\varphi_1}\,|\psi_1\rangle\,, \qquad |\psi_2\rangle \;\; \longrightarrow \;\; e^{i\varphi_2}\,|\psi_2\rangle$$

otrzymamy inny stan

$$|\psi'\rangle = c_1 e^{i\varphi_1}\,|\psi_1\rangle + c_2 e^{i\varphi_2}\,|\psi_2\rangle\,,$$

podczas, gdy stan mieszany, dla którego prawdopodobieństwa wybrania stanów $|\psi_1\rangle$ i $|\psi_2\rangle$ wynoszą odpowiednio $|c_1|^2$ i $|c_2|^2$, pozostanie niezmieniony przy takiej operacji.

Stan mieszany można określić przez podanie operatora gęstości

$$\hat{\rho} = \sum_i |\psi_i\rangle \, p_i \, \langle\psi_i|$$

Zauważmy, że w ortonormalnej bazie $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$, ... prawdopodobieństwa p_i są wartościami własnymi operatora $\hat{\rho}$, a stany $|\psi_i\rangle$ jego odpowiednimi wektorami własnymi.

Stany czyste i stany mieszane

Stan mieszany można określić przez podanie operatora gęstości

$$\hat{\rho} = \sum_i |\psi_i\rangle \, p_i \, \langle\psi_i|$$

Zauważmy, że w ortonormalnej bazie $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$, ... prawdopodobieństwa p_i są wartościami własnymi operatora $\hat{\rho}$, a stany $|\psi_i\rangle$ jego odpowiednimi wektorami własnymi.
Rzeczywiście

$$\hat{\rho} \, |\psi_i\rangle = \sum_j |\psi_j\rangle \, p_j \, \langle\psi_j|\psi_i\rangle$$

Stany czyste i stany mieszane

Stan mieszany można określić przez podanie operatora gęstości

$$\hat{\rho} = \sum_i |\psi_i\rangle \, p_i \, \langle\psi_i|$$

Zauważmy, że w ortonormalnej bazie $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$, ... prawdopodobieństwa p_i są wartościami własnymi operatora $\hat{\rho}$, a stany $|\psi_i\rangle$ jego odpowiednimi wektorami własnymi. Rzeczywiście

$$\hat{\rho} \, |\psi_i\rangle = \sum_j |\psi_j\rangle \, p_j \, \langle\psi_j|\psi_i\rangle = \sum_j |\psi_j\rangle \, p_j \delta_{ji}$$

Stan mieszany można określić przez podanie operatora gęstości

$$\hat{\rho} = \sum_i |\psi_i\rangle\, p_i\, \langle\psi_i|$$

Zauważmy, że w ortonormalnej bazie $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$, ... prawdopodobieństwa p_i są wartościami własnymi operatora $\hat{\rho}$, a stany $|\psi_i\rangle$ jego odpowiednimi wektorami własnymi. Rzeczywiście

$$\hat{\rho}\, |\psi_i\rangle = \sum_j |\psi_j\rangle\, p_j\, \langle\psi_j|\psi_i\rangle = \sum_j |\psi_j\rangle\, p_j \delta_{ji} = p_i\, |\psi_i\rangle\, .$$

Stan mieszany można określić przez podanie operatora gęstości

$$\hat{\rho} = \sum_i |\psi_i\rangle\, p_i\, \langle\psi_i|$$

Zauważmy, że w ortonormalnej bazie $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$, ... prawdopodobieństwa p_i są wartościami własnymi operatora $\hat{\rho}$, a stany $|\psi_i\rangle$ jego odpowiednimi wektorami własnymi. Rzeczywiście

$$\hat{\rho}\, |\psi_i\rangle = \sum_j |\psi_j\rangle\, p_j\, \langle\psi_j|\psi_i\rangle = \sum_j |\psi_j\rangle\, p_j \delta_{ji} = p_i\, |\psi_i\rangle\, .$$

Operator gęstości zawiera więc pełną informację o stanie mieszanym.

Stan mieszany można określić przez podanie operatora gęstości

$$\hat{\rho} = \sum_i |\psi_i\rangle\, p_i\, \langle\psi_i|$$

Zauważmy, że w ortonormalnej bazie $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$, ... prawdopodobieństwa p_i są wartościami własnymi operatora $\hat{\rho}$, a stany $|\psi_i\rangle$ jego odpowiednimi wektorami własnymi. Rzeczywiście

$$\hat{\rho}\, |\psi_i\rangle = \sum_j |\psi_j\rangle\, p_j\, \langle\psi_j|\psi_i\rangle = \sum_j |\psi_j\rangle\, p_j \delta_{ji} = p_i\, |\psi_i\rangle\, .$$

Operator gęstości zawiera więc pełną informację o stanie mieszanym.

Zamiast operatora gęstości można też używać jego macierzowych reprezentacji.

W dowolnej bazie $|\alpha_1\rangle$, $|\alpha_2\rangle$, ... elementy macierzy gęstości zdefiniowane są wzorem

$$\rho_{ij}^{(\alpha)} = \langle \alpha_i | \hat{\rho} | \alpha_j \rangle \, .$$

Stany czyste i stany mieszane

Zamiast operatora gęstości można też używać jego macierzowych reprezentacji.
W dowolnej bazie $|\alpha_1\rangle$, $|\alpha_2\rangle$, ... elementy macierzy gęstości zdefiniowane są wzorem

$$\rho_{ij}^{(\alpha)} = \langle\alpha_i|\hat{\rho}|\alpha_j\rangle \,.$$

W stanie mieszanym wartości średnie operatorów odpowiadających wielkościom mierzalnym dane są wzorem:

$$\langle A\rangle = Tr\left(\hat{\rho}\hat{A}\right) .$$

Stany czyste i stany mieszane

Zamiast operatora gęstości można też używać jego macierzowych reprezentacji.
W dowolnej bazie $|\alpha_1\rangle$, $|\alpha_2\rangle$, ... elementy macierzy gęstości zdefiniowane są wzorem

$$\rho_{ij}^{(\alpha)} = \langle\alpha_i|\hat{\rho}|\alpha_j\rangle \, .$$

W stanie mieszanym wartości średnie operatorów odpowiadających wielkościom mierzalnym dane są wzorem:

$$\langle A\rangle = Tr\left(\hat{\rho}\hat{A}\right) .$$

Twierdzenie to wystarczy udowodnić w jednej wybranej reprezentacji, gdyż ślad nie zależy od wyboru reprezentacji. Rzeczywiście, niech $|\alpha_1\rangle$, $|\alpha_2\rangle$, ... i $|\beta_1\rangle$, $|\beta_2\rangle$, ... będą dwoma różnymi bazami ortonormalnymi w przestrzeni Hilberta $\mathcal{H}$,

Twierdzenie to wystarczy udowodnić w jednej wybranej reprezentacji, gdyż ślad nie zależy od wyboru reprezentacji. Rzeczywiście, niech $|\alpha_1\rangle$, $|\alpha_2\rangle$, ... i $|\beta_1\rangle$, $|\beta_2\rangle$, ... będą dwoma różnymi bazami ortonormalnymi w przestrzeni Hilberta $\mathcal{H}$, wtedy

$$Tr\left(\hat{A}\right) =$$

Twierdzenie to wystarczy udowodnić w jednej wybranej reprezentacji, gdyż ślad nie zależy od wyboru reprezentacji. Rzeczywiście, niech $|\alpha_1\rangle$, $|\alpha_2\rangle$, ... i $|\beta_1\rangle$, $|\beta_2\rangle$, ... będą dwoma różnymi bazami ortonormalnymi w przestrzeni Hilberta $\mathcal{H}$, wtedy

$$Tr\left(\hat{A}\right) = \sum_i \left\langle \alpha_i|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle =$$

Twierdzenie to wystarczy udowodnić w jednej wybranej reprezentacji, gdyż ślad nie zależy od wyboru reprezentacji. Rzeczywiście, niech $|\alpha_1\rangle$, $|\alpha_2\rangle$, ... i $|\beta_1\rangle$, $|\beta_2\rangle$, ... będą dwoma różnymi bazami ortonormalnymi w przestrzeni Hilberta $\mathcal{H}$, wtedy

$$Tr\left(\hat{A}\right) = \sum_i \left\langle \alpha_i|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle = \sum_i \langle \alpha_i | \sum_j |\beta_j\rangle \langle \beta_j | \hat{A} \sum_k |\beta_k\rangle \langle \beta_k | \alpha_i\rangle$$

Twierdzenie to wystarczy udowodnić w jednej wybranej reprezentacji, gdyż ślad nie zależy od wyboru reprezentacji. Rzeczywiście, niech $|\alpha_1\rangle$, $|\alpha_2\rangle$, ... i $|\beta_1\rangle$, $|\beta_2\rangle$, ... będą dwoma różnymi bazami ortonormalnymi w przestrzeni Hilberta $\mathcal{H}$, wtedy

$$Tr\left(\hat{A}\right) = \sum_i \left\langle \alpha_i | \hat{A} | \alpha_i \right\rangle = \sum_i \langle \alpha_i | \sum_j |\beta_j\rangle \langle \beta_j | \hat{A} \sum_k |\beta_k\rangle \langle \beta_k | \alpha_i \rangle$$

$$=$$

Twierdzenie to wystarczy udowodnić w jednej wybranej reprezentacji, gdyż ślad nie zależy od wyboru reprezentacji. Rzeczywiście, niech $|\alpha_1\rangle$, $|\alpha_2\rangle$, ... i $|\beta_1\rangle$, $|\beta_2\rangle$, ... będą dwoma różnymi bazami ortonormalnymi w przestrzeni Hilberta $\mathcal{H}$, wtedy

$$Tr\left(\hat{A}\right) = \sum_i \left\langle \alpha_i|\hat{A}|\alpha_i\right\rangle = \sum_i \langle\alpha_i \,|\sum_j |\beta_j\rangle\langle\beta_j\,|\hat{A}\sum_k |\beta_k\rangle\langle\beta_k\,|\alpha_i\rangle$$

$$= \sum_{j,k} \langle\beta_k\,|\underbrace{\sum_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i\,|}_{I}\,\beta_j\rangle \left\langle\beta_j|\hat{A}|\beta_k\right\rangle$$

Twierdzenie to wystarczy udowodnić w jednej wybranej reprezentacji, gdyż ślad nie zależy od wyboru reprezentacji. Rzeczywiście, niech $|\alpha_1\rangle$, $|\alpha_2\rangle$, ... i $|\beta_1\rangle$, $|\beta_2\rangle$, ... będą dwoma różnymi bazami ortonormalnymi w przestrzeni Hilberta $\mathcal{H}$, wtedy

$$Tr\left(\hat{A}\right) = \sum_i \left\langle \alpha_i|\hat{A}|\alpha_i\right\rangle = \sum_i \langle\alpha_i \,|\sum_j |\beta_j\rangle\langle\beta_j\,|\hat{A}\sum_k |\beta_k\rangle\langle\beta_k\,|\alpha_i\rangle$$

$$= \sum_{j,k} \langle\beta_k\,|\underbrace{\sum_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i\,|}_{I}\,\beta_j\rangle\left\langle\beta_j|\hat{A}|\beta_k\right\rangle$$

$$=$$

Twierdzenie to wystarczy udowodnić w jednej wybranej reprezentacji, gdyż ślad nie zależy od wyboru reprezentacji. Rzeczywiście, niech $|\alpha_1\rangle$, $|\alpha_2\rangle$, ... i $|\beta_1\rangle$, $|\beta_2\rangle$, ... będą dwoma różnymi bazami ortonormalnymi w przestrzeni Hilberta $\mathcal{H}$, wtedy

$$
\begin{aligned}
Tr\left(\hat{A}\right) &= \sum_i \left\langle \alpha_i|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle = \sum_i \langle \alpha_i \,|\sum_j |\beta_j\rangle \langle \beta_j \,|\hat{A} \sum_k |\beta_k\rangle \langle \beta_k \,|\alpha_i\rangle \\
&= \sum_{j,k} \langle \beta_k \,|\underbrace{\sum_i |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i \,|}_{I} \beta_j\rangle \left\langle \beta_j|\hat{A}|\beta_k \right\rangle \\
&= \sum_{j,k} \langle \beta_k|\beta_j\rangle \left\langle \beta_j|\hat{A}|\beta_k \right\rangle
\end{aligned}
$$

Twierdzenie to wystarczy udowodnić w jednej wybranej reprezentacji, gdyż ślad nie zależy od wyboru reprezentacji. Rzeczywiście, niech $|\alpha_1\rangle$, $|\alpha_2\rangle$, ... i $|\beta_1\rangle$, $|\beta_2\rangle$, ... będą dwoma różnymi bazami ortonormalnymi w przestrzeni Hilberta $\mathcal{H}$, wtedy

$$
\begin{aligned}
Tr\left(\hat{A}\right) &= \sum_i \left\langle \alpha_i | \hat{A} | \alpha_i \right\rangle = \sum_i \langle \alpha_i | \sum_j |\beta_j\rangle \langle \beta_j | \hat{A} \sum_k |\beta_k\rangle \langle \beta_k | \alpha_i\rangle \\
&= \sum_{j,k} \langle \beta_k | \underbrace{\sum_i |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i |}_{I} \beta_j\rangle \left\langle \beta_j | \hat{A} | \beta_k \right\rangle \\
&= \sum_{j,k} \langle \beta_k | \beta_j\rangle \left\langle \beta_j | \hat{A} | \beta_k \right\rangle = \sum_{j,k} \delta_{kj} \left\langle \beta_j | \hat{A} | \beta_k \right\rangle
\end{aligned}
$$

Twierdzenie to wystarczy udowodnić w jednej wybranej reprezentacji, gdyż ślad nie zależy od wyboru reprezentacji. Rzeczywiście, niech $|\alpha_1\rangle$, $|\alpha_2\rangle$, ... i $|\beta_1\rangle$, $|\beta_2\rangle$, ... będą dwoma różnymi bazami ortonormalnymi w przestrzeni Hilberta $\mathcal{H}$, wtedy

$$
\begin{aligned}
Tr\left(\hat{A}\right) &= \sum_i \left\langle \alpha_i|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle = \sum_i \langle \alpha_i \,| \sum_j |\beta_j\rangle \langle \beta_j \,| \hat{A} \sum_k |\beta_k\rangle \langle \beta_k \,|\alpha_i\rangle \\
&= \sum_{j,k} \langle \beta_k \,| \underbrace{\sum_i |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i \,|}_{I} \beta_j\rangle \left\langle \beta_j|\hat{A}|\beta_k \right\rangle \\
&= \sum_{j,k} \langle \beta_k|\beta_j\rangle \left\langle \beta_j|\hat{A}|\beta_k \right\rangle = \sum_{j,k} \delta_{kj} \left\langle \beta_j|\hat{A}|\beta_k \right\rangle = \sum_j \left\langle \beta_j|\hat{A}|\beta_j \right\rangle .
\end{aligned}
$$

Twierdzenie to wystarczy udowodnić w jednej wybranej reprezentacji, gdyż ślad nie zależy od wyboru reprezentacji. Rzeczywiście, niech $|\alpha_1\rangle$, $|\alpha_2\rangle$, ... i $|\beta_1\rangle$, $|\beta_2\rangle$, ... będą dwoma różnymi bazami ortonormalnymi w przestrzeni Hilberta $\mathcal{H}$, wtedy

$$
\begin{aligned}
Tr\left(\hat{A}\right) &= \sum_i \left\langle \alpha_i|\hat{A}|\alpha_i\right\rangle = \sum_i \langle \alpha_i \,|\sum_j |\beta_j\rangle \langle \beta_j \,|\hat{A}\sum_k |\beta_k\rangle \langle \beta_k \,|\alpha_i\rangle \\
&= \sum_{j,k} \langle \beta_k \,|\underbrace{\sum_i |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i \,|}_{I} \beta_j\rangle \left\langle \beta_j|\hat{A}|\beta_k\right\rangle \\
&= \sum_{j,k} \langle \beta_k|\beta_j\rangle \left\langle \beta_j|\hat{A}|\beta_k\right\rangle = \sum_{j,k} \delta_{kj} \left\langle \beta_j|\hat{A}|\beta_k\right\rangle = \sum_j \left\langle \beta_j|\hat{A}|\beta_j\right\rangle .
\end{aligned}
$$

Wybierzmy jako bazę $|\alpha_1\rangle$, $|\alpha_2\rangle$, ..., bazę wektorów własnych operatora gęstości, w której

$$\hat{\rho} = \sum_i |\alpha_i\rangle\, p_i\, \langle\alpha_i| \ .$$

Stany czyste i stany mieszane

Wybierzmy jako bazę $|\alpha_1\rangle$, $|\alpha_2\rangle$, ..., bazę wektorów własnych operatora gęstości, w której

$$\hat{\rho} = \sum_i |\alpha_i\rangle \, p_i \, \langle\alpha_i| \; .$$

Z definicji wartości średniej mamy

$$\langle A\rangle = \sum_i p_i \left\langle \alpha_i|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle .$$

Wybierzmy jako bazę $|\alpha_1\rangle$, $|\alpha_2\rangle$, ..., bazę wektorów własnych operatora gęstości, w której

$$\hat{\rho} = \sum_i |\alpha_i\rangle\, p_i\, \langle\alpha_i| \ .$$

Z definicji wartości średniej mamy

$$\langle A \rangle = \sum_i p_i \left\langle \alpha_i | \hat{A} | \alpha_i \right\rangle .$$

Z drugiej strony

$$Tr\left(\hat{\rho}\hat{A}\right) = \sum_i \left\langle \alpha_i|\hat{\rho}\hat{A}|\alpha_i \right\rangle = \sum_i \sum_j \langle \alpha_i|\hat{\rho}|\alpha_j\rangle \left\langle \alpha_j|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle$$

Z drugiej strony

$$
\begin{aligned}
Tr\left(\hat{\rho}\hat{A}\right) &= \sum_i \left\langle \alpha_i | \hat{\rho}\hat{A} | \alpha_i \right\rangle = \sum_i \sum_j \langle \alpha_i | \hat{\rho} | \alpha_j \rangle \left\langle \alpha_j | \hat{A} | \alpha_i \right\rangle \\
&= \sum_i \sum_j \langle \alpha_i | p_j | \alpha_j \rangle \left\langle \alpha_j | \hat{A} | \alpha_i \right\rangle =
\end{aligned}
$$

Z drugiej strony

$$\begin{aligned} Tr\left(\hat{\rho}\hat{A}\right) &= \sum_i \left\langle \alpha_i|\hat{\rho}\hat{A}|\alpha_i\right\rangle = \sum_i \sum_j \langle \alpha_i|\hat{\rho}|\alpha_j\rangle \left\langle \alpha_j|\hat{A}|\alpha_i\right\rangle \\ &= \sum_i \sum_j \langle \alpha_i|p_j|\alpha_j\rangle \left\langle \alpha_j|\hat{A}|\alpha_i\right\rangle = \sum_i \sum_j p_j \underbrace{\langle \alpha_i|\alpha_j\rangle}_{\delta_{ij}} \left\langle \alpha_j|\hat{A}|\alpha_i\right\rangle \end{aligned}$$

Z drugiej strony

$$
\begin{aligned}
Tr\left(\hat{\rho}\hat{A}\right) &= \sum_i \left\langle \alpha_i|\hat{\rho}\hat{A}|\alpha_i \right\rangle = \sum_i \sum_j \langle \alpha_i|\hat{\rho}|\alpha_j\rangle \left\langle \alpha_j|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle \\
&= \sum_i \sum_j \langle \alpha_i|p_j|\alpha_j\rangle \left\langle \alpha_j|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle = \sum_i \sum_j p_j \underbrace{\langle \alpha_i|\alpha_j\rangle}_{\delta_{ij}} \left\langle \alpha_j|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle \\
&= \sum_i \sum_j p_j \delta_{ij} \left\langle \alpha_j|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle =
\end{aligned}
$$

Z drugiej strony

$$\begin{aligned}
Tr\left(\hat{\rho}\hat{A}\right) &= \sum_i \left\langle \alpha_i|\hat{\rho}\hat{A}|\alpha_i\right\rangle = \sum_i\sum_j \langle \alpha_i|\hat{\rho}|\alpha_j\rangle \left\langle \alpha_j|\hat{A}|\alpha_i\right\rangle \\
&= \sum_i\sum_j \langle \alpha_i|p_j|\alpha_j\rangle \left\langle \alpha_j|\hat{A}|\alpha_i\right\rangle = \sum_i\sum_j p_j \underbrace{\langle \alpha_i|\alpha_j\rangle}_{\delta_{ij}} \left\langle \alpha_j|\hat{A}|\alpha_i\right\rangle \\
&= \sum_i\sum_j p_j\delta_{ij} \left\langle \alpha_j|\hat{A}|\alpha_i\right\rangle = \sum_i p_i \left\langle \alpha_i|\hat{A}|\alpha_i\right\rangle.
\end{aligned}$$

Z drugiej strony

$$\begin{aligned}
Tr\left(\hat{\rho}\hat{A}\right) &= \sum_i \left\langle \alpha_i|\hat{\rho}\hat{A}|\alpha_i \right\rangle = \sum_i \sum_j \langle \alpha_i|\hat{\rho}|\alpha_j\rangle \left\langle \alpha_j|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle \\
&= \sum_i \sum_j \langle \alpha_i|p_j|\alpha_j\rangle \left\langle \alpha_j|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle = \sum_i \sum_j p_j \underbrace{\langle \alpha_i|\alpha_j\rangle}_{\delta_{ij}} \left\langle \alpha_j|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle \\
&= \sum_i \sum_j p_j \delta_{ij} \left\langle \alpha_j|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle = \sum_i p_i \left\langle \alpha_i|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle .
\end{aligned}$$

a zatem

$$Tr\left(\hat{\rho}\hat{A}\right) = \sum_i p_i \left\langle \alpha_i|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle$$

Z drugiej strony

$$
\begin{aligned}
Tr\left(\hat{\rho}\hat{A}\right) &= \sum_i \left\langle \alpha_i|\hat{\rho}\hat{A}|\alpha_i \right\rangle = \sum_i \sum_j \langle \alpha_i|\hat{\rho}|\alpha_j\rangle \left\langle \alpha_j|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle \\
&= \sum_i \sum_j \langle \alpha_i|p_j|\alpha_j\rangle \left\langle \alpha_j|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle = \sum_i \sum_j p_j \underbrace{\langle \alpha_i|\alpha_j\rangle}_{\delta_{ij}} \left\langle \alpha_j|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle \\
&= \sum_i \sum_j p_j \delta_{ij} \left\langle \alpha_j|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle = \sum_i p_i \left\langle \alpha_i|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle .
\end{aligned}
$$

a zatem

$$
Tr\left(\hat{\rho}\hat{A}\right) = \sum_i p_i \left\langle \alpha_i|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle = \langle A \rangle .
$$

Z drugiej strony

$$
\begin{aligned}
Tr\left(\hat{\rho}\hat{A}\right) &= \sum_i \left\langle \alpha_i|\hat{\rho}\hat{A}|\alpha_i \right\rangle = \sum_i \sum_j \langle \alpha_i|\hat{\rho}|\alpha_j\rangle \left\langle \alpha_j|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle \\
&= \sum_i \sum_j \langle \alpha_i|p_j|\alpha_j\rangle \left\langle \alpha_j|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle = \sum_i \sum_j p_j \underbrace{\langle \alpha_i|\alpha_j\rangle}_{\delta_{ij}} \left\langle \alpha_j|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle \\
&= \sum_i \sum_j p_j \delta_{ij} \left\langle \alpha_j|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle = \sum_i p_i \left\langle \alpha_i|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle .
\end{aligned}
$$

a zatem

$$
Tr\left(\hat{\rho}\hat{A}\right) = \sum_i p_i \left\langle \alpha_i|\hat{A}|\alpha_i \right\rangle = \langle A \rangle .
$$