3.1.1 量子统计基本概念回顾

宏观状态

一个热力学体系，宏观上总是用一组单值的参数（如温度T，能量E，体积V，压力P，粒子数N等）来确定体系的状态。体系的所有其他性质都可以表达成这些参数的函数（状态函数）$f(N,V,T)$。如果在一定的时间范围内，这些宏观参数具有确定不变的值，就说这个体系处于平衡态。

这些参数一般只有三个是独立的，其他参数都是这三个参数的函数，所以一般可以用NVT, NPT等来表示体系的宏观状态。例如，理想气体状态方程如下：

$$PV = Nk_BT = nRT$$

(k是玻尔兹曼常数，n是摩尔数，R是摩尔常数)

k_B

微观状态

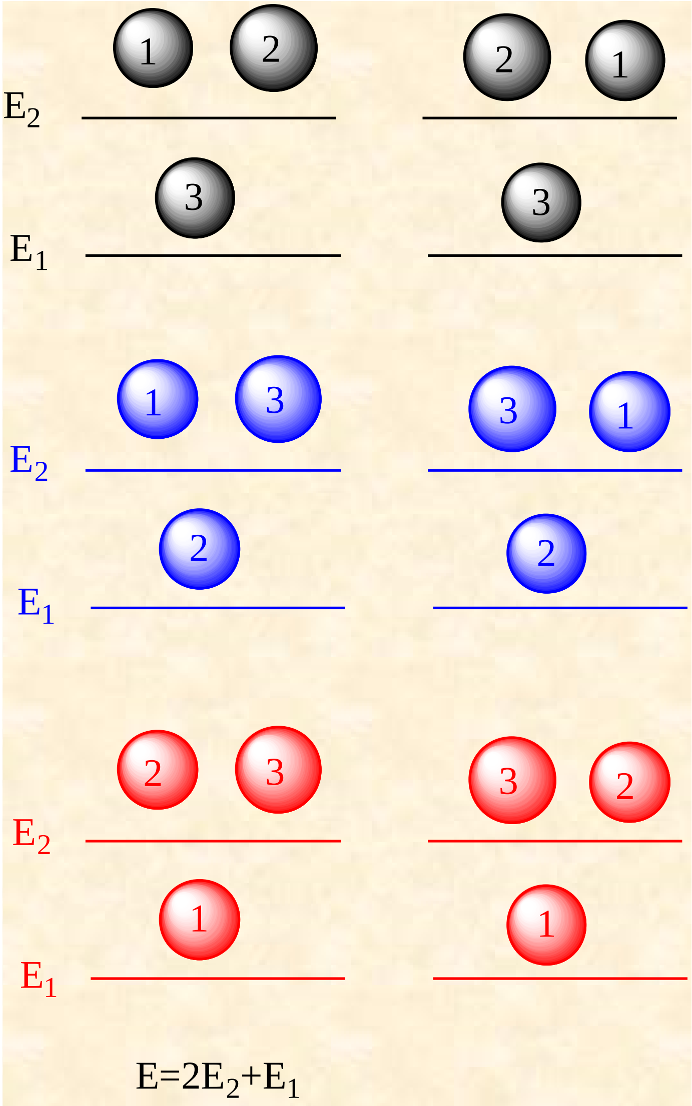
当体系的热力学状态完全确定时，组成体系的各粒子的运动状态并不确定的。每一个给定时刻，系统中每个粒子都有各自的位置和即时速度，到了下一时刻它们各自的位置和速度发生了变化，但系统的宏观参量保持不变，仍然对应同一个宏观状态。即宏观状态保持不变的平衡系统，其内部微观状态时时刻刻都在发生着变化。同一个宏观状态，可以对应许许多多的不同微观状态。

打个比方：掷三个骰子时总的点子数为10（10比作宏观状态），其中有好几种可能:(334)、(235)、(622)...（比作不同的微观状态）

量子力学的微观状态

- 每一个状态矢量$|\psi_i>$ (i=1, 2,…)描述一个微观状态。
- 处于一定能级上的系统，微观状态对应能级上的不同排列方式，一种排列方式就是一个微观状态。

右图是粒子可分辨情形，仅作示例之用，实际上由于粒子的全同性，它们对应同一个微观状态。



时间平均与微观状态的平均

- 系统在一定的宏观条件下（例如温度、压强、体积给定），系统内部的微观状态远没有固定下来。系统的同一个宏观状态, 可以同时对应数目巨大的不同微观状态。
- 系统每处于一个不同的微观状态，系统的某力学量就有一个不同的瞬时值；对该力学量的测量结果，对应这些瞬时值的平均。
- 在给定的宏观条件下，假定在对系统进行测量的时间内，系统内部的微观状态经历了所有可能的变化。于是测量的结果，既是系统在宏观上对时间的平均结果，也是对系统所有可能的微观状态进行平均的结果。
- 对时间的平均=对所有微观状态的平均

各态历经假设（ergodic theory）

统计系综

•宏观状态给定的某个系统A，当它处于不同微观状态1, 2, 3,…时，可以将它看作是系统A的不同化身A_1, A_2, A_3, ……（它们在宏观上都对应同一个系统A）。

•处于所有可能微观状态下的系统A，构成一个集合{A_1，A_2，A_3,…}，称为统计系综，简称为系综(ensemble)。

•就好比同一个人，在不同时候不同情形下有不同的状态，把所有不同状态下的这个人构成一个集合，就是这个人的一个“系综”(仅仅只是一个比方)

•对系统A的某一物理量F进行反复测量，假定在测量的这段时间T内，系统内部历经了所有可能的微观状态，处于微观状态i的系统A_i有测量值F_i，i=1,2,3,…。于是对物理量F求时间平均，等同于在系综{A_1, A_2, A_3,…}上求该物理量的平均值，即系综平均。

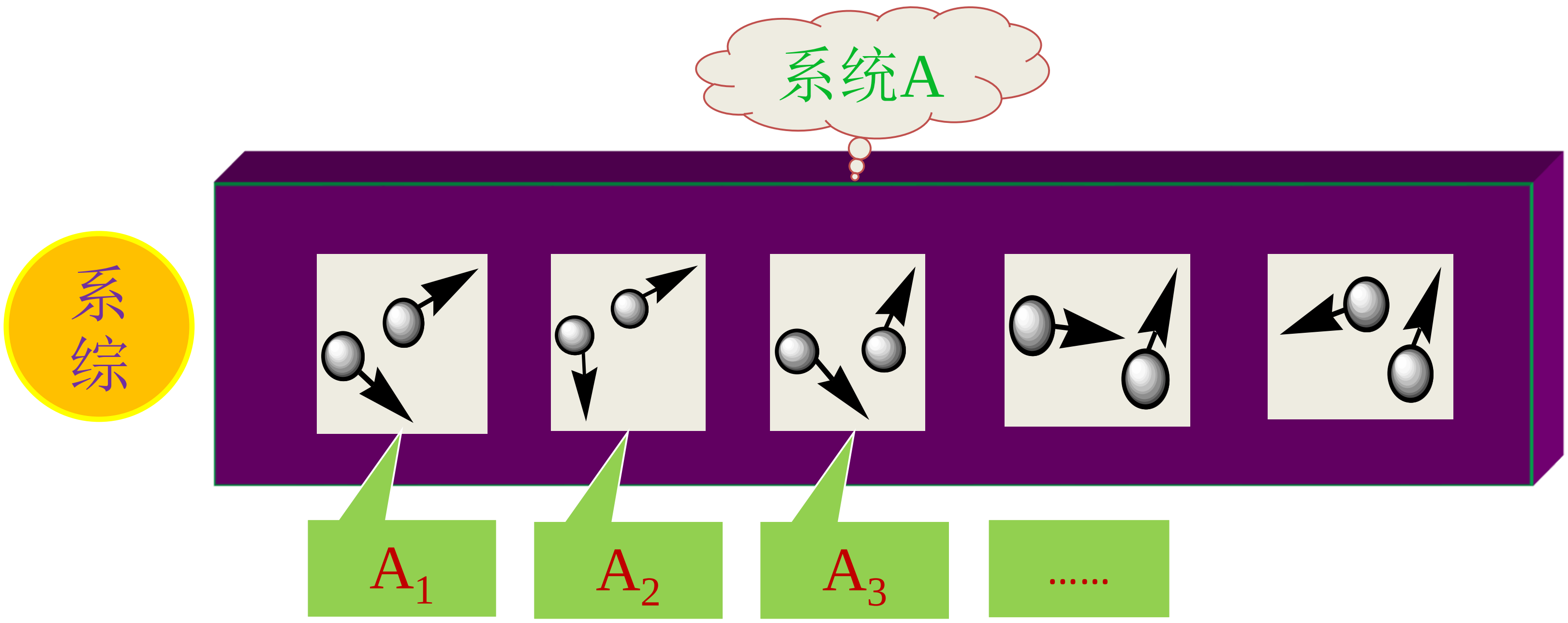
总之，系统某力学量的时间平均，是对系统所有微观状态的统计平均，因而可以等价地描述为对系综的平均。

注意：在平衡态下的最可几平均，只是对平衡态下所包含的微观状态进行统计平均；而系综平均是对系统一切可能的微观状态进行平均。系综平均与最可几平均之间的差别，通常可以忽略不计。

对时间的平均=对所有微观状态的平均=系综平均

● 经典统计系综

微观粒子采用经典力学描述时，对应的系综是经典系综。经典系统的微观状态，可以由粒子的位置和速度（或动量）来描述

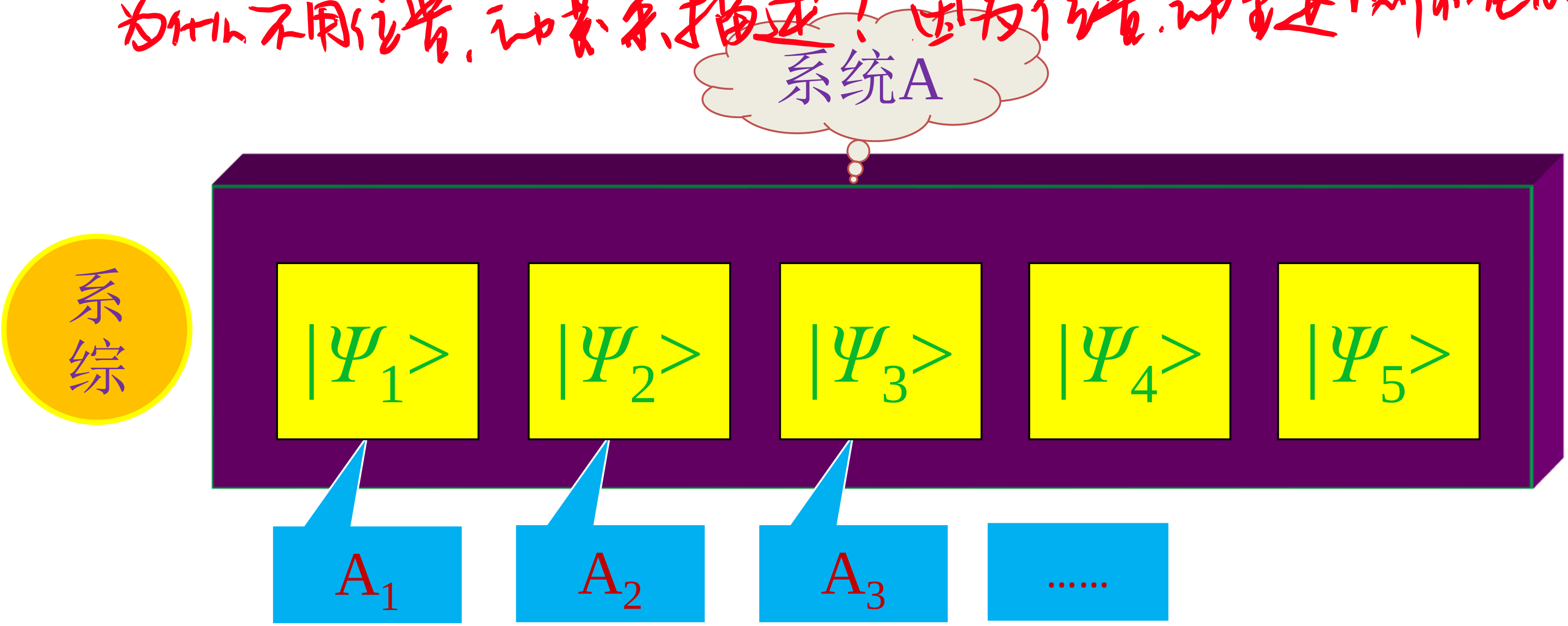


经典系综作为一个集合$\{A_1, A_2, A_3,\dots\}$，其所有元素A_i对应同一个宏观系统A，其中元素A_i对应的系统A处于微观状态i。

● 量子统计系综

当微观粒子采用量子力学来描述时，相应的统计系综，是量子统计系综，它将遵从量子统计力学规律。

为什么不用位置、动量来描述？因为位置、动量是测不准的。



量子系综作为一个集合$\{A_1, A_2, A_3, \ldots\}$，其任一个元素$A_i$，对应处于量子力学状态$|\Psi_i>$下的同一个系统A。

量子统计系综：纯系综与混合系综

- 当微观粒子采用量子力学来描述时，相应的统计系综，是量子统计系综，它将遵从量子统计力学规律。

- 能用Hilbert空间中的一个态矢$|\psi>$描述的态，称为纯态。任意个态矢的线性叠加是一个态矢，故仍为纯态。

- 如果系综中所有系统都处于同一个量子力学状态$|\psi>$，则称该系综为纯系综。

- 假设系综总共包含N个不同的系统状态（$N\rightarrow\infty$），其中有N_1个处于态$|\psi_1>\ldots$，N_i个系统处于$|\psi_i>\ldots$，即系统处于态$|\psi_i>$的概率为$P_i= N_i/N$，则该系综称为混合系综。

混合系综

混合系综是由若干纯态$|\psi_i>$混合描述，系综中系统处于$|\psi_i>$态的概率为P_i。混合系综可以表达为$\{|\psi_i>, P_i, i=1,2,\ldots\}$，其含义是

mixed states: $\quad |\psi_1\rangle,\ |\psi_2\rangle,\ \ldots|\psi_i\rangle,\ \ldots$

with the probabilities: $\quad P_1,\quad P_2,\ \ldots\ \ P_i,\ \ldots$

$$\sum_i P_i = 1,\ 0 \le P_i \le 1 \quad (3.1.1)$$

混合态是纯态按一定统计权重分布的集合；纯态是混合态的特殊情况。

$\underline{P_1=1.\quad P_i=0\ (i\neq 1)}$

特殊的混合系综 ⇒ 纯态.

•纯系综平均

假设纯系综处于纯态$|\psi>$上，则力学量算符$\hat{A}$ 的纯系综平均，即是它在该态下的量子力学平均。用一组正交归一完备基$\{|u_i>\}$来展开$|\psi>$ (利用 $\sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = 1$)

$$|\psi\rangle = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle = \sum_i c_i|u_i\rangle,\ c_i = \langle u_i|\psi\rangle$$

则有

$$\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_{i,j} c_i^* c_j \langle u_i|\hat{A}|u_j\rangle$$

$$= \sum_i |c_i|^2 \langle u_i|\hat{A}|u_i\rangle + \underbrace{\sum_{i\neq j} c_i^* c_j \langle u_i|\hat{A}|u_j\rangle}_{\text{纯态干涉}} \quad (3.1.2)$$

右边第二项对应各纯态$|u_i>$之间的干涉贡献

•混合系综平均

力学量算符$\hat{A}$在混合系综中求平均，是先在系综的各个纯态$|\psi_i\rangle$上，对力学量求量子力学平均，

$$A_i = \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle \quad (3.1.3)$$

再对系统处于各个态$|\psi_i\rangle$上的概率P_i进行统计平均

$$\bar{A} = \sum_i P_i \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle = \sum_i P_i A_i \quad (3.1.4)$$

因此，混合系综的平均包含两次平均，同时进行两种不同性质的概率平均。

3.1.2 密度算符

选取一组正交归一完备基矢{$|u_n>$}，并且利用完备性关系$\sum_n |u_n\rangle\langle u_n| = I$，有(从以下运算可以体会Dirac符号之妙)

$$\bar{A} = \sum_i P_i \langle\psi_i|\hat{A}|\psi_i\rangle = \sum_i P_i \langle\psi_i|\sum_n |u_n\rangle\langle u_n|\hat{A}|\psi_i\rangle$$

$$= \sum_{n,i} P_i \langle\psi_i|u_n\rangle\langle u_n|\hat{A}|\psi_i\rangle = \sum_{n,i} P_i \langle u_n|\hat{A}|\psi_i\rangle\langle\psi_i|u_n\rangle$$

$$= \sum_n \langle u_n|\hat{A}\{\sum_i P_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i|\}|u_n\rangle = \sum_n \langle u_n|\hat{A}\hat{\rho}|u_n\rangle$$

$$\Rightarrow \bar{A} = \sum_n (\hat{A}\hat{\rho})_{nn} = \mathrm{tr}(\hat{A}\hat{\rho}),\ \hat{\rho} \equiv \sum_i P_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i|,\quad (3.1.5)$$

$$\overline{A}=\sum_i P_i\langle\psi_i|\hat{A}|\psi_i\rangle=\mathrm{tr}(\hat{A}\hat{\rho})\quad(3.1.5)$$

其中已经定义**密度算符**如下：

$$\hat{\rho}=\sum_i P_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i|,\ \sum_i P_i=1\quad(3.1.6)$$

密度算符在任一个表象下的矩阵表示，称为**密度矩阵**。例如在表象 $\{|u_n>\}$下，密度矩阵为

$$\rho=(\rho_{mn}),\quad \rho_{mn}=\langle u_m|\hat{\rho}|u_n\rangle$$

讨论

•密度算符在任意一个纯态$\{|\varphi>\}$下的平均值非负

$$\langle\varphi|\hat{\rho}|\varphi\rangle=\sum_i P_i\left|\langle\psi_i|\varphi\rangle\right|^2\geq 0\quad(3.1.7)$$

mixed states: $|\psi_1\rangle,\ |\psi_2\rangle,\ \ldots|\psi_i\rangle,\ \ldots$

with the probabilities: $P_1,\quad P_2,\ \ldots\ P_i,\ \ldots$

$$\sum_i P_i = 1,\ 0 \le P_i \le 1 \quad (3.1.1)$$

•若混合系综中各个态矢量$\{|\psi_i>\}$是正交归一的，即满足$<\psi_k|\psi_i>=\delta_{ki}$，则$\{|\psi_i>\}$是密度算符的一组本征态，且本征值为系统处于态$|\psi_i>$的概率$P_i$，即

$-\lg P_{概率}$: 信息量

$$\hat{\rho}|\psi_i\rangle = \sum_k P_k|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\psi_i\rangle = \sum_k P_k|\psi_k\rangle\delta_{ki} = P_i|\psi_i\rangle \quad (3.1.8)$$

事实上，密度算符可以看作是“概率算符”；而后面将要讲到的约化密度算符，跟概率论中的边缘分布(marginal distribution)是同一类型的概念。

•对于纯系综，其对应的系统只处于同一个纯态（不妨设为$|\psi_1\rangle=|\psi\rangle$），即有$P_i=\delta_{i1}$，此时(3.1.6)式变为

$$\hat{\rho}=\sum_i P_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i|\Rightarrow$$

$$\hat{\rho}=|\psi_1\rangle\langle\psi_1|=|\psi\rangle\langle\psi| \qquad (3.1.9)$$

因此，纯系综的密度算符即是投影算符，满足

$$\underbrace{\hat{\rho}^2}_{=以投影性质}=|\psi\rangle\underbrace{\langle\psi|\psi\rangle}_{1}\langle\psi|=|\psi\rangle\langle\psi|=\hat{\rho}$$

• 密度算符的迹等于1（迹与表象无关，因而该结论与表象无关），本质上是概率的归一化条件

$$\mathrm{tr}\hat{\rho}=1 \quad (3.1.10)$$

事实上

$$\mathrm{tr}(\hat{\rho})=\sum_n\langle u_n|\hat{\rho}|u_n\rangle=\sum_n\langle u_n|\sum_i P_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i||u_n\rangle$$

$$=\sum_i P_i\sum_n\langle u_n|\psi_i\rangle\langle\psi_i|u_n\rangle=\sum_i P_i\sum_n\langle\psi_i|u_n\rangle\langle u_n|\psi_i\rangle$$

$$=\sum_i P_i\langle\psi_i|\sum_n|u_n\rangle\langle u_n||\psi_i\rangle$$

$$=\sum_i P_i\langle\psi_i|\psi_i\rangle=\sum_i P_i=1$$

其中已经利用到态矢的归一化条件

•**密度算符平方的迹满足**（可以根据它们来鉴别密度算符的类型）

纯系综

$$\begin{cases} \mathrm{tr}\hat{\rho}^2 = 1, & \text{for pure ensemble} \\ \mathrm{tr}\hat{\rho}^2 < 1, & \text{for mixed ensemble} \end{cases} \qquad (3.1.11)$$

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| = \hat{\rho}^2 \quad \text{for pure ensemble}$$ 投影算符

$$\hat{\rho} = \sum_i P_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \quad \text{for mixed ensemble}$$

证明

$$\hat{\rho}^2 = \sum_i P_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \sum_j P_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j| = \sum_{i,j} P_i P_j |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\psi_j\rangle\langle\psi_j|$$

$$= \sum_{i,j} P_i P_j |\psi_i\rangle\langle\psi_j| \delta_{ij} = \sum_i P_i^2 |\psi_i\rangle\langle\psi_i|,$$

$$\mathrm{tr}\hat{\rho}^2 = \sum_n \langle u_n|\hat{\rho}^2|u_n\rangle = \sum_i P_i^2 \sum_n \langle u_n|\psi_i\rangle\langle\psi_i|u_n\rangle$$

$$= \sum_i P_i^2 \sum_n \langle\psi_i|u_n\rangle\langle u_n|\psi_i\rangle = \sum_i P_i^2 \langle\psi_i|\sum_n |u_n\rangle\langle u_n||\psi_i\rangle$$

$$= \sum_i P_i^2 \langle\psi_i|\psi_i\rangle = \sum_i P_i^2 < \sum_i P_i = 1$$

(For the mixed ensemble one has $P_i^2 < P_i$)

密度算符是厄米算符，因此它的本征值必为实数（本征值为系统处于相应本征态的概率），在$\{|u_n>\}$表象下有：

$$
\begin{cases}
\hat{\rho}^{\dagger} = \hat{\rho} \Leftrightarrow \rho_{nm}^{*} = \rho_{mn} \\
\rho_{mn} = \langle u_m | \hat{\rho} | u_n \rangle
\end{cases}
\qquad (3.1.12)
$$

1) 若干个纯态的线性叠加仍然是一个纯态;

2) 混合态的线性叠加,可由密度算符来完成.

注：在量子信息文献里，有时直接将密度矩阵或者密度算符称为“量子力学态”（简称“态”）

对于前面定义的密度算符 $\hat{\rho} = \sum_i P_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$

$$\hat{\rho} = \sum_i P_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|, \ \sum_i P_i = 1$$

将混合系综中各个态矢$|\psi_i\rangle$用一组正交归一和完备的基矢$\{|u_n\rangle\}$展开，即在$\{|u_n\rangle\}$表象下，有

$$|\psi_i\rangle = \sum_n c_{in} |u_n\rangle, \ c_{in} = \langle u_n|\psi_i\rangle \quad (3.1.13)$$

$$(\text{where } \langle u_m|u_n\rangle = \delta_{mn}, \ \sum_n |u_n\rangle\langle u_n| = I)$$

$$\left|\psi_i\right\rangle = \sum_n c_{in}\left|u_n\right\rangle,\ c_{in} = \left\langle u_n \middle| \psi_i\right\rangle \quad (3.1.13)$$

利用(3.1.13)式，可求得密度算符在{|u_n>}表象下的矩阵元为：

$$\rho_{mn} = \left\langle u_m \middle| \hat{\rho} \middle| u_n\right\rangle = \sum_i P_i \left\langle u_m \middle| \psi_i\right\rangle \left\langle \psi_i \middle| u_n\right\rangle$$

$$= \sum_i P_i c_{im} c_{in}^* \qquad (3.1.14)$$

$$(c_{im} = \left\langle u_m \middle| \psi_i\right\rangle, c_{in} = \left\langle u_n \middle| \psi_i\right\rangle \Rightarrow c_{in}^* = \left\langle \psi_i \middle| u_n\right\rangle)$$

其中密度矩阵的对角元为

$$\rho_{nn} = \sum_i P_i \left|c_{in}\right|^2 = \sum_i P_i \left|\left\langle u_n \middle| \psi_i\right\rangle\right|^2 \quad (3.1.15)$$

$$\rho_{nn}=\sum_i P_i\left|\langle u_n|\psi_i\rangle\right|^2 \quad (3.1.15)$$

密度矩阵对角元的物理意义

由于 $|c_{in}|^2=\left|\langle u_n|\psi_i\rangle\right|^2$ 表示在态$|\psi_i>$中找到态$|u_n>$的量子力学几率，而P_i是混合系综处于态$|\psi_i>$的统计力学几率，因此，密度算符的对角元ρ_{nn}表示整个混合系综处于态$|u_n>$上的总几率。若单位体积内粒子数为N，那么$N\rho_{nn}$代表系统处在$|u_n>$态上粒子数密度。

密度矩阵的非对角元表示态$|u_m>$与$|u_n>$之间的干涉效应（相干性质），它满足（即厄米性）

$$\rho_{mn}=\left(\sum_i P_i c_{in} c_{im}^*\right)^*=\rho_{nm}^* \quad (3.1.16)$$

密度矩阵对角元ρ_{kk}的物理意义

多个纯[illegible]状态

混合系综 $\rightarrow$

$$
\begin{cases}
P_1, \ \left|\psi_1\right\rangle = \sum\limits_n c_{1n}\left|u_n\right\rangle \rightarrow \left|c_{1k}\right|^2, \ \left|u_k\right\rangle \rightarrow P_1\left|c_{1k}\right|^2 \\
P_2, \ \left|\psi_2\right\rangle = \sum\limits_n c_{2n}\left|u_n\right\rangle \rightarrow \left|c_{2k}\right|^2, \ \left|u_k\right\rangle \rightarrow P_2\left|c_{2k}\right|^2 \\
P_3, \ \left|\psi_3\right\rangle = \sum\limits_n c_{3n}\left|u_n\right\rangle \rightarrow \left|c_{3k}\right|^2, \ \left|u_k\right\rangle \rightarrow P_3\left|c_{3k}\right|^2 \\
\cdots \\
P_i, \ \left|\psi_i\right\rangle = \sum\limits_n c_{in}\left|u_n\right\rangle \rightarrow \left|c_{ik}\right|^2, \ \left|u_k\right\rangle \rightarrow P_i\left|c_{ik}\right|^2 \\
\cdots
\end{cases}
$$

$$
\left.\begin{array}{l}\text{混合系综} \\ \rightarrow \text{处于}\left|u_k\right\rangle \\ \text{的总概率}\end{array}\right\} \rho_{kk} = \sum_i P_i\left|c_{ik}\right|^2 = \sum_i P_i\left|\left\langle u_k \middle| \psi_i\right\rangle\right|^2 \quad (3.1.15)
$$

所有可能的途径都加起来

利用 $\sum_m |u_m\rangle\langle u_m| = I$ 和 $\bar{A} = \mathrm{tr}(\hat{A}\hat{\rho})$ ，有

$$\bar{A} = \mathrm{tr}(\hat{A}\hat{\rho}) = \sum_n \langle u_n|\hat{A}\hat{\rho}|u_n\rangle$$

$$= \sum_n \langle u_n|\hat{A}\sum_m |u_m\rangle\langle u_m|\hat{\rho}|u_n\rangle$$

$$= \sum_{m,n} \langle u_n|\hat{A}|u_m\rangle\langle u_m|\hat{\rho}|u_n\rangle$$

$$= \sum_{m,n} A_{nm}\rho_{mn} = \sum_n A_{nn}\rho_{nn} + \sum_{m\neq n} A_{nm}\rho_{mn}$$

平均值不仅取决于密度矩阵的对角元，还取决于非对角元

各态$|u_n\rangle$中相应的平均值

$|u_m\rangle$与$|u_n\rangle$之间的干涉效应对平均值的贡献

•假定混合系综中，系统处于各个微观态$|\psi_i>$的概率P_i不随时间而改变，则利用Schrödinger方程

A作业
2022.9.28

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_i\rangle=\hat{H}|\psi_i\rangle$$

和密度算符的定义，

$$\hat{\rho}=\sum_i P_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i|,\ (\sum_i P_i=1)$$

可以证明量子刘维尔(Liouville)方程（学生作业）：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}(t)=[\hat{H},\hat{\rho}(t)]\quad(3.1.17)$$

{注意：方程(3.1.17)是在Schrödinger picture下写出来的，不属于Heisenberg picture下力学量算符满足的Heisenberg方程}

海森堡 绘景

课外阅读材料：量子比特与量子信息

经典比特与量子比特

- 记述经典信息的二进制存储单元称为经典比特(bit)，经典比特由经典力学状态的1和0表示

- 记述量子信息的基本存储单元称为量子比特(qubit)，一个量子比特的状态是一个二维Hilbert空间的态矢，它可以表达为两个基矢 |0>和|1>的线性叠加。

bit只对应0和1两个态

qubit可以对应无限多个态

一个量子比特既可以是|0> 、也可以是|1> ，还可以对应|0>和|1>的叠加态

$$\left|\psi\right\rangle = \alpha\left|0\right\rangle + \beta\left|1\right\rangle$$

*n*个量子比特对应的状态：

$$\left|\psi\right\rangle = \left|\psi_1\right\rangle\left|\psi_2\right\rangle\cdots\left|\psi_n\right\rangle,$$

$$\left|\psi_i\right\rangle = \alpha_i\left|0\right\rangle + \beta_i\left|1\right\rangle,\ i = 1, 2, \ldots, n$$

总之，若二维Hilbert空间的基矢为|0>和|1>，则量子比特（qubit）|ψ>可以表示为：

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

式中α和β为复数，且满足 $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$

一个量子比特既可以处于|0>态，也可以处于|1>态，还可以处于这两个态的叠加态|ψ> ——这是**量子比特与经典比特的本质不同点**。

单个量子比特的一些实例

若量子比特用光子的偏振态来表示，即|0> 表示垂直偏振光 $|\updownarrow\rangle$， |1> 表示水平偏振光 $|\leftrightarrow\rangle$，则

π/4偏振光： $$|\swarrow\!\!\!\!\nearrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\updownarrow\rangle + |\leftrightarrow\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$$

3π/4偏振光： $$|\nwarrow\!\!\!\!\searrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\updownarrow\rangle - |\leftrightarrow\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$$

右旋圆极化光： $$|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\leftrightarrow\rangle + i|\updownarrow\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + i|1\rangle)$$

$\Delta\varphi = \frac{\pi}{2}$

左旋圆极化光： $$|L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\leftrightarrow\rangle - i|\updownarrow\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - i|1\rangle)$$

$\Delta\varphi = -\frac{\pi}{2}$

这些状态都可以表示量子比特

利用量子力学状态表示的信息称为量子信息

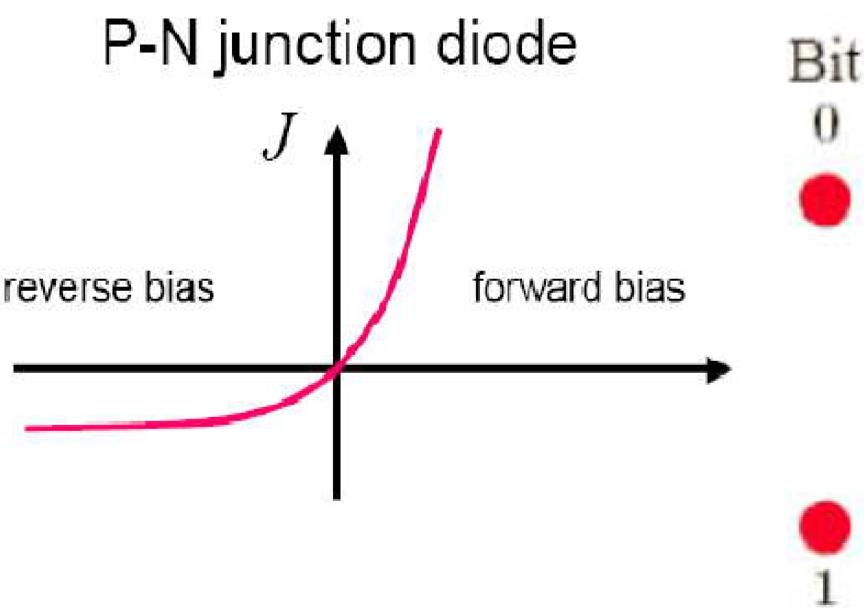
前面我们说：记述量子信息的基本存储单元称为量子比特(qubit)。也可以倒过来说：

以量子比特作为信息单元,称为量子信息。

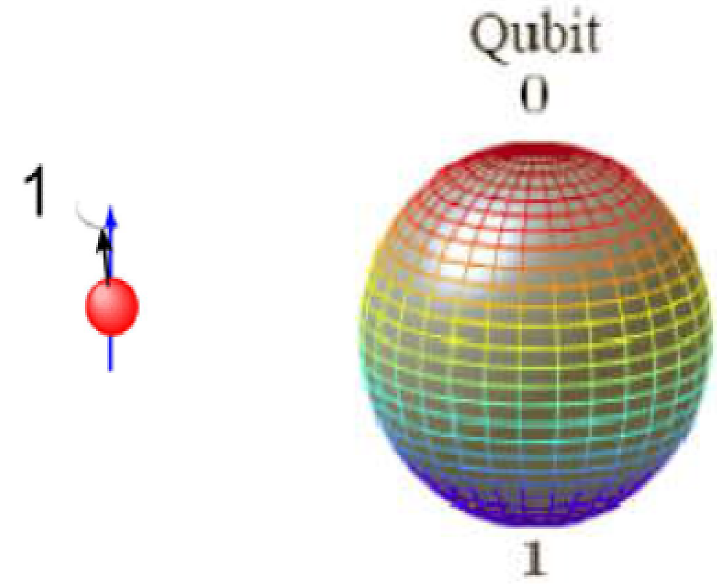
量子比特：$|\psi\rangle = C_1|0\rangle + C_2|1\rangle,\ |C_1|^2 + |C_2|^2 = 1.$

量子信息：$|\psi\rangle_1|\psi\rangle_2|\psi\rangle_3|\psi\rangle_4\cdots\cdots|\psi\rangle_N\cdots\cdots$

从经典信息到量子信息



经典bit只有0,1两种状态,例如对应着晶体管的电流大和小两种状态



$$\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle$$

量子bit可以有0,1的叠加状态,例如对应着电子自旋状态

◆量子纠缠态

当一个量子态无法表达为两个量子态的张量积时，它就称为量子纠缠状态。例：有一量子叠加状态

$$\frac{1}{\sqrt{2}}|00\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|10\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle|0\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle|0\rangle$$

即

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle\right)|0\rangle$$

因此不是量子纠缠态。但是，对于下列的量子叠加状态：

$$\frac{1}{\sqrt{2}}|01\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|10\rangle$$

爱因斯坦&玻尔

无论采用怎样的方法都无法写成两个量子比特的乘积。这个叠加状态就称为量子纠缠状态。

量子信息的载体可以是任意的量子双态系统。

量子双态系统举例：

◆光子具有两个不同的线偏振态或椭圆偏振态；

◆恒定磁场中原子核的自旋；

◆具有二能级的原子、分子或离子；

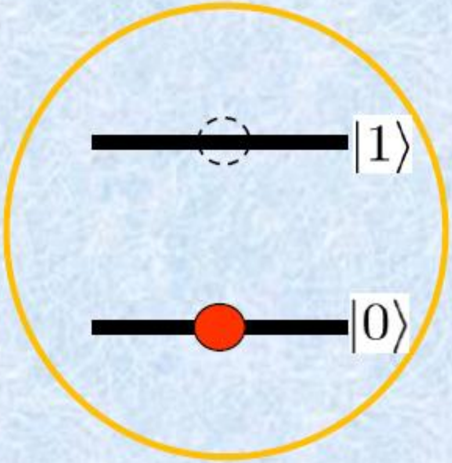
◆围绕单一原子旋转的电子的两个状态。

单量子比特

量子比特(qubit):

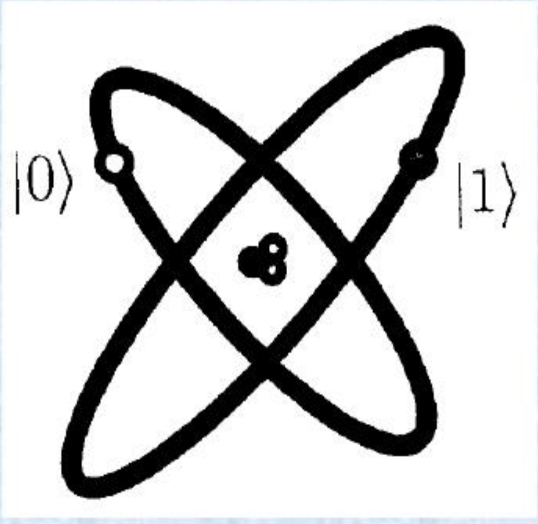
量子比特是量子化的二能级系统。数学抽象对应的这两个能级的状态:

$$|0\rangle \text{ 和 } |1\rangle$$



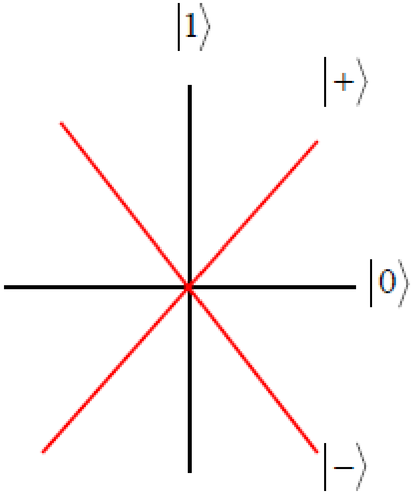
实现形式:

- 光子的不同的偏振态
- 原子，电子自旋
- 电子绕单原子核的运动状态
- ....



Hilbert空间的基矢不唯一，同一个量子比特也可以用不同的基矢表示。同一个量子比特在不同基矢中表达形式不同，例如定义基矢

$$|\pm\rangle=(|0\rangle\pm|1\rangle)/\sqrt{2}$$



则量子比特|ψ>可以表示为

$$|\psi\rangle=\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha+\beta)|+\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha-\beta)|-\rangle$$

前面定义的是单个量子比特。利用复合量子系统，可以定义多个量子比特。由于复合量子系统的量子态是各个子系统量子态的张量积， ***n***个量子比特可以表达为***N*=2^*n***维Hilbert空间中的一个状态矢量，即一般地可表达为

$$
\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \alpha_0 |00\ldots0\rangle + \alpha_1 |00\ldots1\rangle + \ldots + \alpha_N |11\ldots1\rangle \\
&= \alpha_0 |0\rangle|0\rangle\ldots|0\rangle + \alpha_1 |0\rangle|0\rangle\ldots|1\rangle + \ldots + \alpha_N |1\rangle|1\rangle\ldots|1\rangle,
\end{aligned}
$$

即n个量子比特可表达为$N=2$^n个线性无关的状态矢量相干叠加。当n=500时，N比整个宇宙中的原子数还多。多量子比特对于量子并行计算有着非凡的意义。

◆例1：双量子比特

两个经典比特，有四种可能状态：00, 01, 10, 11.

两个量子比特，一共有四个基态：|00>, |01>, |10>, |11>.

于是，双量子比特可以表达为：

$$|\psi\rangle = \alpha_{00}|00\rangle + \alpha_{01}|01\rangle + \alpha_{10}|10\rangle + \alpha_{11}|11\rangle$$

其中展开系数满足归一化条件

$$|\alpha_{00}|^2 + |\alpha_{01}|^2 + |\alpha_{10}|^2 + |\alpha_{11}|^2 = 1$$

◆单量子比特，可以用角度变量来表示

对于任意一个单量子比特

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \ |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

其系数α和β是两个复变量，对应四个实变量，但由于它们满足归一化条件，其中只有三个是独立的，该量子比特可以用角度变量重新表达为：

$$|\psi\rangle = \exp(\mathrm{i}\,\gamma)[\cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + \exp(\mathrm{i}\,\phi)\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle]$$

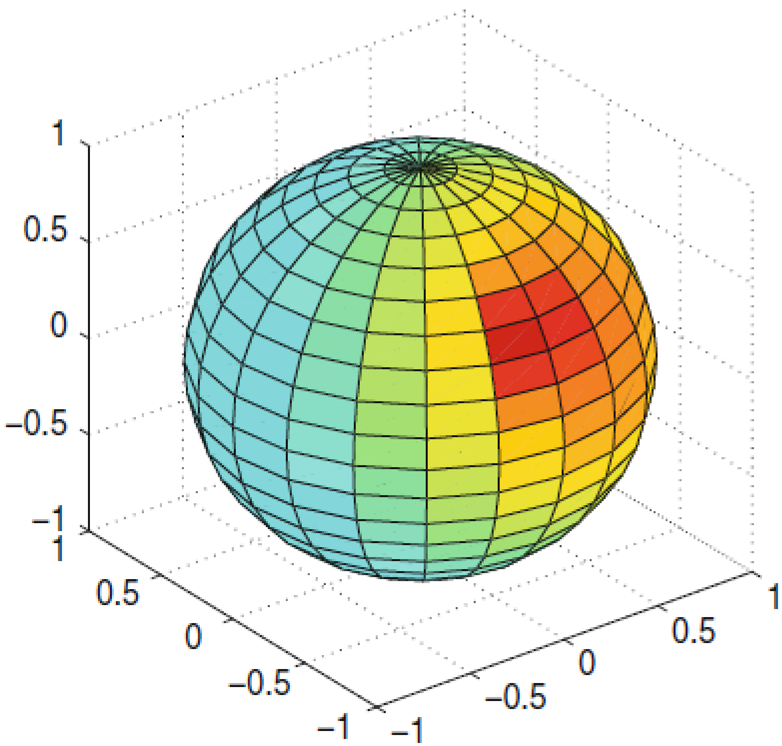
其中整体相位因子可以略去($|\psi>$与$\lambda|\psi>$描述同一个量子态)，因而

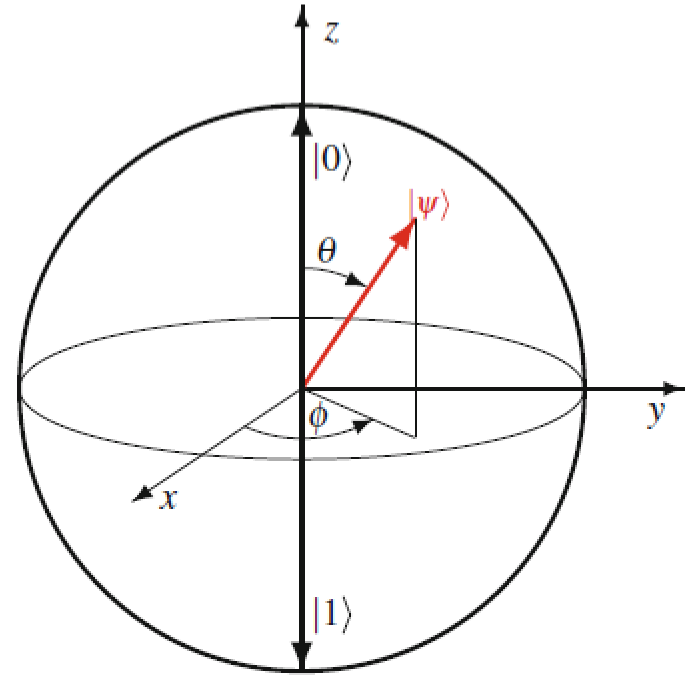
$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + \exp(\mathrm{i}\,\phi)\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle$$

◆单量子比特的几何表示

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + \exp(\mathrm{i}\,\phi)\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle$$

- 每给定一对变量 (θ, ϕ)，都有一个唯一的二维状态矢量 $|\psi>$ 与之对应，从而与一个量子比特对应；
- 把 θ 和 ϕ 看作是球坐标系中的**天顶角**和**方位角**，那么它们每给定一对值，都确定了单位球面上的一点。
- 于是单位球面上的点与二维状态矢量 $|\psi>$ 一一对应，整个单位球面与状态矢量 $|\psi>$ 的全体对应，这个单位球面可作为二维状态矢量 $|\psi>$ 的几何描述，称为 **Bloch球面**。此即**单量子比特的Bloch球面表示**





$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + \exp(\mathrm{i}\,\phi)\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle$$

单量子比特的Bloch球面表示

注：有些文献又称量子比特为量子位

假设某系统由子系统1和2构成，它们的量子态分别为$|\psi_1>$和$|\psi_2>$，则该系统的量子态由张量积$|\psi>=|\psi_1>|\psi_2>$表示

$$|\psi_1\rangle = a_1|0\rangle + b_1|1\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix},\ |\psi_2\rangle = a_2|0\rangle + b_2|1\rangle = \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix}$$

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle|\psi_2\rangle = \underbrace{|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle}_{\text{张量积}} = \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1a_2 \\ a_1b_2 \\ b_1a_2 \\ b_1b_2 \end{pmatrix}$$

一对单量子比特|0>和|1>能够组成四个双量子比特

$$|00\rangle \equiv |0\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ 0 \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|01\rangle \equiv |0\rangle \otimes |1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \times \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ 0 \times \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|10\rangle \equiv |1\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ 1 \times \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|11\rangle \equiv |1\rangle \otimes |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \times \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ 1 \times \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

它们可构成四维Hilbert空间中的一组正交归一和完备的基矢。

◆量子比特的测定

测量前，可以说以下系统同时处在|0>和|1>状态

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$$

对以上纯系综进行重复测量，测量后，系统只处于|0>和|1>两个状态中的一个，且它们分别以两种概率发生，因此可以与经典比特0和1对应起来(如同二元信源的两个消息符号)。于是测量可以将一个量子比特转换成两个经典比特。

重复测量时，量子比特 $|\psi>$以下列方式被转换

以概率 $|\langle 0|\psi\rangle|^2 = |a|^2$ 变换成 |0> → bit 0

以概率 $|\langle 1|\psi\rangle|^2 = |b|^2$ 变换成 |1> → bit 1

不同的测量，所获取的经典比特及其发生概率也将不同。若态矢表示的qubit为

$$|\varphi\rangle=\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle=\frac{\alpha+\beta}{\sqrt{2}}|+\rangle+\frac{\alpha-\beta}{\sqrt{2}}|-\rangle$$

$$|+\rangle\equiv\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle+|1\rangle),\ |-\rangle\equiv\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle-|1\rangle)$$

基于{|0>, |1>}测量 $$|\varphi\rangle=\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle\Rightarrow\begin{cases}|0\rangle\\|1\rangle\end{cases}$$

基于{|+>, |->}测量 $$|\varphi\rangle=\frac{\alpha+\beta}{\sqrt{2}}|+\rangle+\frac{\alpha-\beta}{\sqrt{2}}|-\rangle\Rightarrow\begin{cases}|+\rangle\\|-\rangle\end{cases}$$

测量前是纯态；测量后，获得以一定概率分布的不同纯态集合，该集合构成一个混合态。

$$|\varphi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \frac{\alpha+\beta}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{\alpha-\beta}{\sqrt{2}}|-\rangle$$

基于{|0>, |1>}测量(例如光子水平与垂直极化测量)

取|0>→bit 0的概率 $|\alpha|^2$

取|1>→bit 1的概率 $|\beta|^2$

基于{|+>,|−>}测量(例如光子45度或135度极化测量)

取|+> → bit 0的概率 $|\alpha+\beta|^2/2$

取|−> → bit 1的概率 $|\alpha-\beta|^2/2$

量子力学告诉我们，某东西到底是什么，取决于我们如何"看"它，横看成岭侧成峰；进一步地，量子力学的测量理论告诉我们，被测量对象与观测者不可分，主客观不可分。

双量子比特

两个经典比特 → 总共：00，01，10，11

两个量子比特 → 基矢：$\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$

双量子比特可以表示为（测量前）：

$$|\varphi\rangle = \alpha_{00}|00\rangle + \alpha_{01}|01\rangle + \alpha_{10}|10\rangle + \alpha_{11}|11\rangle$$

通过同时对两个量子位进行测量，得到各个经典比特及其概率（以两个二能级原子构成的系统为例）

测定结果	出现概率
$\|00\rangle \rightarrow 00$	$\|\langle 00\|\varphi\rangle\|^2 = \|\alpha_{00}\|^2$
$\|01\rangle \rightarrow 01$	$\|\langle 01\|\varphi\rangle\|^2 = \|\alpha_{01}\|^2$
$\|10\rangle \rightarrow 10$	$\|\langle 10\|\varphi\rangle\|^2 = \|\alpha_{10}\|^2$
$\|11\rangle \rightarrow 11$	$\|\langle 11\|\varphi\rangle\|^2 = \|\alpha_{11}\|^2$

测定结果	出现概率
00	$\lvert\langle 00\vert\varphi\rangle\rvert^2=\lvert\alpha_{00}\rvert^2$
01	$\lvert\langle 01\vert\varphi\rangle\rvert^2=\lvert\alpha_{01}\rvert^2$
10	$\lvert\langle 10\vert\varphi\rangle\rvert^2=\lvert\alpha_{10}\rvert^2$
11	$\lvert\langle 11\vert\varphi\rangle\rvert^2=\lvert\alpha_{11}\rvert^2$

回顾一下经典自信息与平均自信息（信息熵）

$$I(ij)=-\log\lvert\alpha_{ij}\rvert^2,\ i,j=0,1$$

$$H=-\sum_{i,j=0,1}\lvert\alpha_{ij}\rvert^2\log\lvert\alpha_{ij}\rvert^2$$