§ 复合系统的描述

一个物理系统由 A 和 B 两部分组成，A 由 H_A，B 由 H_B 描述，H_A 与 H_B 指两个 Hilbert space，那么整个系统的 Hilbert space 记为：$H = H_A \otimes H_B$.

$\otimes$ 表示 tensor product.

- 例如：A 是个 $S=\frac{1}{2}$ 的粒子，B 是个 $S=1$ 的粒子.

  H_A 由基矢 $|+,z\rangle, |-,z\rangle$ 张开，$|+z\rangle$ 记为 $|0\rangle_A$，$|-z\rangle$ 记为 $|1\rangle_A$

  H_B 由基矢 $|+,z\rangle, |0,z\rangle, |-,z\rangle$ 张开，分别记为 $|0\rangle_B, |1\rangle_B, |2\rangle_B$.

  那么 $H_A \otimes H_B$ 由 $|i\rangle_A \otimes |j\rangle_B$，$i=0,1$；$j=0,1,2$ 张开.

  $|i\rangle_A \otimes |j\rangle_B$ 可直接写为 $|i\rangle_A |j\rangle_B$.

- 又如：我们熟悉的例子：两个自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子，其 Hilbert 空间可以由非耦合基矢表示：$\alpha_A\alpha_B$，$\alpha_A\beta_B$，$\beta_A\alpha_B$，$\beta_A\beta_B$

- H_A 的维度为 D_A，H_B 的维数为 D_B，则 $H_A \otimes H_B$ 的维度 $D_A \cdot D_B$

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} c_{ij} |i\rangle_A \otimes |j\rangle_B$$

- 内积

$$\langle i|_A \langle j|_B \cdot |q\rangle_B |p\rangle_A \equiv {}_B\langle j|q\rangle_B \cdot {}_A\langle i|p\rangle_B = \delta_{ip}\delta_{jq}$$

例 自旋单态 $\chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+z\rangle_A \otimes |-z\rangle_B - |-z\rangle_A \otimes |+z\rangle_B\right)$

☆ A 处于 $|u\rangle_A$，B 处于 $|v\rangle_B$ 则 $\underline{|u\rangle_A \otimes |v\rangle_B} \in H_A \otimes H_B$ $\longrightarrow$ 直积态

但是：$\underline{\chi_{00} \text{ 不能写成 } |u\rangle_A \otimes |v\rangle_B \text{ 的形式}}$ $\longrightarrow$ entangled

N 个粒子复合：$H = H_1 \otimes H_2 \otimes \cdots \otimes H_N$，$D = D_1 \times D_2 \times \cdots \times D_N$

§ 约化密度算符 (reduced density operator)

考虑 $H_A \otimes H_B$ 空间一个 pure ensemble of $|\psi\rangle = \sum_{ij} C_{ij} |i\rangle_A |j\rangle_B$

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_{ii'jj'} C_{ij} C^*_{i'j'} \, |i\rangle_A |j\rangle_B \, {}_B\langle j'| \, {}_A\langle i'|$$

我们想测量 Q_A (A粒子的Q力学量)

在 $H = H_A \otimes H_B$ space Q_A 的算符应该是 $Q \otimes I$,

其中Q作用在 H_A space, I 是 H_B 中单位算符.

$$\boxed{(Q \times I) \, |i\rangle_A \otimes |j\rangle_B = (Q|i\rangle_A) \otimes (I|j\rangle_B)}$$

- 在给定表象中,可写成矩阵"直乘",例

$A \otimes B = ?$ $\quad A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$, $B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{pmatrix}$

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B \\ a_{21}B & a_{22}B \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} & a_{11}b_{13} & & & \\ a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} & a_{11}b_{23} & & a_{12}B & \\ a_{11}b_{31} & a_{11}b_{32} & a_{11}b_{33} & & & \\ a_{21}b_{11} & a_{21}b_{12} & a_{21}b_{13} & & a_{22}B & \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{21}b_{23} & & & \\ a_{21}b_{31} & a_{21}b_{32} & a_{21}b_{33} & & & \end{bmatrix}$$

$$[Q_A] = \mathrm{Tr}(\rho Q_A) = \sum_{ij} {}_A\langle i| \, {}_B\langle j| \, \rho (Q \otimes I) \, |j\rangle_B |i\rangle_A$$

$$= \sum_{ij} {}_B\langle j| \, {}_A\langle i| \, \rho \cdot (Q|i\rangle_A) |j\rangle_B = \sum_{ij} {}_A\langle i| \, {}_B\langle j| \rho |j\rangle_B \cdot (Q|i\rangle_A$$

$= \mathrm{Tr}_B(\rho) \leftarrow$ P分迹

定义 $\rho_A = \sum_j {}_B\langle j| \rho |j\rangle_B$, 此为 reduced density operator of A.

$$[Q_A] = \sum_i {}_A\langle i| \rho_A O |i\rangle_A = \mathrm{Tr}_A(\rho_A O)$$

具体计算. $\rho_A = \sum_j {}_B\langle j|\rho|j\rangle_B$

$$= \sum_{ii'} \rho^A_{ii'} |i\rangle_A {}_A\langle i'|,$$

其中 $\rho^A_{ii'} = \sum_j c_{ij} c^*_{i'j}$

- $Tr_A \rho_A = \sum_{ij} c_{ij} c^*_{ij} = 1$ 归一化满足.

例子. $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_A |1\rangle_B + |1\rangle_A |0\rangle_B)$

$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ ($|i\rangle_B |j\rangle_A {}_A\langle p| {}_B\langle q|$ 可写为 $\underbrace{|j\rangle_A\langle p|}_{H_A \text{ space 算符}} \otimes \underbrace{|i\rangle_B\langle q|}_{H_B \text{ space 算符}}$)

$$= \frac{1}{2}\left[|0\rangle_A|1\rangle_B\, {}_B\langle 1|\, {}_A\langle 0| + |0\rangle_A|1\rangle_B\, {}_B\langle 0|\, {}_A\langle 1| + |1\rangle_A|0\rangle_B\, {}_B\langle 1|\, {}_A\langle 0| + |1\rangle_A|0\rangle_B\, {}_B\langle 0|\, {}_A\langle 1|\right]$$

$$= \frac{1}{2}\left[|0\rangle_A\langle 0| \otimes |1\rangle_B\langle 1| + |0\rangle_A\langle 1| \otimes |1\rangle_B\langle 0| + |1\rangle_A\langle 0| \otimes |0\rangle_B\langle 1| + |1\rangle_A\langle 1| \otimes |0\rangle_B\langle 0|\right]$$

$$\rho_A = \frac{1}{2}|0\rangle_A\langle 0| + \frac{1}{2}|1\rangle_A\langle 1| = \frac{1}{2} I$$

☆ 这是一个混合系综! 纯态系统的子系统处于混合态

- $S = -(\frac{1}{2}\ln\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\ln\frac{1}{2}) = \ln 2$
- $\rho_A^2 = \frac{1}{4}|0\rangle_A\langle 0| + \frac{1}{4}|1\rangle_A\langle 1| \neq \rho_A$

如果 $|\alpha\rangle = |0\rangle_A|1\rangle_B$, 则 $\rho = |\alpha\rangle\langle\alpha| = |0\rangle_A|1\rangle_B\, {}_B\langle 1|\, {}_A\langle 0|$

$$= |0\rangle_A\langle 0| \otimes |1\rangle_B\langle 1|$$

$\rho_A = Tr_B(\rho) = |0\rangle_A\langle 0|$ 仍然是纯态系综.

- $S = 0$ $\cdot$ $\rho_A^2 = \rho_A$

☆ 一般地 $|\alpha\rangle = |\psi\rangle_A \otimes |\phi\rangle_B$, $\rho = |\psi\rangle_A|\phi\rangle_B\, {}_B\langle\phi|\, {}_A\langle\psi|$

$$= |\psi\rangle_A\langle\psi| \otimes |\phi\rangle_B\langle\phi|$$

$\rho_A = |\psi\rangle_A\langle\psi|$, $\rho_B = |\phi\rangle_B\langle\phi|$ $\therefore$ $\rho = \rho_A \otimes \rho_B$ 可分解.

☆ ρ_A 对应的 $S_A = -Tr_A(\rho_A \ln \rho_A)$ 称为纠缠熵.

可分直积态与纠缠态!

如果一个系统A处于混合态，我们总可以设想它与一个系统F纠缠.
(F 是 Fictitious 的意思).

设 $\rho_A = \sum_k \lambda_k |\phi_k\rangle\langle\phi_k|$ （$|\phi_k\rangle$ 是某个表象的基矢）.

令 $|\alpha\rangle_{AF} = \sum_k \sqrt{\lambda_k}\, |\phi_k\rangle_A |k\rangle_F$

其中$\{|k\rangle_F\}$ 是 F 的一组正交基.

显然 $\rho_A = Tr_F\left(|\alpha\rangle_{AF}\langle\alpha|\right)$

$$= \sum_{k''} {}_F\langle k''| \sum_{kk'} \sqrt{\lambda_k}\cdot\sqrt{\lambda_{k'}}\ |\phi_k\rangle_A |k\rangle_F\ {}_F\langle k'|\ {}_A\langle\phi_{k'}| \cdot |k''\rangle_F$$

$$= \sum_{k''} \lambda_{k''}\, |\phi_{k''}\rangle_{A\,A}\langle\phi_{k''}|$$

反过来：Schmidt decomposition 定理

设 A+B 系统处于纯态 $|\alpha\rangle$，存在正交态$\{|i\rangle_A\}$，正交态$\{|i\rangle_B\}$

使得 $|\alpha\rangle = \sum_i \sqrt{\lambda_i}\, |i\rangle_A |i\rangle_B$，其中 λ_i 是非负实数，

满足 $\sum_i \lambda_i = 1$.

证明: $|\alpha\rangle = \sum_{j,k} C_{jk}\, |j\rangle_A |k\rangle_B$，（假设 $D_A = D_B$. 一般情况可证）

C_{jk} 是复矩阵 C 的矩阵元. 利用

奇异值分解 (singular value decomposition) $C = UdV$，其中

d 是对角矩阵，$\boxed{\text{非负}}$. U与V幺正.

$$|\alpha\rangle = \sum_{ijk} U_{ji}\, d_{ii}\, V_{ik}\, |j\rangle_A |k\rangle_B$$

定义 $|i\rangle_A \equiv \sum_j u_{ji}|j\rangle_A$， $|i\rangle_B \equiv \sum_k v_{ik}|k\rangle_B$，$\sqrt{\lambda_i} \equiv d_{ii}$

于是 $|\alpha\rangle = \sum_i \sqrt{\lambda_i}\,|i_A\rangle|i_B\rangle$

又：${}_A\langle i'|i\rangle_A = \sum_{jj'} {}_A\langle j'|u^*_{j'i'}u_{ji}|j\rangle_A = \sum_j u^*_{ji'}u_{ji}$

$= \delta_{ii'}$

• 物理理解：$|\alpha\rangle = \sum_i \sqrt{\lambda_i}\,|i\rangle_A|i\rangle_B$

（或者写为 $|\alpha\rangle = \sum_i \sqrt{\lambda_i}\,|\phi_i\rangle_A|i\rangle_B$）

我们来测量某个B系统的力学量 O_B，$\{|i\rangle_B\}$ 是O的本征态集。测得 O_i，B系统塌缩到 $|i\rangle_B$，A系统塌缩到 $|\phi_i\rangle_A$，这个事件发生的几率 λ_i。ρ_A 的对角表示可理解为由对B的特殊测量得到。

例1：现有一个混合系综 $\rho_A = \frac{1}{3}|0\rangle\langle 0| + \frac{2}{3}|1\rangle\langle 1|$，$D_A = 2$.

构造 $|\alpha\rangle_{AF} = \sqrt{\frac{1}{3}}|0\rangle_A|0\rangle_F + \sqrt{\frac{2}{3}}|1\rangle_A|1\rangle_F$， $\rho_A = Tr_F\,\rho$

在B系统测 S_x：本征矢 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \pm |1\rangle) = |\pm x\rangle$

$|\alpha\rangle_{AF} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{1}{3}}|0\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|1\rangle\right)_A \cdot |+x\rangle_F + \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{1}{3}}|0\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|1\rangle\right)_A \cdot |-x\rangle_F$

$\frac{1}{2}$ 几率，$A \to \sqrt{\frac{1}{3}}|0\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|1\rangle$， $\frac{1}{2}$ 几率 $A \to \sqrt{\frac{1}{3}}|0\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|1\rangle$， ρ_A 不变！

例2： $|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|0\rangle_A|0\rangle_B + |0\rangle_A|1\rangle_B + |1\rangle_A|1\rangle_B)$， $D_A = D_B = 2$.

应该可以写为 $|\alpha\rangle = \sum_{i=0}^{1} \sqrt{\lambda_i}\,|\phi_i\rangle_A|\psi_i\rangle_B$

$\boxed{\rho_A = \sum_i \lambda_i |\phi_i\rangle_A\langle\phi_i|, \quad \rho_B = \sum_i \lambda_i |\psi_i\rangle_B\langle\psi_i|}$ $\Rightarrow$ 本征值相同

硬算 $\rho_A = \frac{2}{3}|0\rangle_A\langle 0| + \frac{1}{3}|1\rangle_A\langle 1| + \frac{1}{3}|0\rangle_A\langle 1| + \frac{1}{3}|1\rangle_A\langle 0|$

$\rho_B = \frac{1}{3}|0\rangle_B\langle 0| + \frac{2}{3}|1\rangle_B\langle 1| + \frac{1}{3}|0\rangle_B\langle 1| + \frac{1}{3}|1\rangle_B\langle 0|$

$Tr(\rho_A^2) = \frac{7}{9} = Tr(\rho_B^2)$

$$\rho_A = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}$$

求解本征方程：$\begin{pmatrix} \frac{2}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \lambda_i \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$

解出，$\lambda_{0,1} = \frac{3 \pm \sqrt{5}}{6}$，

$$|\phi_{0,1}\rangle = C.\left(|0\rangle + (3\lambda_{0,1} - 2)|1\rangle\right)$$

C 为归一化因子.

以 $|\phi_0\rangle$、$|\phi_1\rangle$ 为基矢.

$$\rho_A = \begin{pmatrix} \lambda_0 & 0 \\ 0 & \lambda_1 \end{pmatrix}. \quad \mathrm{Tr}\,\rho_A^2 = \lambda_0^2 + \lambda_1^2 = \frac{7}{9}.$$

ρ_B 的情况类似