

## 第五章 两体量子系统 I

两体量子系统是一个复合系统, 由子系统 A 和另一个子系统 B 构成. 可以把两个子系统形象地想象为两个微观粒子, 也可以把它们视作同一个粒子的两个不同性质的自由度 (freedom). 这里说的自由度并不是理论力学中说的广义坐标的个数, 而是不能在同一个 Hilbert 空间中描述的状态. 例如, 在 SG 实验中, 需要考虑银原子的磁矩和空间位置, 前者和粒子的自旋角动量有关, 需要在有限维的  $\mathbb{C}^2$  空间中描述, 后者需要在无穷维的 Hilbert 空间中描述. 于是在分析该实验的时候, 可以说我们面对的是一个两体量子系统.

### 直积空间中的向量

设  $\mathcal{H}^A$  和  $\mathcal{H}^B$  分别是描述子系统 A 和子系统 B 的 Hilbert 空间. 这里仍然考虑有限维的情形. 设其维数分别是  $\dim(\mathcal{H}^A) = d^A$  和  $\dim(\mathcal{H}^B) = d^B$ , 并且分别为它们赋予自然基向量组  $\{|i\rangle\}$  和  $\{|\mu\rangle\}$ , 其中  $i = 0, 1, \dots, d^A - 1$ ,  $\mu = 0, 1, \dots, d^B - 1$ , 这里我们分别用拉丁字母和希腊字母表示  $\mathcal{H}^A$  和  $\mathcal{H}^B$  的基向量. 所谓自然基向量  $|i\rangle$  是这样的: 在它的列向量表示形式中, 第  $i + 1$  行的分量是 1, 其余各行均为 0, 即

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \dots, \quad |d^A - 1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}.$$

$\mathcal{H}^B$  的基向量组  $\{|\mu\rangle\}$  与此类似.

描述两体量子系统 AB 的量子态的 Hilbert 空间  $\mathcal{H}$  是  $\mathcal{H}^A$  和  $\mathcal{H}^B$  的直积, 即  $\mathcal{H} = \mathcal{H}^A \otimes \mathcal{H}^B$ , 它是一个  $d^A \times d^B$  维的复空间, 自然基向量组记作  $\{|i\rangle \otimes |\mu\rangle\}$ , 简写为  $\{|i\rangle |\mu\rangle\}$ , 或者  $\{|i\mu\rangle\}$ . 这里, 符号  $\otimes$  表示直积 (direct product), 它的运算规则是这样的. 设  $X$  是一个  $m \times n$  的矩阵,  $Y$  是另一个矩阵.  $X$  的第  $i$  行第  $j$  列的矩阵元记作  $x_{ij}$ .  $X$  和  $Y$  的直积就是

$$X \otimes Y = \begin{pmatrix} x_{11}Y & x_{12}Y & \cdots & x_{1n}Y \\ x_{21}Y & x_{22}Y & \cdots & x_{2n}Y \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{m1}Y & x_{m2}Y & \cdots & x_{mn}Y \end{pmatrix}.$$

简单地说, 把  $X \otimes Y$  看成是一个由  $mn$  个小矩阵拼成的大矩阵, 每一个小矩阵是  $x_{ij}Y$ . 于是,  $\mathcal{H}$  的某个基向量, 比

如  $|0\rangle|1\rangle$ , 它的列向量形式可以表示为

$$|0\rangle|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Hilbert 空间  $\mathcal{H}$  中任意一个态矢量  $|\Psi\rangle$  可以在  $\{|i\mu\rangle\}$  上展开,

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=0}^{d^A-1} \sum_{\mu=0}^{d^B-1} c_{i\mu} |i\rangle |\mu\rangle \quad (1)$$

其中系数  $c_{i\mu} = \langle i\mu|\Psi\rangle$ , 并且满足  $\sum_{i,\mu} |c_{i\mu}|^2 = 1$ . 以后, 在不会引起歧义的情况下, 我们将略去求和的上下限. 另外, 我们把这样的两体系统简称为  $d^A \otimes d^B$  系统.

例如,  $2 \otimes 2$  量子系统的纯态可以表示为  $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$  中的归一化的向量,

$$|\Psi\rangle = c_{00} |00\rangle + c_{01} |01\rangle + c_{10} |10\rangle + c_{11} |11\rangle$$

其中  $|c_{00}|^2 + |c_{01}|^2 + |c_{10}|^2 + |c_{11}|^2 = 1$ .

虽然 Hilbert 空间  $\mathcal{H}$  是  $\mathcal{H}^A$  和  $\mathcal{H}^B$  的直积, 但是  $\mathcal{H}$  中的量子态却并不是总能表示为  $\mathcal{H}^A$  中的量子态和  $\mathcal{H}^B$  中的量子态的直积. 如果  $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$  可以表示为  $|\psi^A\rangle \otimes |\psi^B\rangle$ , 其中  $|\psi^A\rangle \in \mathcal{H}^A$ ,  $|\psi^B\rangle \in \mathcal{H}^B$ , 那么  $|\Psi\rangle$  被称为直积态 (product state).

可以选择  $\mathcal{H}^A$  或  $\mathcal{H}^B$  的其它形式的基向量, 将  $|\Psi\rangle$  表示成其它形式. 下面的定理给出了最简单的表示形式.

**定理 (施密特 (Schmidt) 分解)** 对于给定的某个量子态  $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ , 总能找到  $\mathcal{H}^A$  和  $\mathcal{H}^B$  的特定的基向量, 记作  $\{|e_i\rangle\}$  和  $\{|f_\mu\rangle\}$ , 使得  $|\Psi\rangle$  在  $\{|e_i\rangle|f_\mu\rangle\}$  上的展开形式为

$$|\Psi\rangle = \sum_{j=0}^d c_j |e_j\rangle |f_j\rangle, \quad (2)$$

其中  $d = \min\{d^A, d^B\} - 1$ , 并且每一个  $c_j$  都是正的.

稍后证明这个结论.

## 直积空间上的矩阵

考虑  $d^A d^B$  维的空间  $\mathcal{H}$  上的算符  $X$ , 它可以表示为矩阵形式<sup>1</sup>, 在自然基向量  $|i\rangle|\mu\rangle$  上

$$X = \sum_{ij\mu\nu} x_{i\mu,j\nu} |i\mu\rangle \langle j\nu| \quad (3)$$

其中矩阵元  $x_{i\mu,j\nu}$  就是

$$x_{i\mu,j\nu} = \langle i\mu|X|j\nu\rangle = \text{Tr}(X|j\nu\rangle \langle i\mu|).$$

<sup>1</sup>若非特别指明, 所说的矩阵是  $d^A d^B \times d^A d^B$  的方阵.

这里, 用双指标标记矩阵的行和列, 对行的标记是  $i\mu$ , 对列的标记是  $j\nu$ . 还可以把矩阵  $X$  表示为

$$X = \sum_{ij\mu\nu} x_{i\mu,j\nu} |i\rangle\langle j| \otimes |\mu\rangle\langle\nu| \quad (4)$$

一般地, Hilbert 空间  $\mathcal{H}$  上任意一个矩阵不一定总能表示为  $\mathcal{H}^A$  上的矩阵和  $\mathcal{H}^B$  上的矩阵的直积, 但是总可以表示为如下分解形式

$$X = \sum_i M_i \otimes N_i \quad (5)$$

其中  $M_i$  和  $N_i$  分别是  $\mathcal{H}^A$  和  $\mathcal{H}^B$  上的矩阵. 表达式 (4) 体现了这一点.

如果  $X$  是  $\mathcal{H}$  上的厄密矩阵, 即  $X = X^\dagger$ , 那么 (5) 式中的  $M_i$  和  $N_i$  可以是厄密的. 实际上, 可以在  $\mathcal{H}^A$  和  $\mathcal{H}^B$  上选择适当的基, 将厄密矩阵表示为实系数的展开形式.

直积空间  $\mathcal{H}$  上的酉矩阵  $U$  也不能总是表示为  $U^A \otimes U^B$  的直积形式. 不具有直积形式的酉变换是整体酉变换, 而  $U^A \otimes U^B$  描述的是局部酉变换.

在讨论两体问题的时候, 对于某个子空间上的矩阵, 比如说,  $A$  是  $\mathcal{H}^A$  上的矩阵, 更严格的写法是  $A \otimes \mathbb{1}^B$ . 类似地,  $\mathcal{H}^B$  上的矩阵  $B$  应该理解为  $\mathbb{1} \otimes B$ . 添加的单位算符意味着对相应的子空间中的向量不作任何操作. 如果矩阵  $A$  和  $B$  分属不同的 Hilbert 空间, 它们一定是对易的, 即

$$[A, B] = [A \otimes \mathbb{1}, \mathbb{1} \otimes B] = 0$$

在讨论两体量子系统作为一个整体随时间演化的时候, 需要给出整个系统的哈密顿量, 例如

$$H = H^A + H^B + H^{\text{int}},$$

其中  $H^A$  和  $H^B$  分别是子系统 A 和 B 的局部的定域的哈密顿量, 它们分别是  $\mathcal{H}^A$  和  $\mathcal{H}^B$  上的厄米算符,  $H^{\text{int}}$  则表示二者间的相互作用, 它是  $\mathcal{H}$  上的厄米算符, 所以, 上式应该写为

$$H = H^A \otimes \mathbb{1}^B + \mathbb{1}^A \otimes H^B + H^{\text{int}}. \quad (6)$$

以后, 在不致混淆的情况下, 我们有时会省略表明子系统的上标.

## 对矩阵的部分变换

常见的对 Hilbert 空间  $\mathcal{H}$  上的矩阵的操作有转置、厄密共轭和求迹. 矩阵  $X$  的转置记作  $X^T$ ,

$$X^T = \sum_{ij\mu\nu} x_{i\mu,j\nu} |j\nu\rangle\langle i\mu|$$

也可以等价地写为  $X^T = \sum_{ij\mu\nu} x_{j\nu,i\mu} |i\mu\rangle\langle j\nu|$ . 厄密共轭是

$$X^\dagger = \sum_{ij\mu\nu} x_{i\mu,j\nu}^* |j\nu\rangle\langle i\mu|$$

可以等价地写为  $X^\dagger = \sum_{ij\mu\nu} x_{j\nu,i\mu}^* |i\mu\rangle\langle j\nu|$ . 对矩阵  $X$  在整个空间上求迹, 结果是

$$\begin{aligned} \text{Tr}(X) &= \sum_{i'\mu'} \langle i'\mu' | X | i'\mu' \rangle \\ &= \sum_{i'\mu'} \sum_{ij\mu\nu} x_{i\mu,j\nu} \langle i'\mu' | i\mu \rangle \langle j\nu | i'\mu' \rangle \end{aligned}$$

$$= \sum_{i\mu} x_{i\mu, i\mu}$$

除了上述常见的操作以外, 还有一些仅仅涉及子空间  $\mathcal{H}^A$  或  $\mathcal{H}^B$  的操作, 即部分转置 (partial transpose) 和部分迹 (partial trace).

**定义 (部分转置)** Hilbert 空间  $\mathcal{H} = \mathcal{H}^A \otimes \mathcal{H}^B$  上的矩阵  $X$  表示为 (3) 式, 在  $\mathcal{H}^A$  空间中的转置记作  $X^{T_A}$ , 其形式是

$$X^{T_A} = \sum_{ij\mu\nu} x_{i\mu, j\nu} |j\mu\rangle \langle i\nu| = \sum_{ij\mu\nu} x_{i\mu, j\nu} |j\rangle \langle i| \otimes |\mu\rangle \langle \nu|. \quad (7)$$

在  $\mathcal{H}^B$  空间中的转置记作  $X^{T_B}$ , 其形式是

$$X^{T_B} = \sum_{ij\mu\nu} x_{i\mu, j\nu} |i\nu\rangle \langle j\mu| = \sum_{ij\mu\nu} x_{i\mu, j\nu} |i\rangle \langle j| \otimes |\nu\rangle \langle \mu|. \quad (8)$$

**定义 (部分迹)** 对形如 (3) 式的矩阵  $X$  在空间  $\mathcal{H}^B$  中求迹, 得到一个  $\mathcal{H}^A$  上的矩阵, 记作  $X^A$ ,

$$X^A = \text{Tr}_B(X) = \sum_{ij\mu} x_{i\mu, j\mu} |i\rangle \langle j|. \quad (9)$$

类似地, 对  $X$  在空间  $\mathcal{H}^A$  中求迹, 得到一个  $\mathcal{H}^B$  上的矩阵, 记作  $X^B$ ,

$$X^B = \text{Tr}_A(X) = \sum_{i\mu\nu} x_{i\mu, i\nu} |\mu\rangle \langle \nu|. \quad (10)$$

$X^A$  和  $X^B$  分别称为  $X$  在  $\mathcal{H}^A$  和  $\mathcal{H}^B$  上的约化矩阵.

例如, 对于  $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$  上的矩阵  $X$ , 下面两个图描述了部分转置和部分迹.

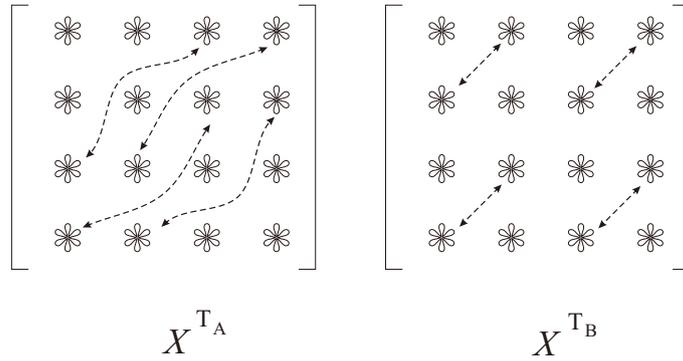


图 1: 将图中用虚线连接的矩阵元对调, 得到关于矩阵  $X$  的部分转置.

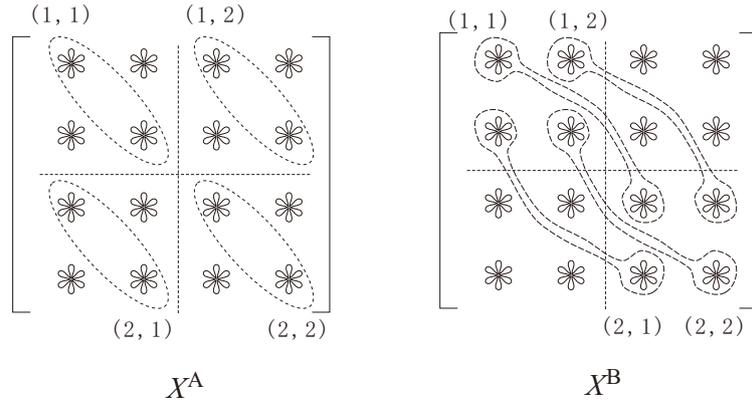


图 2: 将图中用虚线圈起来的矩阵元相加, 再将相加的结果放在  $2 \times 2$  矩阵的相应的位置, 得到关于矩阵  $X$  的部分迹.

一般地,  $X \neq X^A \otimes X^B$ . 还可以看到, 在整个空间  $\mathcal{H}$  上求迹等于先在  $\mathcal{H}^{A(B)}$  上求迹, 然后继续在  $\mathcal{H}^{B(A)}$  上求迹,

$$\text{Tr}(X) = \text{Tr}_A [\text{Tr}_B(X)] = \text{Tr}_B [\text{Tr}_A(X)]$$

其它一些性质:

- 设  $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}^A)$ ,  $C \in \mathcal{L}(\mathcal{H}^A \otimes \mathcal{H}^B)$ ,

$$\text{Tr}(A \text{Tr}_B C) = \text{Tr}((A \otimes \mathbb{1})C) \quad (11)$$

将  $C$  表示为

$$C = \sum_{\mu, \nu} \mathcal{C}_{\mu\nu} \otimes |\mu\rangle\langle\nu|$$

其中  $\mathcal{C}_{\mu\nu}$  是  $\mathcal{H}^A$  上的矩阵 (不是  $C$  的矩阵元). 容易看出

$$\text{Tr}_B C = \sum_{\mu} \mathcal{C}_{\mu\mu}$$

计算 (11) 式的左端, 这是在  $\mathcal{H}^A$  中的求迹,

$$(11) \text{ 式左端} = \text{Tr} \left( A \sum_{\mu} \mathcal{C}_{\mu\mu} \right)$$

再看 (11) 式的右端, 先求  $\text{Tr}_B$ , 有

$$\begin{aligned} & \text{Tr}_B ((A \otimes \mathbb{1})C) \\ &= \sum_{\mu, \nu} \text{Tr}_B [(A \otimes \mathbb{1})(\mathcal{C}_{\mu\nu} \otimes |\mu\rangle\langle\nu|)] \\ &= \sum_{\mu, \nu} \text{Tr}_B [A \mathcal{C}_{\mu\nu} \otimes |\mu\rangle\langle\nu|] \\ &= \sum_{\mu} A \mathcal{C}_{\mu\mu} \end{aligned}$$

再计算  $\text{Tr}_A$ , 得到 (11) 式的左端.

- 设  $|\psi\rangle, |\varphi\rangle \in \mathcal{H}^A$ , 那么有  $C \in \mathcal{L}(\mathcal{H}^A \otimes \mathcal{H}^B)$ ,

$$\langle \psi | C | \varphi \rangle \in \mathcal{L}(\mathcal{H}^B)$$

$$\langle \psi | C | \varphi \rangle = \text{Tr}_A ((|\varphi\rangle\langle\psi| \otimes \mathbb{1})C)$$

计算过程如下.

$$|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |i\rangle, \quad |\varphi\rangle = \sum_j \varphi_j |j\rangle$$

$$C = \sum_{m,\mu,n,v} c_{m\mu,nv} |m\rangle\langle n| \otimes |\mu\rangle\langle v|$$

$$\langle \psi | C | \varphi \rangle = \sum_{m,\mu,n,v} \psi_m^* c_{m\mu,nv} \varphi_n | \mu \rangle \langle v | \quad (12)$$

$$\begin{aligned} & \text{Tr}_A ((|\varphi\rangle\langle\psi| \otimes \mathbb{1})C) \\ &= \sum_{i,j,m,\mu,n,v} \text{Tr}_A [(\varphi_j \psi_i^* |j\rangle\langle i| \otimes \mathbb{1})(c_{m\mu,nv} |m\rangle\langle n| \otimes |\mu\rangle\langle v|)] \\ &= \sum_{k,i,j,m,\mu,n,v} \varphi_j \psi_i^* c_{m\mu,nv} \langle k|j\rangle \langle i|m\rangle \langle n|k\rangle |\mu\rangle\langle v| \end{aligned}$$

考虑基向量的正交归一性之后, 得到 (12) 式

## 约化密度矩阵

空间  $\mathcal{H} = \mathcal{H}^A \otimes \mathcal{H}^B$  中的任意一个混合态的密度矩阵  $\rho$  可以在自然基上表示为

$$\rho = \sum_{ij\mu\nu} \rho_{i\mu,j\nu} |i\mu\rangle\langle j\nu| = \sum_{ij\mu\nu} \rho_{i\mu,j\nu} |i\rangle\langle j| \otimes |\mu\rangle\langle\nu| \quad (13)$$

当然, 矩阵元  $\rho_{i\mu,j\nu}$  须满足密度矩阵的要求.

我们先来考虑力学量在混合态  $\rho$  中的期望值. 设  $X$  是两体系统整体的力学量, 那么它的期望值是

$$\langle X \rangle_\rho = \text{Tr}(X\rho) = \sum_{ij\mu\nu} \langle i\mu | \rho | j\nu \rangle \langle j\nu | X | i\mu \rangle \quad (14)$$

如果我们仅仅考虑属于子系统 A 的某个力学量  $A$ , 那么应该如何求得它在  $\rho$  上的期望值呢?

考虑两体系统的时候, 子系统的力学量  $A$  应该写为  $A \otimes \mathbb{1}$ . 因此  $A$  的期望值就是

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_\rho &= \text{Tr}[(A \otimes \mathbb{1}^B)\rho] \\ &= \text{Tr} \left[ (A \otimes \mathbb{1}^B) \sum_{ij\mu\nu} \rho_{i\mu,j\nu} |i\rangle\langle j| \otimes |\mu\rangle\langle\nu| \right] \\ &= \sum_{ij\mu\nu} \rho_{i\mu,j\nu} \text{Tr}[A |i\rangle\langle j| \otimes |\mu\rangle\langle\nu|] \end{aligned} \quad (15)$$

上述求迹是对整个空间  $\mathcal{H}$  而言的, 等价于先后在两个子空间上求迹, 即  $\text{Tr} = \text{Tr}_A \text{Tr}_B = \text{Tr}_B \text{Tr}_A$ . 对 (15) 式求  $\text{Tr}_B$ , 导致  $\mu = \nu$ , 求和指标中不再出现  $\nu$ , 接着还要计算  $\text{Tr}_A$ , 即

$$\langle A \rangle_\rho = \text{Tr}_A \left[ A \sum_{ij\mu} \rho_{i\mu, j\mu} |i\rangle\langle j| \right] = \text{Tr}_A [A\rho^A] \quad (16)$$

这里,  $\rho^A$  是  $\rho$  在  $\mathcal{H}^A$  上的约化密度矩阵, 即

$$\rho^A = \text{Tr}_B(\rho) = \sum_{ij\mu} \rho_{i\mu, j\mu} |i\rangle\langle j| \quad (17)$$

需要检验  $\rho^A$  是否满足密度矩阵的三个性质. 容易看出  $\text{Tr}(\rho^A) = 1$  以及  $\rho^A = (\rho^A)^\dagger$ . 以下过程可以说明它的正定性. 对于任意的  $|\chi\rangle \in \mathcal{H}^A$ , 有

$$\begin{aligned} \langle \chi | \rho^A | \chi \rangle &= \text{Tr}_A(\rho^A | \chi \rangle \langle \chi |) = \text{Tr}[\rho(|\chi\rangle\langle\chi| \otimes \mathbb{1}^B)] \\ &= \text{Tr} \left[ \rho \left( |\chi\rangle\langle\chi| \otimes \sum_{\mu} |\mu\rangle\langle\mu| \right) \right] \\ &= \sum_{\mu} \text{Tr}[\rho(|\chi\rangle \otimes |\mu\rangle)(\langle\chi| \otimes \langle\mu|)] \\ &= \sum_{\mu} (\langle\chi| \otimes \langle\mu|) \rho (|\chi\rangle \otimes |\mu\rangle) \geq 0 \end{aligned} \quad (18)$$

其中 (18) 式的第二个等式可以通过 (13) 得到, 也是以前提到过的关于部分迹的一个性质.

这里不带下标的求迹运算  $\text{Tr}$  是在整个空间  $\mathcal{H}$  上进行的. 上式的结果表明, 对于任意的  $|\chi\rangle$ ,  $\langle \chi | \rho^A | \chi \rangle \geq 0$ , 即  $\rho^A$  是正定的. 于是  $\rho^A$  满足密度矩阵的要求, 描述了子系统  $A$  的局部的定域的量子态. 同理, 约化密度矩阵  $\rho^B = \text{Tr}_A(\rho)$  描述了子系统  $B$  的局部的量子态. 一般情况下,  $\rho \neq \rho^A \otimes \rho^B$ , 即整体的量子态不一定具有局部量子态的直积形式.

如果整体量子态是直积形式, 即  $|\Psi\rangle = |\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle$ , 那么局部量子态分别是  $|\psi\rangle$  和  $|\varphi\rangle$ .

如果整体量子态不是直积形式, 即处于纠缠态, 那么局部量子态是混合态. 从整体上的纯态到局部上的混合态, 反映了这样的事实: 当子系统之间存在关联的时候, 如果孤立地看到某个子系统, 那么不能明确地描述这个子系统的状态.

约化密度矩阵来自整体密度矩阵的部分迹, 在某种程度上, 数学上的求迹运算意味着物理上的测量过程, 或者退相干过程, 所以, 简单而直接地谈论约化密度矩阵或局部量子态缺乏物理上的支持. 尽管如此, 约化密度矩阵的数学形式可以很好地描述局部测量的结果的几率分布. 考虑  $\mathcal{H}^A$  和  $\mathcal{H}^B$  上的投影算符 (不一定是一维的)  $\Pi_a^A$  和  $\Pi_b^B$ , 把它们视作测量算符, 对应的观测结果记作  $a$  和  $b$ , 那么得到结果  $a$  和  $b$  的几率分别是  $\Pi^A$  和  $\Pi^B$  的期望值,

$$p(a) = \text{Tr}[\rho(\Pi_a^A \otimes \mathbb{1}^B)] = \text{Tr}_A[\rho^A \Pi_a^A]$$

$$p(b) = \text{Tr}[\rho(\mathbb{1}^A \otimes \Pi_b^B)] = \text{Tr}_B[\rho^B \Pi_b^B]$$

这意味着局部测量结果的几率分布取决于相应的约化密度算符. 另一方面, 联合测量结果  $(a, b)$  的几率等于  $p(a, b) = \text{Tr}[\rho(\Pi^A \otimes \Pi^B)]$ , 我们可以从联合测量结果的几率分布得到边缘几率分布,

$$p(a) = \sum_b p(a, b), \quad p(b) = \sum_a p(a, b)$$

而且, 几率  $p(a)$  并不依赖于子系统  $B$  的观测对象的选择, 就是说, 如果对子系统  $B$  测量另一个力学量  $B'$ , 测量结果记作  $b'$ , 那么同样有

$$p(a) = \sum_{b'} p(a, b')$$

只要对  $B$  的测量是完全的 (complete) 而不是选择的 (selective), 就总有上述关系. 一般地, 对子系统  $B$  的保迹变换不会影响对子系统  $A$  的测量结果的几率分布, 这是定域性的体现.

虽然我们可以从联合分布得到边缘分布, 但是, 在一般情形下,  $p(a, b) \neq p(a)p(b)$ . 即便在经典几率中, 这也是很自然的事情, 表明二者之间有关联.

## 联合测量

### 联合测量

设两体系统  $AB$  的整体的量子态是  $|\Psi\rangle$ . 再设想  $X$  是  $AB$  的整体力学量, 即  $X$  是  $\mathcal{H}$  上的厄密算符, 本征值和相应的本征向量分别用  $x_i$  和  $|\xi_i\rangle$  表示,  $i = 0, 1, \dots, \dim \mathcal{H} - 1$ , 即  $X|\xi_i\rangle = x_i|\xi_i\rangle$ . 在  $|\Psi\rangle$  中测量  $X$  得到结果  $x_i$  的几率是  $p(x_i) = |\langle \xi_i | \Psi \rangle|^2$ . 这种对于两体系统整体的测量被称为联合测量. 不过, 在很多时候 (尤其是讨论子系统之间的关联行为的时候), 同时测量两个子系统的局部的 (local) 力学量也被看成是联合测量. 设  $A$  和  $B$  分别是子系统  $A$  和子系统  $B$  的力学量, 它们的本征方程分别是  $A = \sum_i a_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$  和  $B = \sum_j b_j |\beta_j\rangle\langle\beta_j|$ ,  $i = 0, 1, \dots, \dim \mathcal{H}^A - 1$ ,  $j = 0, 1, \dots, \dim \mathcal{H}^B - 1$ . 测量  $A$  得到结果  $a_i$ , 同时测量  $B$  得到结果  $b_j$  的几率是

$$p(a_i, b_j) = |\langle \alpha_i | \otimes \langle \beta_j | | \Psi \rangle|^2$$

有时候, 我们也把上述几率写为  $p(a_i, b_j | A, B)$ , 在竖线右边标明了每个子系统的被测力学量, 它们的观测结果写在竖线的左边. 这个形式看起来像是条件几率, 我们也确实可以把竖线右边的内容视作条件. 定义投影算符  $\Pi_i^A = |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$  和  $\Pi_j^B = |\beta_j\rangle\langle\beta_j|$ , 几率  $p(a_i, b_j)$  又可以写为

$$p(a_i, b_j) = \langle \Psi | (\Pi_i^A \otimes \Pi_j^B) | \Psi \rangle = \text{Tr} [(\Pi_i^A \otimes \Pi_j^B)(|\Psi\rangle\langle\Psi|)] \quad (19)$$

这是观测到结果  $a_i$  和  $b_j$  这两个事件同时出现的几率, 是联合几率. 对此有以下两点需要说明.

1. 可以从联合几率得到边缘 (marginal) 几率. 若联合几率  $p(a_i, b_j)$  是已知的, 那么可以有

$$p(a_i) = \sum_j p(a_i, b_j), \quad p(b_j) = \sum_i p(a_i, b_j)$$

$p(a_i)$  和  $p(b_j)$  就是边缘几率, 它们分别是在  $|\Psi\rangle$  中仅仅测量  $A$  并得到结果  $a_i$  和仅仅测量  $B$  并得到结果  $b_j$  的几率. 这种从整体到部分, 从联合到边缘的过渡是经典概率论的内容, 但也符合 Born 规则给出的结论.

注意到与结果  $a_i$  对应的投影算符是  $\Pi_i^A$ , 根据 Born 规则, 有

$$p(a_i) = \langle \Psi | (\Pi_i^A \otimes \mathbb{1}^B) | \Psi \rangle$$

上式的意思是, 对  $B$  系统不作任何操作, 所以有  $\mathbb{1}^B$ . 而且, 利用性质 (11), 可以将上式表示为

$$p(a_i) = \text{Tr} [\Pi_i^A \text{Tr}_B(\Psi)], \quad \Psi = |\Psi\rangle\langle\Psi|$$

这里的  $\text{Tr}_B(\Psi)$  就是稍后要讨论的约化密度算子.

将  $\mathbb{1}^B$  表示为  $\sum_j \Pi_j^B$ , 几率  $p(a_i)$  可以继续写为

$$p(a_i) = \sum_j \langle \Psi | (\Pi_i^A \otimes \Pi_j^B) | \Psi \rangle = \sum_j p(a_i, b_j)$$

类似地可以得到  $p(b_j) = \sum_i p(a_i, b_j)$ .

2. 这里说的同时并不一定必须是严格的时间上的同步, 实际上可以分两步进行. 例如, 我们可以先测量  $B$ , 以一定的几率  $p(b_j)$  得到结果  $b_j$ , 在此基础上再测量  $A$ , 以条件几率  $p(a_i|b_j)$  得到结果  $a_i$ , 于是联合几率  $p(a_i, b_j) = p(a_i|b_j)p(b_j)$ . 这种叙述同样也是经典概率论的内容, 而在量子力学中也有同样的结论. 选择  $\mathcal{H}^B$  的基向量为  $\{|\beta_j\rangle\}$ , 总可以将  $|\Psi\rangle$  表示为

$$|\Psi\rangle = \sum_j |\tilde{\psi}_j\rangle \otimes |\beta_j\rangle$$

这里  $|\tilde{\psi}_j\rangle$  未归一, 彼此也不一定正交. 从这个表达式可以看出, 测量  $B$  得到结果  $b_j$  的几率就是  $\langle \tilde{\psi}_j | \tilde{\psi}_j \rangle$ . 计算过程是

$$\begin{aligned} p(b_j) &= \langle \Psi | \mathbb{1}^A \otimes \Pi_j^B | \Psi \rangle \\ &= \left( \sum_m \langle \tilde{\psi}_m | \otimes \langle \beta_m | \right) (\mathbb{1}^A \otimes \Pi_j^B) \left( \sum_{m'} |\tilde{\psi}_{m'}\rangle \otimes |\beta_{m'}\rangle \right) \\ &= \sum_{m, m'} \langle \tilde{\psi}_m | \tilde{\psi}_{m'} \rangle \langle \beta_m | \Pi_j^B | \beta_{m'} \rangle = \langle \tilde{\psi}_j | \tilde{\psi}_j \rangle \end{aligned}$$

将  $|\tilde{\psi}_j\rangle$  归一化, 令

$$|\psi_j\rangle = \frac{1}{\sqrt{p(b_j)}} |\tilde{\psi}_j\rangle$$

结果  $b_j$  出现之后, 两体系统的状态是  $|\psi_j\rangle \otimes |\beta_j\rangle$ . 继续测量  $A$ , 得到结果  $a_i$  的几率就是条件几率  $p(a_i|b_j)$ ,

$$p(a_i|b_j) = (\langle \psi_i | \otimes \langle \beta_j |) (\Pi_i^A \otimes \mathbb{1}^B) (|\psi_i\rangle \otimes |\beta_j\rangle) = \langle \psi_j | \Pi_i^A | \psi_j \rangle$$

如果根据  $p(a_i, b_j) = p(a_i|b_j)p(b_j)$  计算联合几率, 那么结果是

$$p(a_i, b_j) = p(a_i|b_j)p(b_j) = \langle \psi_j | \Pi_i^A | \psi_j \rangle p(b_j) = \langle \tilde{\psi}_j | \Pi_i^A | \tilde{\psi}_j \rangle$$

如果直接计算投影算符  $\Pi_i^A \otimes \Pi_j^B$  在  $|\Psi\rangle$  的期望值, 那么有

$$\begin{aligned} p(a_i, b_j) &= \langle \Psi | (\Pi_i^A \otimes \Pi_j^B) | \Psi \rangle \\ &= \sum_{m, m'} (\langle \tilde{\psi}_m | \otimes \langle \beta_m |) (\Pi_i^A \otimes \Pi_j^B) (|\tilde{\psi}_{m'}\rangle \otimes |\beta_{m'}\rangle) \\ &= \langle \tilde{\psi}_j | \Pi_i^A | \tilde{\psi}_j \rangle \end{aligned}$$

所以, 两种看法给出了相同的结果.

## 系统 Q 和仪器 M

考虑理想的量子测量. 设系统的初态是

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\alpha_i\rangle$$

仪器的初态是  $|\varphi\rangle$ . Pre-measurement 过程得到的两体量子态是

$$|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle \longrightarrow |\Psi\rangle = \sum_i c_i |\alpha_i\rangle \otimes |\varphi_i\rangle$$

其中的  $\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij}$ . 这是测量仪器的量子性的一面.

然后, 仪器的量子态  $|\varphi_i\rangle$  表现出经典现象, 从而有系统和仪器的末态

$$\sum_i |c_i|^2 |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| \otimes [m_i]$$

这是仪器的经典性的一面, 上式也只是示意性的表示.

仪器的状态从  $|\varphi_i\rangle$  到  $[m_i]$ , 这个过程不甚清楚. 但是有一个简单的可以类比的描述: 用投影算子  $\Pi_i^M = |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$  作用于仪器,

$$|\Psi\rangle \longrightarrow (\mathbb{1} \otimes \Pi_i^M) |\Psi\rangle = c_i |\alpha_i\rangle \otimes |\varphi_i\rangle$$

这是一个未归一的量子态. 在仪器上看到现象  $m_i$  的几率就是  $|c_i|^2$ .

也可以用密度矩阵表示. 先将  $\sum_i c_i |\alpha_i\rangle \otimes |\varphi_i\rangle$  表示为密度矩阵的形式,

$$\Psi = |\Psi\rangle\langle\Psi| = \sum_{i,j} c_i c_j^* |\alpha_i\rangle\langle\alpha_j| \otimes |\varphi_i\rangle\langle\varphi_j|$$

用投影算子  $\Pi_i^M$  作用于上述量子态,

$$(\mathbb{1} \otimes \Pi_i^M) \left[ \sum_{i,j} c_i c_j^* |\alpha_i\rangle\langle\alpha_j| \otimes |\varphi_i\rangle\langle\varphi_j| \right] (\mathbb{1} \otimes \Pi_i^M) = |c_i|^2 |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| \otimes |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$$

从中可以看出几率  $|c_i|^2$ , 这个几率也就是前面讲过的局部测量得到的几率, 即  $|c_i|^2 = \text{Tr}[\Psi(\mathbb{1} \otimes \Pi_i^M)]$ , 其中  $\Psi = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ . 利用以前推导过的公式

$$\text{Tr}(A \text{Tr}_B C) = \text{Tr}((A \otimes \mathbb{1})C)$$

将  $|c_i|^2$  表示为

$$|c_i|^2 = \text{Tr}[\Psi(\mathbb{1} \otimes \Pi_i^M)] = \text{Tr}(\Pi_i^M \text{Tr}_Q \Psi) = \text{Tr}(\Pi_i^M \rho^M)$$

现在看到:

- Born 规则所说的几率  $|c_i|^2 = |\langle\alpha_i|\psi\rangle|^2$  如今体现在测量仪器上.
- 几率  $|c_i|^2$  有两种不同的表示, 一种是针对相互作用前系统的状态而言的, 即  $|\langle\alpha_i|\psi\rangle|^2$ , 另一种是针对相互作用后仪器的状态而言的, 即  $\text{Tr}(\Pi_i^M \rho^M)$ .

上述类比只是一种示意性的描述, 希望说明的是:

- 演化过程

$$|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle \xrightarrow{\text{unitary evolution}} \text{pre-measurement state } |\Psi\rangle$$

尚不是测量过程, 在  $|\Psi\rangle$  中没有体现出现象.

- 测量仪器需要再经历一个从微观到宏观的过程, 使量子态  $|\varphi_i\rangle$  与现象  $m_i$  形成对应, 并最终展现出明确的可以严格区分的现象.
- 在上述类比中, 借助对仪器的进一步观测来实现从  $|\varphi_i\rangle$  到现象  $m_i$  的过渡, 这只是权宜之计. 这种做法的不恰当之处在于, 还需要一个测量仪器  $M'$  与原有的仪器  $M$  发生相互作用, 于是将导致 von Neumann 说的“测量链”.

对仪器测量非选择测量导致如下结果,

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle\langle\Psi| &\longrightarrow \rho_{\text{Post-M}} = \sum_i \Pi_i^M |\Psi\rangle\langle\Psi| \Pi_i^M \\ &= \sum_i |c_i|^2 |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| \otimes |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \end{aligned} \quad (20)$$

其中下标 Post - M 表示 post-measurement. 测量前 (或者说 pre-measurement) 系统和仪器处于两体纯态, 测量后, 系统和仪器的整体状态是混合态. 而且, 可以和  $\Psi = |\Psi\rangle\langle\Psi|$  的约化密度矩阵作对比.

如果仪器的状态  $|\varphi_i\rangle$  对应于并进一步演化为经典结果  $m_i$ , 那么得到

$$\sum_i |c_i|^2 |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| \otimes [m_i]$$

经典状态  $[m_i]$  对应于系统的力学量  $A$  取值  $a_i$ , 几率为  $|c_i|^2$ .

用系综的形式表示测量后系统的状态

$$\mathcal{E}^Q = \{p_i = |c_i|^2, \alpha_i\}$$

用密度矩阵表示,

$$\rho^Q = \sum_i p_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| = \text{Tr}_M \rho_{\text{PM}}$$

几点说明.

1. 在 Born 规则的叙述中, 只有系统, 没有涉及测量仪器, 与得到结果  $a_i$  对应的过程是, 用投影算子  $\Pi_i^Q = |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$  作用于系统的初态  $|\psi\rangle$ ,

$$\Pi_i^Q |\psi\rangle = |\alpha_i\rangle \langle\alpha_i|\psi\rangle = c_i |\alpha_i\rangle$$

几率是  $p_i = |c_i|^2$ , 得到结果  $a_i$  时, 系统的状态变为  $|\alpha_i\rangle$ .

或者, 在不作选择的情形下,

$$|\psi\rangle\langle\psi| \longrightarrow \rho^Q = \sum_i \Pi_i^Q |\psi\rangle\langle\psi| \Pi_i^Q = \sum_i p_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$$

2. 引入测量仪器后, 测量过程是间接的而不是直接的, 测量结果体现在仪器上. 仪器的状态  $|\varphi_i\rangle$  (以及相应的经典状态  $[m_i]$ ) 对应于系统的力学量  $A$  的本征值  $a_i$ , 过程是

$$\begin{aligned} |\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle &\xrightarrow{\text{unitary evolution}} \text{pre-measurement state } |\Psi\rangle \\ &\xrightarrow{\text{decoherence}} \text{post-measurement state } \rho_{\text{Post-M}} \end{aligned}$$

在系统和仪器的测量后的量子态 (即  $\rho_{\text{Post-M}}$ ) 中去除仪器部分, 得到系统的测量后的量子态  $\rho^Q = \text{Tr}_M \rho_{\text{Post-M}}$ . 还可以注意到,  $\text{Tr}_M \Psi = \rho^Q$ , 就是说, 对于系统和仪器的 pre-measurement state  $\Psi = |\Psi\rangle\langle\Psi|$  求关于仪器的部分迹, 同样得到了系统的测量后的量子态. 这说明, 在 pre-(post-)measurement 两体量子态中, 系统的局部量子态没有变化. 这是定域性的体现: 对仪器的保迹操作 (酉变换, 非选择测量等等) 不会影响到系统的局部量子态. 系统状态的改变发生在与仪器建立相互作用并一起演化的过程中, 即从初态  $\psi$  变为  $\text{Tr}_M \Psi$ . 这个过程实际上属于开放量子系统的演化. 当然, 如果把系统和仪器当作一个整体, 那么从  $\psi \otimes \varphi$  到  $\Psi$  的过程是随时间变化的酉变换.

3. 有其它变形, 例如

$$|\Psi'\rangle = \sum_i c_i |\beta_i\rangle \otimes |\mu_i\rangle$$

这里的  $c_i$  仍然是展开式  $|\psi\rangle = \sum_i c_i |\alpha_i\rangle$  中的展开系数, 但是,  $|\Psi\rangle$  中的  $|\beta_i\rangle$  (正交归一) 不再是被测力学量  $A$  的本征向量. 这一形式不影响  $A$  取值  $a_i$  的几率, 但是测量后系统的状态不再是  $A$  的本征态.

4. 存在的问题: 为什么仪器的状态  $|\varphi_i\rangle$  可以表现出经典现象? 考虑最简单的  $2 \otimes 2$  情形, 假设系统和仪器达到了如下状态

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |0\rangle + |0\rangle \otimes |1\rangle)$$

其中  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$  是  $\sigma_z$  的本征态, 本征值分别为  $+1$  和  $-1$ . 根据这个形式, 可以说, 仪器的  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$  对应于系统的力学量  $\sigma_z^Q$  的本征值. 但是,  $|\Psi\rangle$  又可以表示为

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x+\rangle \otimes |x+\rangle + |x-\rangle \otimes |x-\rangle)$$

根据这个形式, 可以说系统的被测力学量是  $\sigma_x^Q$ , 到底是哪一个呢?

## 最简单的两体量子系统和量子态

两个双值量子系统是最简单的两体量子系统, 记作  $2 \otimes 2$  量子系统. 它可以用来讨论量子力学的基本问题.

两个双值系统的量子态可以在自然基  $\{|i\rangle \otimes |\mu\rangle\}$  ( $i, \mu = 0, 1$ ) 上展开.

对于  $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$  上厄密矩阵, 我们着重考虑密度矩阵, 其它的厄密矩阵有类似的结果.

采用类似于  $\mathbb{C}^2$  空间上的做法. 引入如下 16 个矩阵,

$$\mathbb{1}^A \otimes \mathbb{1}^B, \quad \mathbb{1}^A \otimes \sigma_j^B, \quad \sigma_i^A \otimes \mathbb{1}^B, \quad \sigma_i^A \otimes \sigma_j^B, \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (21)$$

计算它们彼此间的对易关系.

$$[\sigma_x \otimes \sigma_x, \sigma_y \otimes \sigma_y] = 0$$

$$[\sigma_x \otimes \sigma_x, \sigma_x \otimes \sigma_y] = 2i \mathbb{1} \otimes \sigma_z$$

$$[\sigma_x \otimes \sigma_x, \sigma_y \otimes \sigma_z] = i\sigma_z \otimes (-i)\sigma_y - (-i)\sigma_z \otimes i\sigma_y = 0$$

定义两个矩阵  $X$  和  $Y$  的内积为  $(X, Y) := \text{Tr}(A^\dagger B)$ , 如果内积为零, 那么它们正交. 验证 (21) 式中矩阵的正交性, 例如,

$$\text{Tr}[(\sigma_x \otimes \sigma_x)(\sigma_y \otimes \sigma_y)] = 0$$

$$\text{Tr}[(\sigma_x \otimes \sigma_x)(\mathbb{1} \otimes \sigma_y)] = 0$$

.....

$2 \otimes 2$  系统的密度矩阵  $\rho$  可以表示为 (以下略去上标  $A$  和  $B$ )

$$\rho = \frac{1}{4} \left[ \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} + \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\sigma} \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \sum_{m,n=1}^3 t_{mn} \sigma_m \otimes \sigma_n \right] \quad (22)$$

上式中  $\mathbf{r} = (r_1, r_2, r_3) \in \mathbb{R}^3$ ,  $\mathbf{s} = (s_1, s_2, s_3) \in \mathbb{R}^3$ ,  $t_{mn} \in \mathbb{R}$ . 这些实参数的具体形式是

$$r_i = \text{Tr}[\rho(\sigma_i \otimes \mathbb{1})], \quad s_j = \text{Tr}[\rho(\mathbb{1} \otimes \sigma_j)], \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (23)$$

$$t_{mn} = \text{Tr}[\rho(\sigma_m \otimes \sigma_n)], \quad m, n = 1, 2, 3 \quad (24)$$

向量  $\mathbf{r}$  和  $\mathbf{s}$  是三维实空间中的向量, 且  $|\mathbf{r}| \leq 1, |\mathbf{s}| \leq 1$ . 九个  $t_{mn}$  可以排成一个  $3 \times 3$  的实数矩阵, 记作  $T = (t_{mn})$ . 矩阵  $T$  矩阵元与  $\sigma_m \otimes \sigma_n$  有关, 故被称为关联矩阵. 我们还可以把 16 个实数,  $1, r_i, s_j, t_{mn}$ , 排成一个  $4 \times 4$  的矩阵, 记作  $R_\rho$ , 其形式是

$$R_\rho = \begin{pmatrix} 1 & \vec{s} \\ \mathbf{r}^\downarrow & T \end{pmatrix} \quad (25)$$

这里,  $\vec{s}$  采用行向量的形式,  $\mathbf{r}^\downarrow$  采用列向量的形式 (不是前面说的降序排列), 而  $T$  则是一个  $3 \times 3$  的矩阵.

考虑  $\rho$  的约化密度矩阵  $\rho^A$  和  $\rho^B$ . 直接计算给出

$$\rho^A = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\sigma})$$

$$\rho^B = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\sigma})$$

表明出现在 (22) 式中的  $\mathbf{r}$  和  $\mathbf{s}$  分别是关于子系统  $A$  和  $B$  约化密度矩阵的 Bloch 向量.

例如, 纯态  $|\Psi\rangle = \cos\alpha |00\rangle + \sin\alpha |11\rangle$  的密度矩阵可以表示为

$$\Psi = |\Psi\rangle\langle\Psi| = \frac{1}{4}(\mathbb{1} \otimes \mathbb{1} + \sigma_z \otimes \mathbb{1} \cos 2\alpha + \mathbb{1} \otimes \sigma_z \cos 2\alpha + \sigma_x \otimes \sigma_x \sin 2\alpha - \sigma_y \otimes \sigma_y \sin 2\alpha + \sigma_z \otimes \sigma_z)$$

$$R_\Psi = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cos 2\alpha \\ 0 & \sin 2\alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\sin 2\alpha & 0 \\ \cos 2\alpha & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

而对于直积形式的可分离态  $\rho^A \otimes \rho^B$ , 它的  $R$  矩阵中的  $T$  矩阵是  $\mathbf{r}^\downarrow \vec{s}$ .

## 酉变换

两体量子系统的酉变换可以分为局部的和整体的. 以  $2 \otimes 2$  为例讨论两体量子系统的酉变换.

**局部酉变换** 分别对每个子系统  $A$  和  $B$  进行酉变换  $U^A$  和  $U^B$ , 更严格地写作  $U^A \otimes \mathbb{1}^B$  和  $\mathbb{1}^A \otimes U^B$ . 如果对  $A$  和  $B$  都进行局部酉变换, 那么酉变换矩阵是  $U^A \otimes U^B$ .

$$\rho \longrightarrow (U^A \otimes U^B)\rho(U^A \otimes U^B)^\dagger$$

以前说过的 Schmidt 分解的形式就是来自局部酉变换的结果.

形如  $\sigma_i \otimes \mathbb{1}$  或  $\mathbb{1} \otimes \sigma_j$  ( $i, j = 1, 2, 3$ ) 的生成元生成了局部酉变换, 例如

$$\exp\{-i\phi(\sigma_z \otimes \mathbb{1})\} = \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \cos \phi - i\sigma_z \otimes \mathbb{1} \sin \phi = e^{-i\phi\sigma_z} \otimes \mathbb{1}$$

这实际上就是对第一个子系统的酉变换.

子系统之间的关联行为不会因为局部酉变换而改变.

**整体酉变换** 整体酉变换不能表示为局部酉变换的直积. 形如  $\sigma_i \otimes \sigma_j$  ( $i, j = 1, 2, 3$ ) 的生成元生成了整体酉变换. 例如, 以  $\sigma_z \otimes \sigma_z$  作为变换的生成元, 有

$$U(\tau) = \exp\{-i\tau(\sigma_z \otimes \sigma_z)\} = \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \cos \tau - i\sigma_z \otimes \sigma_z \sin \tau$$

这个酉变换不能分解为  $U^A \otimes U^B$  的形式, 它是整体的酉变换.

整体变换将改变子系统之间的关联行为, 而且, 在量子测量, 量子操控的理论和实验研究领域, 整体变换是必不可少的. 一个典型的例子是控制变换, 例如控制非变换,  $U_{\text{CNOT}}$ . 这里, CNOT 的意思是 control not, 即“控制非”操作, 矩阵形式是

$$U_{\text{CNOT}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (26)$$

让  $U_{\text{CNOT}}$  作用于  $2 \otimes 2$  系统的量子态, 其效果是: 如果第一个粒子处于  $|0\rangle$ , 那么对第二个粒子不作任何操作, 单位算符  $\mathbb{1}$  表示恒等变换; 如果第一个粒子处于  $|1\rangle$ , 那么对第二个粒子进行  $\sigma_x$  操作. 注意到  $\sigma_x$  操作就是经典逻辑中的“非”运算, 故  $U_{\text{CNOT}}$  就是第一个粒子控制第二个粒子的控制非操作. 控制非操作不能表示为两个局部的酉变换的直积的形式, 它是面向两体量子态的整体的酉变换. 可以将控制非操作表示为

$$U_{\text{CNOT}} = |0\rangle\langle 0| \otimes \mathbb{1} + |1\rangle\langle 1| \otimes \sigma_x \quad (27)$$

设系统  $A$  的初态是  $|\psi\rangle = c_0 |0\rangle + c_1 |1\rangle$ , 系统  $B$  的初态是  $|\varphi\rangle = |0\rangle$ . 对二者施加整体变化  $U_{\text{CNOT}}$ , 有

$$\begin{aligned} |\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle &= (c_0 |0\rangle + c_1 |1\rangle) \otimes |0\rangle \\ \longrightarrow U_{\text{CNOT}}[(c_0 |0\rangle + c_1 |1\rangle) \otimes |0\rangle] \\ &= c_0 |0\rangle |0\rangle + c_1 |1\rangle |1\rangle \end{aligned}$$

得到的结果正是理想测量 (测量系统的力学量  $\sigma_z$ ) 所需要的.

**定理 (整体酉变换的正则形式)** 用  $A$  和  $B$  表示  $2 \otimes 2$  量子系统的两个子系统. 任何一个整体酉变换可以表示为

$$U = (V^A \otimes V^B) U_{\text{can}} (W^A \otimes W^B) \quad (28)$$

其中  $V^{A(B)}$  和  $W^{A(B)}$  是作用于  $A(B)$  的局部酉变换, 而  $U_{\text{can}}$  的形式是

$$U_{\text{can}} = \exp \left\{ -i (\xi_x \sigma_x^A \otimes \sigma_x^B + \xi_y \sigma_y^A \otimes \sigma_y^B + \xi_z \sigma_z^A \otimes \sigma_z^B) \right\} \quad (29)$$

其中  $\xi_x, \xi_y$  和  $\xi_z$  均为实数, 下标 can 表示正则 (canonical) 形式.

该定理表明, 整体酉变换的核心部分是  $U_{\text{can}}$ . 例如, 对于  $U_{\text{CNOT}}$ , 可以验证如下等式,

$$\begin{aligned} U_{\text{CNOT}} &= \left[ \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \right] \exp \left\{ -i \frac{\pi}{4} (\sigma_x \otimes \sigma_x) \right\} \\ &\quad \times \left[ \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right] \quad (30) \end{aligned}$$

就是说, 控制非操作的核心部分是两个粒子之间形如  $\sigma_x \otimes \sigma_x$  的相互作用. 实际上, 利用形如  $\sigma_i \otimes \sigma_j$  ( $i, j = x, y, z$ ) 的相互作用也可以构造出控制非操作, 与上式相比, 仅仅在局部的酉变换上有所不同. 控制非操作是整体酉变换的一种特殊形式, 它不但涉及形如  $\sigma_i \otimes \sigma_j$  的相互作用, 而且对相互作用的强度和相互作用持续的时间也有要求, 简单地说, 这体现在  $U_{\text{can}}$  的展开形式中算符  $e^{-i \frac{\pi}{4} (\sigma_x \otimes \sigma_x)}$  的指数上的因子  $\frac{\pi}{4}$ .

设系统  $Q$  和仪器  $M$  作为一个两体量子系统以如下方式演化,

$$U(\tau) = \begin{pmatrix} \cos \tau & \sin \tau & 0 & 0 \\ -\sin \tau & \cos \tau & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos \tau & -\sin \tau \\ 0 & 0 & \sin \tau & \cos \tau \end{pmatrix} \quad (31)$$

这个演化形式的来源是, 假设  $Q$  和  $M$  的相互作用 Hamilton 量是

$$H^{\text{int}} = -\hbar g \sigma_z^Q \otimes \sigma_y^M \quad (32)$$

其中  $g$  是耦合常数, 设  $g > 0$ , 它的大小反映了相互作用的强弱. 在不致引起混淆的时候, 上标  $Q$  和  $M$  将被省去. 略去系统和仪器自身的哈密顿量, 两体系统的时间演化算符是  $U(t) = e^{-iHt/\hbar}$ , 具体形式 (31) 式给出, 其中  $\tau = gt$ .

如果把  $U(\tau)$  中左上角的  $2 \times 2$  的子矩阵记作  $U_0$ , 把右下角的子矩阵记作  $U_1$ , 那么  $U(\tau)$  可以写为  $U(\tau) = |0\rangle\langle 0| \otimes U_0 + |1\rangle\langle 1| \otimes U_1$ . 显然, 这是一个控制酉操作: 当系统处于  $|0\rangle$  时, 对仪器的操作是酉变换  $U_0$ ; 当系统处于  $|1\rangle$  时, 对仪器的操作是酉变换  $U_1$ .

首先, 我们要说明将整体的酉演化设为 (31) 的意义. 为此, 计算系统的被测力学量  $\sigma_z^S$  在海森堡图像中随时间的演化. 将  $\sigma_z^S$  写作  $\sigma_z \otimes \mathbb{1}$ . 在海森堡图像中,

$$(\sigma_z \otimes \mathbb{1})(t) = U^\dagger(t)(\sigma_z \otimes \mathbb{1})U(t) = \sigma_z \otimes \mathbb{1} = (\sigma_z \otimes \mathbb{1})(0)$$

上述结果缘于  $\sigma_z \otimes \mathbb{1}$  与  $H^{\text{int}}$  对易. 因此, 在 (32) 式的相互作用下, 被测力学量  $\sigma_z^S$  不随时间变化. 这是一件好事情, 因为我们在系统和仪器发生相互作用的过程中被测力学量有所改变, 不希望被测力学量受到测量过程的干扰. 至于在  $H_{\text{int}}$  中出现的  $\sigma_y^M$ , 作如此设定的原因只是为了在计算上的简洁——酉变换  $U(t)$  是一个实数矩阵. 完全可以把  $\sigma_y^M$  替换成任意方向上的泡利矩阵  $\sigma_n^M$ , 不过这会影响到仪器的初态的选择, 在下面的讨论中将看到这一点.

现在再来计算仪器的一些典型的力学量随时间的变化. 将  $\sigma_i^M$  写作  $\mathbb{1} \otimes \sigma_i$ , 在海森堡图像中,

$$(\mathbb{1} \otimes \sigma_x)(t) = U^\dagger(t)(\mathbb{1} \otimes \sigma_x)U(t) = (\mathbb{1} \otimes \sigma_x) \cos 2\tau - (\sigma_z \otimes \sigma_z) \sin 2\tau \quad (33)$$

$$(\mathbb{1} \otimes \sigma_y)(t) = U^\dagger(t)(\mathbb{1} \otimes \sigma_y)U(t) = \mathbb{1} \otimes \hat{\sigma}_y \quad (34)$$

$$(\mathbb{1} \otimes \sigma_z)(t) = U^\dagger(t)(\mathbb{1} \otimes \sigma_z)U(t) = (\mathbb{1} \otimes \sigma_z) \cos 2\tau + (\sigma_z \otimes \sigma_x) \sin 2\tau \quad (35)$$

上面的三个结果可以帮助我们设定仪器的初态. 例如, 可以分以下三种情况讨论.

1. 设仪器的初态是  $|\varphi\rangle = |0\rangle$ , 即  $\sigma_z$  的本征态. 系统的初态依旧是  $|\psi\rangle = c_0 |0\rangle + c_1 |1\rangle$ . 根据 (33)–(35) 式, 计算  $t$  时刻仪器力学量的期望值.

$$\langle \mathbb{1} \otimes \sigma_x \rangle(t) = \langle 0 | \sigma_x | 0 \rangle \cos 2\tau - \langle \psi | \sigma_z | \psi \rangle \langle 0 | \sigma_z | 0 \rangle \sin 2\tau = -\langle \psi | \sigma_z | \psi \rangle \sin 2\tau$$

$$\langle \mathbb{1} \otimes \sigma_y \rangle(t) = \langle 0 | \sigma_y | 0 \rangle = 0$$

$$\langle \mathbb{1} \otimes \sigma_z \rangle(t) = \langle 0 | \sigma_z | 0 \rangle \cos 2\tau + \langle \psi | \sigma_z | \psi \rangle \langle 0 | \sigma_x | 0 \rangle \sin 2\tau = \cos 2\tau$$

如果在  $t$  时刻我们得到了仪器的力学量  $\sigma_x^M$  的期望值, 那么根据上面的第一个方程就可以知道系统的被测力学量  $\sigma_z^S$  在初态  $|\psi\rangle$  中的期望值, 即

$$\langle \psi | \sigma_z | \psi \rangle = -\frac{\langle \mathbb{1} \otimes \sigma_x \rangle(t)}{\sin 2\tau} \quad (36)$$

而仪器的  $\sigma_y^M$  和  $\sigma_z^M$  在  $t$  时刻的期望值则不能提供关于  $\langle \psi | \sigma_z | \psi \rangle$  的任何信息.

2. 设仪器的初态是  $|\varphi\rangle = |x+\rangle$ , 即  $\sigma_x$  的本征态, 类似的计算给出

$$\langle \mathbb{1} \otimes \sigma_x \rangle(t) = \cos 2\tau$$

$$\langle \mathbb{1} \otimes \sigma_y \rangle(t) = 0$$

$$\langle \mathbb{1} \otimes \sigma_z \rangle(t) = \langle \psi | \sigma_z | \psi \rangle \sin 2\tau$$

只有仪器的  $\sigma_z^M$  是有用的,

$$\langle \psi | \sigma_z | \psi \rangle = \frac{\langle \mathbb{1} \otimes \sigma_z \rangle(t)}{\sin 2\tau} \quad (37)$$

3. 设仪器的初态是  $|\varphi\rangle = |y+\rangle$ , 即  $\sigma_y$  的本征态, 对此, 我们有

$$\langle \mathbb{1} \otimes \sigma_x \rangle(t) = \langle \mathbb{1} \otimes \sigma_z \rangle(t) = 0, \quad \langle \mathbb{1} \otimes \sigma_y \rangle(t) = 1$$

从仪器身上看不到关于被测系统的任何信息.

通过以上讨论, 我们大体上知道了如何设定仪器的初态. 概括地说, 如果系统和仪器的相互作用具有  $\sigma_z \otimes \sigma_y$  的形式, 那么我们需要将仪器的初态选择为与  $\sigma_y^M$  互补的力学量 (比如  $\sigma_x^M$  或  $\sigma_z^M$ ) 的本征向量. 然后, 相互作用之后的仪器的第三个互补力学量的期望值可以反映被测力学量在系统的初态中的期望值.<sup>2</sup>

现在, 设系统的初态是

$$|\psi\rangle = c_0 |0\rangle + c_1 |1\rangle$$

这里, 为了计算简单, 设  $c_0$  和  $c_1$  为正实数.

$M$  的初态设为  $|\varphi\rangle = |x+\rangle$ . 二者共同的初态是  $|\Psi(0)\rangle = |\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle$ , 演化的结果是

$$\begin{aligned} |\Psi(\tau)\rangle &= U(\tau) |\Psi(0)\rangle \\ &= c_0 |0\rangle \otimes |\tilde{\varphi}_0\rangle + c_1 |1\rangle \otimes |\tilde{\varphi}_1\rangle \end{aligned} \quad (38)$$

$$|\tilde{\varphi}_0\rangle = \cos\left(\frac{\pi}{4} - \tau\right) |0\rangle + \sin\left(\frac{\pi}{4} - \tau\right) |1\rangle \quad (39)$$

$$|\tilde{\varphi}_1\rangle = \sin\left(\frac{\pi}{4} - \tau\right) |0\rangle + \cos\left(\frac{\pi}{4} - \tau\right) |1\rangle \quad (40)$$

或者,

$$\begin{aligned} |\Psi(\tau)\rangle &= \left[ c_0 \cos\left(\frac{\pi}{4} - \tau\right) |0\rangle + c_1 \sin\left(\frac{\pi}{4} - \tau\right) |1\rangle \right] \otimes |0\rangle \\ &\quad + \left[ c_0 \sin\left(\frac{\pi}{4} - \tau\right) |0\rangle + c_1 \cos\left(\frac{\pi}{4} - \tau\right) |1\rangle \right] \otimes |1\rangle \end{aligned} \quad (41)$$

在 (41) 中, 如果选择  $\tau$  使得  $\tau = \frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4}, \dots$ , 那么在那些时刻, 仪器的力学量  $\sigma_z^M$  的期望值可以很好地反映系统的被测力学量在系统的初态中的期望值, 二者至多相差一个负号. 而且, 在这些时刻, 在 (41) 式的叠加形式中  $Q$  的两个量子态是正交的. 例如, 当  $\tau = \frac{\pi}{4}$  的时候,

$$|\Psi\left(\frac{\pi}{4}\right)\rangle = c_0 |0\rangle |0\rangle + c_1 |1\rangle |1\rangle$$

<sup>2</sup>在有限的  $n$  维希尔伯特空间中, 两个力学量  $A$  和  $B$  的本征向量分别用  $|\alpha_i\rangle$  和  $|\beta_j\rangle$  表示, 如果对于任意的  $i$  和  $j$ , 总是有  $|\langle \alpha_i | \beta_j \rangle| = \frac{1}{\sqrt{n}}$ , 那么这两个力学量就是互补力学量. 在  $\mathbb{C}^n$  中, 总是存在至少三个彼此互补的力学量.

这正是我们希望达到的理想测量的效果.

当  $gt$  不等于  $\frac{\pi}{4}$  的奇数倍的时候, 测量结果是不理想的. 这表现在两个方面. 一个是,  $t$  时刻仪器的  $\sigma_z^M$  期望值需要经过修正 (即乘以因子  $(\sin 2gt)^{-1}$ ) 才能给出系统的  $\sigma_z^Q$  在初态中的期望值; 另一个是, 这种情况下 (38) 式中的  $|\tilde{\varphi}_0\rangle$  和  $|\tilde{\varphi}_1\rangle$  不是正交的, 它们中的每一个都会对  $\sigma_z^M$  的取值  $+1$  (或  $-1$ ) 给出贡献. 仪器的  $\sigma_z^M$  取值  $\pm 1$  的几率可以根据 (41) 式计算, 它们是

$$P(\sigma_z^M = +1) = \frac{1}{2}[1 + (c_0^2 - c_1^2) \sin 2\tau] \quad (42)$$

$$P(\sigma_z^M = -1) = \frac{1}{2}[1 - (c_0^2 - c_1^2) \sin 2\tau] \quad (43)$$

这两个几率并不等于  $|c_0|^2$  和  $|c_1|^2$ .

另一方面, 当  $\tau = gt$  等于  $\frac{\pi}{4}$  的偶数倍的时候, 即  $\tau = \frac{\pi}{2}, \pi, \dots$ , (37) 式的分母为零. 为了解释这个矛盾, 注意到当  $\tau$  等于  $\frac{\pi}{4}$  的偶数倍的时候, 例如当  $\tau = \frac{\pi}{2}$  时,  $|\Psi(t)\rangle$  等于  $(c_0|0\rangle - c_1|1\rangle) \otimes |x-\rangle$ , 这是一个直积态, (37) 式的分子等于  $\langle x-|\sigma_z|x-\rangle = 0$ . 对这个  $\frac{0}{0}$  的未定式的理解是, 此时系统和仪器之间没有任何关联, 我们不可能通过对仪器的观测来推知系统的任何信息.

在  $t$  时刻的整体量子态  $|\Psi(\tau)\rangle$  中, 在  $\mathcal{H}^M$  上求迹, 有

$$\rho^Q(t) = \begin{pmatrix} |c_0|^2 & c_0 c_1^* \cos 2\tau \\ c_0^* c_1 \cos 2\tau & |c_1|^2 \end{pmatrix} \quad (44)$$

当  $\tau$  等于  $\frac{\pi}{4}$  的奇数倍的时候, 系统的密度算符  $\rho^S(t)$  是对角的, 非对角项的消失意味着相干性的消失. 可见, 理想测量的过程就是彻底破坏初态中的相干性, 使得测量过程结束后系统的态是一个具有经典意味的混合态, 即  $|c_0|^2 |0\rangle\langle 0| + |c_1|^2 |1\rangle\langle 1|$ .