第9讲

§ 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：$H = H_A \otimes H_B$. 也称直积空间.

$\otimes$ 表示 tensor product（张量积）

- 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 $|i\rangle_A |j\rangle_B$. 共 $2\times3=6$ 个基矢.

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

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

4个Bell基

- 内积

$${}_A\langle i| {}_B\langle p| \cdot |q\rangle_B |j\rangle_A \equiv {}_B\langle p|q\rangle_B \cdot {}_A\langle i|j\rangle_A = \delta_{ij}\,\delta_{pq}$$

分别作，后相乘.

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

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

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

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粒子的力学量 Q

在 $H=H_A\otimes H_B$ space，Q_A 的算符是 $Q\otimes I$

其中 Q 作用在 H_A space 中矢量，I 是 H_B 中单位算符，作用在 H_B 中

$$(Q\otimes I)\,|i\rangle_A\otimes|j\rangle_B=Q|i\rangle_A\otimes I|j\rangle_B$$

我们来计算 Q_A 的期望值：

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

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

引定义 $\rho_A\equiv\sum_j{}_B\langle j|\rho|j\rangle_B=\mathrm{Tr}_B\,\rho$ ← 部分迹

此即为约化密度算符 of A.

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

经典对应：联合几率分布 $P(X_A,X_B)$

只关心 X_A 的分布，$P_A(X_A)=\sum_{X_B}P(X_A,X_B)$

$[Q_A]=\int dX_A\,dX_B\,Q_A P(X_A,X_B)$

$=\int dX_A\,P_A(X_A)Q_A(X_A)$

- $H_A\otimes H_B$ 中的混态系综

以 W_k 几率处于 $|\psi^{(k)}\rangle$，$\rho=\sum_k W_k|\psi^{(k)}\rangle\langle\psi^{(k)}|$

$|\psi^{(k)}\rangle=\sum_{ij}C^{(k)}_{ij}|i\rangle_A|j\rangle_B$，$\quad=\sum_k W_k\sum_{ii'jj'}C^{(k)}_{ij}C^{(k)*}_{i'j'}|i\rangle_A|j\rangle_B\,{}_B\langle j'|\,{}_A\langle i'|$

具体计算. 以纯态为例

$$\rho_A = \sum_j {}_B\langle j|\rho|j\rangle_B = \sum_j {}_B\langle j| \sum_{ii'kk'} c_{ik}c^*_{i'k'} |i\rangle_A |k\rangle_B {}_B\langle k'| {}_A\langle i'| |j\rangle_B$$

$$\boxed{\rho=\sum_{ij}\rho_{ij}|i\rangle\langle j|}$$

$$= \sum_{ii'} \rho^A_{ii'} |i\rangle_A {}_A\langle i'|, \quad = \sum_{ii'}\left(\sum_j c_{ij}c^*_{i'j}\right)|i\rangle_A {}_A\langle i'|$$

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

• $Tr_A \rho_A = \sum_{ij} c_{ij}c^*_{ij} = 1$ 归一化仍满足.

一般的混合态: $\boxed{\rho^A_{ii'} = \sum_k W_k \left[\sum_j c^{(k)}_{ij} c^{(k)*}_{i'j}\right]}$ $\boxed{\text{同样有 } Tr_A\rho_A=1}$

例子. $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt2}(|0\rangle_A|1\rangle_B + |1\rangle_A|0\rangle_B)$ ← 三重态中 χ_{10}, Qubit

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

$$= \frac12\left[|0\rangle_A|1\rangle_B {}_B\langle1|{}_A\langle0| + |0\rangle_A|1\rangle_B {}_B\langle0|{}_A\langle1| + |1\rangle_A|0\rangle_B {}_B\langle1|{}_A\langle0| + |1\rangle_A|0\rangle_B {}_B\langle0|{}_A\langle1|\right]$$

$$= \frac12\left[|0\rangle_A\langle0|\otimes|1\rangle_B\langle1| + |0\rangle_A\langle1|\otimes|1\rangle_B\langle0| + |1\rangle_A\langle0|\otimes|0\rangle_B\langle1| + |1\rangle_A\langle1|\otimes|0\rangle_B\langle0|\right]$$

这样写容易看清楚

$\rho_A = \frac12|0\rangle_A\langle0| + \frac12|1\rangle_A\langle1| = \frac12 I$

☆ 这是一个混合系综! $\boxed{\text{纯态系统的子系统可以处于混合态}}$

• $S = -(\frac12\ln\frac12 + \frac12\ln\frac12) = \ln2$

• $\rho_A^2 = \frac14|0\rangle_A\langle0| + \frac14|1\rangle_A\langle1| \neq \rho_A$

公式: $\rho^A_{00} = c_{00}c^*_{00} + c_{01}c^*_{01} = \frac12$

$\rho^A_{01} = c_{00}c^*_{10} + c_{01}c^*_{11} = 0 = \rho^A_{10}$

$\rho^A_{11} = c_{10}c^*_{10} + c_{11}c^*_{11} = \frac12$.

如果 $|\alpha\rangle = |0\rangle_A|1\rangle_B$, 则 $\rho = |\alpha\rangle\langle\alpha| = |0\rangle_A|1\rangle_B {}_B\langle1|{}_A\langle0|$

$= |0\rangle_A\langle0| \otimes |1\rangle_B\langle1|$

$\rho_A = Tr_B(\rho) = |0\rangle_A\langle0|$ 仍然是纯态系综.

• $S=0$ • $\rho_A^2 = \rho_A$

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

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

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

直积态!

ρ_A 对应的 $S_A = -\mathrm{Tr}_A(\rho_A \ln \rho_A)$ 称为纠缠熵 entanglement entropy

来自于纠缠！

→区分直积态与纠缠态：有时看不清能否写成直积态、

- 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，整体处于纯态 $|\alpha\rangle_{AF}$.

设 $\rho_A = \sum_k \lambda_k |\phi_k\rangle\langle\phi_k|$，$|\phi_k\rangle$ 是 ρ_A 本征态，$\sum_k \lambda_k = 1$.

令 $|\alpha\rangle_{AF} = \sum_k \sqrt{\lambda_k}\, |\phi_k\rangle_A |k\rangle_F$，其中 $\{|k\rangle_F\}$ 是F的一组正交完备基，$D_F = D_A$

显然 $\rho_A = \mathrm{Tr}_F\left(|\alpha\rangle_{AF}\, {}_{AF}\langle\alpha|\right)$

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

$$= \sum_{k'} \lambda_{k'}\ |\phi_{k'}\rangle_A\, {}_A\langle\phi_{k'}|$$

- 反过来：schmidt decomposition 定理

设A+B系统处于纯态 $|\alpha\rangle$，则存在正交归一态 $\{|\phi_i\rangle_A\}$ 与 $\{|i\rangle_B\}$

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

满足 $\sum_i \lambda_i = 1$.

什么意思？：设 $|i\rangle_B$ 是 O_B 的本征态．$O_B|i\rangle_B = O_i|i\rangle_B$.

测量 O_B，B系统塌缩到 $|i\rangle_B$，同时A系统塌缩到 $|\phi_i\rangle_A$，

此事件发生几率为 λ_i，

$\rho_A = \sum_k \lambda_k |\phi_k\rangle_A\, {}_A\langle\phi_k|$.

Schmidt分解的证明，第二种方法：（也可用奇异值分解证明）.

证：对于给定$|\alpha\rangle$，我们~~推导~~计算 $\rho_A = Tr_B(|\alpha\rangle\langle\alpha|)$

然后找到其本征值 $\lambda_i,\ i=1,\cdots,D_A$ 和对应本征矢 $|\phi_i\rangle_A$.

$$|\alpha\rangle = \left[\sum_i |\phi_i\rangle_{A\,A}\langle\phi_i|\right]\cdot|\alpha\rangle = \sum_i {}_A\langle\phi_i|\alpha\rangle\cdot|\phi_i\rangle_A$$

其中 $${}_A\langle\phi_i|\alpha\rangle = {}_A\langle\phi_i|\cdot\Big(\sum_{ij} c_{ij}\,|i\rangle_A|j\rangle_B\Big)$$

$$= \sum_j \Big[\sum_i c_{ij}\,{}_A\langle\phi_i|i\rangle_A\Big]\cdot|j\rangle_B \equiv |\varphi_i\rangle_B$$

因此 $|\alpha\rangle = \sum_i |\phi_i\rangle_A|\varphi_i\rangle_B$，下面证明 $|\varphi_i\rangle_B$ 彼此正交

$$\rho = \sum_{ij} |\phi_i\rangle_A|\varphi_i\rangle_{B\,B}\langle\varphi_j|{}_A\langle\phi_j|$$

$$\rho_A = Tr_B\,\rho = \sum_{ij} |\phi_i\rangle_{A\,A}\langle\phi_j|\cdot\sum_k {}_B\langle k|\varphi_i\rangle_{B\,B}\langle\varphi_j|k\rangle_B$$

$$= \sum_{ij} |\phi_i\rangle_{A\,A}\langle\phi_j|\cdot{}_B\langle\varphi_j|\varphi_i\rangle_B \overset{\text{应该}}{=} \sum_k \lambda_k|\phi_k\rangle\langle\phi_k|$$

由于 $|\phi_i\rangle_A$ 是ρ_A的本征矢，所以 ${}_B\langle\varphi_j|\varphi_i\rangle_B = \delta_{ij}\,\lambda_i$

~~令~~ $\cancel{{}_B\langle\varphi_j|\varphi_i\rangle_B = {}_B\langle\varphi_i|\varphi_i\rangle_B\,\delta_{ij} \neq \lambda_i\,\delta_{ij}}$

定义 $|\tilde\varphi_i\rangle_B = c\,|\varphi_i\rangle_B \Leftarrow$ 归一化 $\Rightarrow c = \frac{1}{\sqrt{\lambda_i}}$

$\boxed{\cancel{|\varphi_i\rangle_B = |\phi_i\rangle_A \quad \therefore \lambda_i = \lambda_i}}$

我们有：$|\alpha\rangle = \sum_i \sqrt{\lambda_i}\,|\phi_i\rangle_A\,|\tilde\varphi_i\rangle_B$

其中 $\{|\phi_i\rangle_A\}$ 与 $\{|\tilde\varphi_i\rangle_B\}$ 分别有H_A与H_B正交归一.

并且：$\lambda_i = \lambda_i$，是ρ_A的本征值.

易证 λ_i 也是ρ_B的本征值.

完