量子力学 II 作业 6

姓名: 郑晓旸
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 ρ_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 $\mathrm{Tr}_F(|\alpha\rangle_{AF} \langle \alpha|) = \rho_A$。

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：

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

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:

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

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

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

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

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

总自旋量子数 S 可以取 1 (三重态) 或 0 (单重态)。

- **单重态 (Singlet state):** $S=0$，$\boldsymbol{S}^2=0$。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):** $S=1$，$\boldsymbol{S}^2=2$。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 $\beta=1/(k_BT)$（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:
$$Z=\mathrm{Tr}(e^{-\beta H})=\sum_i e^{-\beta E_i}=e^{-\beta E_s}+3e^{-\beta E_t}=e^{3\beta/4}+3e^{-\beta/4}$$
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:
$$\rho=\frac{1}{Z}\left(e^{-\beta E_s}|s\rangle\langle s|+e^{-\beta E_t}\sum_{M=-1}^{1}|t_M\rangle\langle t_M|\right)$$
$$\rho=\frac{1}{Z}\left(e^{3\beta/4}|s\rangle\langle s|+e^{-\beta/4}(|t_1\rangle\langle t_1|+|t_0\rangle\langle t_0|+|t_{-1}\rangle\langle t_{-1}|)\right)$$

约化密度矩阵 ρ_1

计算粒子 1 的约化密度矩阵 $\rho_1=\mathrm{Tr}_2(\rho)$。由于哈密顿量 H 和热平衡态 ρ 具有旋转对称性，约化密度矩阵 ρ_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 $\mathrm{Tr}(\rho_1)=1$，有 $\mathrm{Tr}(C\cdot I_1)=C\cdot\mathrm{Tr}(I_1)=C\cdot 2=1$，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 ρ_1 计算粒子 1 自旋各分量的期望值 $\langle O_1\rangle = \mathrm{Tr}_1(\rho_1 O_1)$。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 σ_i 是泡利矩阵。

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

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)** $\rho_A = \mathrm{Tr}_B(|\psi\rangle_{AB}\langle\psi|_{AB})$ 的 **冯诺依曼熵 (Von Neumann entropy)** $S(\rho_A)$ 来衡量：

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

其中 λ_i 是 ρ_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 ρ_A 是一个纯态的密度矩阵（其秩为 1，或者说 $\mathrm{Tr}(\rho_A^2) = 1$），或者说 ρ_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 ρ_A：

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

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

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

由于 $|+\rangle_B$ 是归一化的纯态，其对应的密度矩阵 ρ_B^{pure} 的迹为 $\mathrm{Tr}(\rho_B^{pure}) = \langle+|+\rangle_B = 1$。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 ρ_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 ρ_A 的冯诺依曼熵。我们需要找到 ρ_A 的本征值。求解特征方程 $\det(\rho_A - \lambda I) = 0$:

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

$$(1/2 - \lambda - 1/2)(1/2 - \lambda + 1/2) = 0$$

$$(-\lambda)(1 - \lambda) = 0$$

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 $x \log_2 x \to 0$ 当 $x \to 0$，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 $|+\rangle_A \otimes |+\rangle_B$。