

# 量子力学 II 作业 6

姓名: 郑晓旻

学号: 202111030007

2025 年 4 月 17 日

## 问题 1

### 初始状态与纯化

系统 A 处于混合态, 其密度算符为:

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

引入维度为 3 的辅助系统 F (基矢为  $|0\rangle_F, |1\rangle_F, |2\rangle_F$ ), 构造复合系统 AF 的纯态  $|\alpha\rangle_{AF}$  作为  $\rho_A$  的纯化:

$$|\alpha\rangle_{AF} = \sqrt{\frac{1}{3}} |0\rangle_A |0\rangle_F + \sqrt{\frac{2}{3}} |1\rangle_A |1\rangle_F$$

我们可以验证  $\text{Tr}_F(|\alpha\rangle_{AF} \langle \alpha|) = \rho_A$ 。

### 测量算符 Q 及其本征态

在系统 F 上测量力学量 Q, 其归一化的本征态为:

$$\begin{aligned} |q_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle_F + |2\rangle_F) \\ |q_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} (|0\rangle_F + |1\rangle_F - |2\rangle_F) \\ |q_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} (|0\rangle_F - 2|1\rangle_F - |2\rangle_F) \end{aligned}$$

这些构成了系统 F 的一组新的标准正交基。

### 测量过程与状态塌缩

根据投影测量假设, 将复合系统状态  $|\alpha\rangle_{AF}$  投影到 Q 的各个本征态所张成的子空间上。

**投影到  $|q_1\rangle$**

投影算符  $\Pi_1 = I_A \otimes |q_1\rangle_F \langle q_1|$ 。投影后的（未归一化）状态：

$$|\psi'_1\rangle = \Pi_1 |\alpha\rangle_{AF} = |q_1\rangle_F \left( \sqrt{\frac{1}{3}} |0\rangle_A \langle q_1|0\rangle_F + \sqrt{\frac{2}{3}} |1\rangle_A \langle q_1|1\rangle_F \right)$$

计算内积：

$$\langle q_1|0\rangle_F = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \langle q_1|1\rangle_F = 0$$

因此：

$$|\psi'_1\rangle = |q_1\rangle_F \left( \sqrt{\frac{1}{3}} |0\rangle_A \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \right) = \sqrt{\frac{1}{6}} |0\rangle_A |q_1\rangle_F$$

测得  $q_1$  的概率：

$$P_1 = \langle \psi'_1 | \psi'_1 \rangle = \left( \sqrt{\frac{1}{6}} \right)^2 = \frac{1}{6}$$

测量后系统 A 的状态（归一化后）： $|0\rangle_A$ 。

**投影到  $|q_2\rangle$**

投影算符  $\Pi_2 = I_A \otimes |q_2\rangle_F \langle q_2|$ 。投影后的（未归一化）状态：

$$|\psi'_2\rangle = |q_2\rangle_F \left( \sqrt{\frac{1}{3}} |0\rangle_A \langle q_2|0\rangle_F + \sqrt{\frac{2}{3}} |1\rangle_A \langle q_2|1\rangle_F \right)$$

计算内积：

$$\langle q_2|0\rangle_F = \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad \langle q_2|1\rangle_F = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

因此：

$$|\psi'_2\rangle = |q_2\rangle_F \left( \sqrt{\frac{1}{3}} |0\rangle_A \cdot \frac{1}{\sqrt{3}} + \sqrt{\frac{2}{3}} |1\rangle_A \cdot \frac{1}{\sqrt{3}} \right) = \frac{1}{3} (|0\rangle_A + \sqrt{2} |1\rangle_A) |q_2\rangle_F$$

测得  $q_2$  的概率：

$$P_2 = \langle \psi'_2 | \psi'_2 \rangle = \left( \frac{1}{3} \right)^2 \| |0\rangle_A + \sqrt{2} |1\rangle_A \|^2 = \frac{1}{9} (1^2 + (\sqrt{2})^2) = \frac{3}{9} = \frac{1}{3}$$

测量后系统 A 的状态（归一化后）： $\frac{1}{\sqrt{3}} (|0\rangle_A + \sqrt{2} |1\rangle_A)$ 。

**投影到  $|q_3\rangle$**

投影算符  $\Pi_3 = I_A \otimes |q_3\rangle_F \langle q_3|$ 。投影后的（未归一化）状态：

$$|\psi'_3\rangle = |q_3\rangle_F \left( \sqrt{\frac{1}{3}} |0\rangle_A \langle q_3|0\rangle_F + \sqrt{\frac{2}{3}} |1\rangle_A \langle q_3|1\rangle_F \right)$$

计算内积：

$$\langle q_3|0\rangle_F = \frac{1}{\sqrt{6}}, \quad \langle q_3|1\rangle_F = -\frac{2}{\sqrt{6}}$$

因此：

$$|\psi'_3\rangle = |q_3\rangle_F \left( \sqrt{\frac{1}{3}}|0\rangle_A \cdot \frac{1}{\sqrt{6}} + \sqrt{\frac{2}{3}}|1\rangle_A \cdot \left(-\frac{2}{\sqrt{6}}\right) \right) = \frac{1}{3\sqrt{2}}(|0\rangle_A - 2\sqrt{2}|1\rangle_A) |q_3\rangle_F$$

测得  $q_3$  的概率：

$$P_3 = \langle \psi'_3 | \psi'_3 \rangle = \left( \frac{1}{3\sqrt{2}} \right)^2 \| |0\rangle_A - 2\sqrt{2}|1\rangle_A \|^2 = \frac{1}{18}(1^2 + (-2\sqrt{2})^2) = \frac{1}{18}(1+8) = \frac{9}{18} = \frac{1}{2}$$

测量后系统 A 的状态（归一化后）： $\frac{1}{3}(|0\rangle_A - 2\sqrt{2}|1\rangle_A)$ 。

## 结果

测量力学量 Q 后，系统 A 可能塌缩到的状态及其概率如下：

- 状态 1:  $|0\rangle_A$   
概率:  $P_1 = \frac{1}{6}$
- 状态 2:  $\frac{1}{\sqrt{3}}(|0\rangle_A + \sqrt{2}|1\rangle_A)$   
概率:  $P_2 = \frac{1}{3}$
- 状态 3:  $\frac{1}{3}(|0\rangle_A - 2\sqrt{2}|1\rangle_A)$   
概率:  $P_3 = \frac{1}{2}$

总概率  $P_1 + P_2 + P_3 = \frac{1}{6} + \frac{1}{3} + \frac{1}{2} = 1$ ，结果自洽。

## 问题 2

### 系统哈密顿量及其本征态

系统由两个自旋 1/2 粒子构成，哈密顿量为海森堡相互作用形式：

$$H = \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y} + S_{1z}S_{2z}$$

其中  $\mathbf{S}_1$  和  $\mathbf{S}_2$  分别是两个粒子的自旋算符。引入总自旋算符  $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$ 。其平方为：

$$\mathbf{S}^2 = (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2 = \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$$

对于自旋 1/2 粒子， $\mathbf{S}_i^2 = s_i(s_i+1)\hbar^2$ 。本题取  $\hbar = 1$ ，所以  $s_i = 1/2$ ， $\mathbf{S}_i^2 = \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1) = \frac{3}{4}$ 。因此，哈密顿量可以表示为：

$$H = \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \frac{1}{2}(\mathbf{S}^2 - \mathbf{S}_1^2 - \mathbf{S}_2^2) = \frac{1}{2} \left( \mathbf{S}^2 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4} \right) = \frac{1}{2} \left( \mathbf{S}^2 - \frac{3}{2} \right)$$

总自旋量子数  $S$  可以取 1 (三重态) 或 0 (单重态)。

- **单重态 (Singlet state):**  $S = 0$ ,  $\mathbf{S}^2 = 0$ 。能量本征值为:

$$E_s = \frac{1}{2} \left( 0 - \frac{3}{2} \right) = -\frac{3}{4}$$

该态用  $|s\rangle$  或  $|0, 0\rangle$  表示。

- **三重态 (Triplet states):**  $S = 1$ ,  $\mathbf{S}^2 = 2$ 。能量本征值为:

$$E_t = \frac{1}{2} \left( 2 - \frac{3}{2} \right) = \frac{1}{4}$$

该能级是三重简并的, 对应磁量子数  $M = 1, 0, -1$ , 用  $|t_M\rangle$  或  $|1, M\rangle$  表示。

## 热平衡态密度矩阵

系统处于温度为  $T$  的热平衡状态, 其密度矩阵由正则系综给出:

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z}$$

其中  $\beta = 1/(k_B T)$  (这里令玻尔兹曼常数  $k_B = 1$ ) 是逆温度,  $Z$  是配分函数。配分函数为:

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta H}) = \sum_i e^{-\beta E_i} = e^{-\beta E_s} + 3e^{-\beta E_t} = e^{3\beta/4} + 3e^{-\beta/4}$$

在总自旋基  $\{|s\rangle, |t_1\rangle, |t_0\rangle, |t_{-1}\rangle\}$  下, 密度矩阵是对角的:

$$\rho = \frac{1}{Z} \left( e^{-\beta E_s} |s\rangle \langle s| + e^{-\beta E_t} \sum_{M=-1}^1 |t_M\rangle \langle t_M| \right)$$

$$\rho = \frac{1}{Z} (e^{3\beta/4} |s\rangle \langle s| + e^{-\beta/4} (|t_1\rangle \langle t_1| + |t_0\rangle \langle t_0| + |t_{-1}\rangle \langle t_{-1}|))$$

## 约化密度矩阵 $\rho_1$

计算粒子 1 的约化密度矩阵  $\rho_1 = \text{Tr}_2(\rho)$ 。由于哈密顿量  $H$  和热平衡态  $\rho$  具有旋转对称性, 约化密度矩阵  $\rho_1$  也必然具有旋转不变性。对于自旋 1/2 系统, 唯一具有旋转不变性的密度矩阵是单位矩阵  $I_1$  的倍数。

$$\rho_1 = C \cdot I_1$$

根据归一化条件  $\text{Tr}(\rho_1) = 1$ , 有  $\text{Tr}(C \cdot I_1) = C \cdot \text{Tr}(I_1) = C \cdot 2 = 1$ , 因此  $C = 1/2$ 。最终得到粒子 1 的约化密度矩阵为:

$$\rho_1 = \frac{1}{2} I_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

这表示粒子 1 处于完全无极化的混合态。

## 计算自旋分量的期望值

利用  $\rho_1$  计算粒子 1 自旋各分量的期望值  $\langle O_1 \rangle = \text{Tr}_1(\rho_1 O_1)$ 。使用  $\hbar = 1$  时的自旋算符  $S_x = \frac{1}{2}\sigma_x, S_y = \frac{1}{2}\sigma_y, S_z = \frac{1}{2}\sigma_z$ ，其中  $\sigma_i$  是泡利矩阵。

$$\begin{aligned} \bullet \quad \langle S_x(1) \rangle &= \text{Tr}_1(\rho_1 S_{1x}) = \text{Tr}_1\left(\frac{1}{2}I_1 \cdot \frac{1}{2}\sigma_x\right) = \frac{1}{4}\text{Tr}(\sigma_x) = \frac{1}{4}\text{Tr}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = 0 \\ \bullet \quad \langle S_y(1) \rangle &= \text{Tr}_1(\rho_1 S_{1y}) = \text{Tr}_1\left(\frac{1}{2}I_1 \cdot \frac{1}{2}\sigma_y\right) = \frac{1}{4}\text{Tr}(\sigma_y) = \frac{1}{4}\text{Tr}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = 0 \\ \bullet \quad \langle S_z(1) \rangle &= \text{Tr}_1(\rho_1 S_{1z}) = \text{Tr}_1\left(\frac{1}{2}I_1 \cdot \frac{1}{2}\sigma_z\right) = \frac{1}{4}\text{Tr}(\sigma_z) = \frac{1}{4}\text{Tr}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = 0 \end{aligned}$$

## 结果

1. 粒子 1 的约化密度矩阵为  $\rho_1 = \frac{1}{2}I_1$ ，表示粒子 1 处于完全无极化的混合态。
2. 粒子 1 自旋各分量的期望值均为零： $\langle S_x(1) \rangle = 0, \langle S_y(1) \rangle = 0, \langle S_z(1) \rangle = 0$ 。

## 问题 3

问题：计算纠缠熵证明态  $|\alpha\rangle = (|0\rangle_A|1\rangle_B + |1\rangle_A|1\rangle_B + |0\rangle_A|0\rangle_B + |1\rangle_A|0\rangle_B)/2$  不是纠缠态。

## 定义与判据

一个纯的双体量子态  $|\psi\rangle_{AB}$  是 **纠缠态 (entangled state)**，当且仅当它不能被写成两个子系统态的直积形式，即  $|\psi\rangle_{AB} \neq |\phi\rangle_A \otimes |\chi\rangle_B$ 。如果可以写成直积形式，则称其为 **可分离态 (separable state)** 或 **乘积态 (product state)**。对于纯态  $|\psi\rangle_{AB}$ ，其纠缠度可以通过计算任一子系统（例如 A）的 **约化密度矩阵 (reduced density matrix)**  $\rho_A = \text{Tr}_B(|\psi\rangle_{AB}\langle\psi|_{AB})$  的 **冯诺依曼熵 (Von Neumann entropy)**  $S(\rho_A)$  来衡量：

$$S(\rho_A) = -\text{Tr}(\rho_A \log_2 \rho_A) = -\sum_i \lambda_i \log_2 \lambda_i$$

其中  $\lambda_i$  是  $\rho_A$  的本征值。**关键判据**：纯态  $|\psi\rangle_{AB}$  是非纠缠态（乘积态）当且仅当其纠缠熵为零，即  $S(\rho_A) = 0$ 。这等价于说约化密度矩阵  $\rho_A$  是一个纯态的密度矩阵（其秩为 1，或者说  $\text{Tr}(\rho_A^2) = 1$ ），或者说  $\rho_A$  只有一个非零本征值且该值为 1。

## 分析给定的态 $|\alpha\rangle$

给定的态是：

$$|\alpha\rangle = \frac{1}{2}(|0\rangle_A|1\rangle_B + |1\rangle_A|1\rangle_B + |0\rangle_A|0\rangle_B + |1\rangle_A|0\rangle_B)$$

我们可以尝试将其因子分解：

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= \frac{1}{2}[|0\rangle_A(|1\rangle_B + |0\rangle_B) + |1\rangle_A(|1\rangle_B + |0\rangle_B)] \\ &= \frac{1}{2}[(|0\rangle_A + |1\rangle_A) \otimes (|0\rangle_B + |1\rangle_B)] \end{aligned}$$

为了得到归一化的态，每个括号内的态需要乘以  $1/\sqrt{2}$ ：

$$|\alpha\rangle = \left[ \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A + |1\rangle_A) \right] \otimes \left[ \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_B + |1\rangle_B) \right]$$

令  $|+\rangle_A = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A + |1\rangle_A)$  和  $|+\rangle_B = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_B + |1\rangle_B)$ 。这两个态是在计算基  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$  下，对应于 X 基（或 Hadamard 基）的正本征态。于是，给定的态可以写成：

$$|\alpha\rangle = |+\rangle_A \otimes |+\rangle_B$$

这直接表明  $|\alpha\rangle$  是一个乘积态，根据定义，它不是纠缠态。

## 计算纠缠熵

虽然因子分解已经证明了结论，我们仍然按照题目要求计算纠缠熵。首先，系统的总密度矩阵是：

$$\rho_{AB} = |\alpha\rangle\langle\alpha| = (|+\rangle_A \otimes |+\rangle_B)(\langle+|_A \otimes \langle+|_B) = (|+\rangle_A\langle+|_A) \otimes (|+\rangle_B\langle+|_B)$$

令  $\rho_A^{pure} = |+\rangle_A\langle+|_A$  和  $\rho_B^{pure} = |+\rangle_B\langle+|_B$ 。则  $\rho_{AB} = \rho_A^{pure} \otimes \rho_B^{pure}$ 。计算子系统 A 的约化密度矩阵  $\rho_A$ ：

$$\rho_A = \text{Tr}_B(\rho_{AB}) = \text{Tr}_B(\rho_A^{pure} \otimes \rho_B^{pure})$$

利用偏迹的性质  $\text{Tr}_B(O_A \otimes O_B) = O_A \cdot \text{Tr}(O_B)$ ，我们得到：

$$\rho_A = \rho_A^{pure} \cdot \text{Tr}(\rho_B^{pure})$$

由于  $|+\rangle_B$  是归一化的纯态，其对应的密度矩阵  $\rho_B^{pure}$  的迹为  $\text{Tr}(\rho_B^{pure}) = \langle+|+\rangle_B = 1$ 。因此：

$$\rho_A = \rho_A^{pure} = |+\rangle_A\langle+|_A$$

在计算基  $\{|0\rangle_A, |1\rangle_A\}$  下，态向量  $|+\rangle_A$  为  $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ 。所以  $\rho_A$  的矩阵形式为：

$$\rho_A = \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right) \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} \right) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

接下来计算  $\rho_A$  的冯诺依曼熵。我们需要找到  $\rho_A$  的本征值。求解特征方程  $\det(\rho_A - \lambda I) = 0$ :

$$\begin{aligned}\det \begin{pmatrix} 1/2 - \lambda & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 - \lambda \end{pmatrix} &= (1/2 - \lambda)^2 - (1/2)^2 = 0 \\ (1/2 - \lambda - 1/2)(1/2 - \lambda + 1/2) &= 0 \\ (-\lambda)(1 - \lambda) &= 0\end{aligned}$$

解得本征值为  $\lambda_1 = 1$  和  $\lambda_2 = 0$ 。现在计算冯诺依曼熵:

$$S(\rho_A) = - \sum_{i=1}^2 \lambda_i \log_2 \lambda_i = -(\lambda_1 \log_2 \lambda_1 + \lambda_2 \log_2 \lambda_2)$$

根据约定  $x \log_2 x \rightarrow 0$  当  $x \rightarrow 0$ , 并且  $\log_2 1 = 0$ 。

$$S(\rho_A) = -(1 \cdot \log_2 1 + 0 \cdot \log_2 0) = -(1 \cdot 0 + 0) = 0$$

## 结论

计算得到的纠缠熵  $S(\rho_A) = 0$ 。根据纯态纠缠的判据, 纠缠熵为零意味着该态是可分离的 (非纠缠的)。因此, 我们通过计算纠缠熵证明了态

$$|\alpha\rangle = \frac{1}{2}(|0\rangle_A |1\rangle_B + |1\rangle_A |1\rangle_B + |0\rangle_A |0\rangle_B + |1\rangle_A |0\rangle_B)$$

不是纠缠态, 而是一个乘积态  $|+\rangle_A \otimes |+\rangle_B$ 。