量子力学基础 二

Ma

February 10, 2018

假定我们对量子力学的基本假设已经有了初步的了解了：
第一是：态空间假设；
第二是：演化假设；
第三是：测量假设；
第四是：复合系统假设。
下面我们首先介绍纯态与混态的概念，然后再用密度算子来描述量子力学基本假设，这在许多理论分析上十分方便。此外，我们将进一步说明一般的测量假设，之前提到的测量是特殊的投影测量。

1 纯态与混态

首先，我们已经知道了一个量子态可以用Hilbert空间下的一个单位矢量来描述，例如光子的水平偏振态通常被定义为2维Hilbert空间下的

$$|0\rangle \equiv \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \in C^2 \tag{1.1}$$

实验上制备这样一个量子态的原理也很简单：让一束单色平面波经过x方向的偏振滤波片即可，经过滤波片后的光子即为状态$|0\rangle$，这样的制备过程是确定性制备，也就是说我们把量子态精确地制备为某一特定的形式，通常将这样制备的量子态称为纯态（Pure States），简单的说就是量子态是“纯净”的，不含其它成分的。然而，在现实中我们很难做到精确的确定性制备，多数情况下我们制备的态是概率性的，是服从一定概率分布的。通常将这样制备的量子态称为混态（Mixed States）或者系综（Ensembles），在不确定系统是纯态还是混态的情况下，一般都称之为系综。

纯态和混态的概念让我们意识到一个困难：只有纯态才可以用一个Hilbert空间下的单位矢量来描述，而混态则需要许多单位矢量来描述，例如混态$\{p_i, |\psi_i\rangle\}_{i=1}^N$，它表示系统可能以$p_i$的概率处于状态$|\psi_i\rangle$，描述这样一个系统可能需要$N$个单位矢量！

我们可以举一个特殊的例子：假定有一个量子态是

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \tag{1.2}$$

如果我们用一个测量算子σ_z来测量这个量子态，注意到：算子σ_z的本征态是$|0\rangle$和$|1\rangle$，那么测量后的状态只可能是$|0\rangle$或$|1\rangle$，应用之前的投影测量原理，我们可以马上知道测量得到$|0\rangle$和$|1\rangle$ 的概率都是1/2。我们可以把这个测量过程看作是一种特殊的制备方式：制备$|0\rangle$ 和$|1\rangle$ 的混态，概率各为1/2（实际上这是一个最大混态，后面会讲到具体定义）。

我们还可以把上面这个例子放到一个更具体的模型中，假如Alice和Bob要进行一次博弈，规则如下：Bob发送给Alice 一个量子态$|+\rangle$，Alice用σ_z算子来测量该量子态，然后将测量后的量子态发送给Bob，但不告诉Bob测量结果是什么且不允许Bob测量它，如果Bob正确猜出测量结果，那么Bob获胜，否则Alice获胜。可以发现在这个模型中，双方获胜的概率严格为1/2（如果双方都诚实）。这个例子中，Bob关于该量子态唯一的信息仅为1/2的概率$|0\rangle$或$|1\rangle$。这就引出一个有趣的问题：我们能不能用一个统一的数学形式来描述纯态与混态呢？答案是：可以的，密度算子可以统一纯态与混态的表示形式。

2 密度算子

我们可以注意到，纯态是一种特殊的混态：如果混态$\{p_i, |\psi_i\rangle\}_{i=1}^N$满足$N = 1$，则$p_1 \equiv 1$，也就是以概率1地制备$|\psi_1\rangle$。这就暗示了我们可以如下定义量子态的形式：

$$\rho \equiv \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i| \tag{2.1}$$

上式中，我们省略了求和范围，概率p_i满足$\sum_i p_i = 1$，此即为密度算子的数学定义（密度算子这种定义形式是有更深的数学原因的，我们以后会慢慢了解）。

下面我们来看一看密度算子的一般性质：

(1) 首先它是一个矩阵，如果一个量子系统的维度为d，那么对应的密度算子是$d \times d$维的矩阵。具体地，如果系综是$\{p_i, |\psi_i\rangle \in C^d\}_{i=1}^N$，那么

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i| \in C^{d\times d} \tag{2.2}$$

特别地，如果系综是纯态（$N = 1$），那么其密度算子可以简单地写为

$$\rho = |\psi_1\rangle \langle\psi_1| \tag{2.3}$$

(2) 其次，我们可以直接验证密度算子是厄密的（Hermitian）：

$$\rho^\dagger = \left(\sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i|\right)^\dagger = \sum_i p_i^\dagger |\psi_i\rangle \langle\psi_i| = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i| = \rho \tag{2.4}$$

这里我们用到了$(|\psi\rangle \langle\varphi|)^\dagger = |\varphi\rangle \langle\psi|$，且概率$p_i$是实数，满足$p_i^\dagger = p_i$。既然密度算子$\rho$是厄密的，那么必然存在谱分解的表示形式：

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i| \equiv \sum_j \lambda_j |j\rangle \langle j| \tag{2.5}$$

上式等式最后一项代表ρ的谱分解，其中$|j\rangle$是属于本征值λ_j的本征态。需要指出的是，虽然密度算子的定义形式与谱分解本身很相似，但二者通常是不同的。例如，混态$p_1 = 1/4, |\psi_1\rangle = |0\rangle, p_2 = 3/4, |\psi_2\rangle = |+\rangle$，可以很快验证，二者表达形式不同。二者归根结底不同的原因是：谱分解中属于不同本征值的本征态是相互正交的，而混态中的不同状态不一定是彼此正交的！密度算子的谱分解形式会在量子信息和量子计算中反复出现，是一个极其重要的数学工具。

(3) 接下来，我们会看到密度算子还是非负定算子（positive operators），即$\rho \geq 0$，这是很容易验证的： 对于任意给定的态$|\psi\rangle$，都有

$$\langle\psi| \rho |\psi\rangle = \langle\psi| \left(\sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i|\right) |\psi\rangle = \sum_i p_i |\langle\psi|\psi_i\rangle|^2 \geq 0 \tag{2.6}$$

上式用到了内积的一般性质：$\langle\psi|\varphi\rangle^* = \langle\varphi|\psi\rangle$

练习 1 试证明任何算子A都可以表为$B + iC$的形式，其中B, C均为厄密算子，这里i是虚数单位。

证明：（构造性证明）

给定任意算子A，构造

$$B = \frac{A + A^\dagger}{2}, C = \frac{A - A^\dagger}{2i} \tag{2.7}$$

显然

$$B^\dagger = B, C^\dagger = C$$

即B, C都是厄密算子，且满足

$$B + iC = A \tag{2.8}$$

证毕。 □

练习 2 试证明非负定算子A都是厄密算子。

证明：

由练习1我们可知A可写为$A = B + iC$，其中B, C为厄密算子。由于厄密算子存在谱分解：

$$B = \sum_{k=1}^{m} \lambda_k |b_k\rangle \langle b_k|, C = \sum_{l=1}^{n} \mu_l |c_l\rangle \langle c_l| \tag{2.9}$$

这里$|b_k\rangle$和$|c_l\rangle$是分别属于本征值λ_k和μ_l的本征态，m和n的值可能不同。

对于任意给定的态$|\psi\rangle$，$\langle\psi|A|\psi\rangle$可以表为：

$$\begin{aligned}\langle\psi|A|\psi\rangle &= \langle\psi|(B + iC)|\psi\rangle \\ &= \langle\psi| \left(\sum_{k=1}^{m} \lambda_k |b_k\rangle \langle b_k| + i\sum_{l=1}^{n} \mu_l |c_l\rangle \langle c_l|\right) |\psi\rangle \\ &= \sum_{k=1}^{m} \lambda_k |\langle\psi|b_k\rangle|^2 + i\sum_{l=1}^{n} \mu_l |\langle\psi|c_l\rangle|^2\end{aligned} \tag{2.10}$$

由厄密算子的性质知，B, C的本征值均为实数（回忆上次整理的厄密算子的性质），即$\lambda_k, \mu_j \in R$，又因$|\langle\psi|\varphi\rangle|^2 \geq 0$，于是有

$$\sum_{k=1}^{m} \lambda_k \left|\langle\psi|b_k\rangle\right|^2 \in R, \sum_{l=1}^{n} \mu_l \left|\langle\psi|c_l\rangle\right|^2 \in R \tag{2.11}$$

可以先令

$$\sum_{k=1}^{m} \lambda_k \left|\langle\psi|b_k\rangle\right|^2 = \lambda, \sum_{l=1}^{n} \mu_l \left|\langle\psi|c_l\rangle\right|^2 = \mu \tag{2.12}$$

则$\langle\psi|A|\psi\rangle$可整理为

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \lambda + i\mu \tag{2.13}$$

由于A是非负定算子，即

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \lambda + i\mu \geq 0 \tag{2.14}$$

上式成立的唯一条件是

$$\mu = \sum_{l=1}^{n} \mu_l \left|\langle\psi|c_l\rangle\right|^2 = 0 \tag{2.15}$$

由于上式对于任意态$|\psi\rangle$都成立，故有且仅有$\mu_l = 0, l = 1, 2, ..., n$时上式恒成立，这意味着

$$C \equiv \mathbf{0} \tag{2.16}$$

式中**0**代表零算子，所以非负定算子A又可表示为

$$A = B + iC = B \tag{2.17}$$

是厄密算子，证毕。 □

(4) 为叙述下面几个性质，我们需要熟悉矩阵的迹（Matrix's trace）的概念：对于方阵$A \in C^{d\times d}$，其矩阵的迹定义为

$$tr\left(A\right) \equiv \sum_{i=1}^{d} a_{ii} \tag{2.18}$$

这里a_{ii}是矩阵A对角线上的元素，有的文献中将迹表为$Tr(A)$或$T(A)$等。矩阵迹的应用在量子信息方面十分广泛，其本身也有许多有趣的性质。这里先用迹的四个非常简单的性质：

$$\begin{aligned} &tr\left(z\right) = z \\ &tr\left(A^T\right) = tr\left(A\right) \\ &tr\left(AB\right) = tr\left(BA\right) \\ &tr\left(aA + bB\right) = a \cdot tr\left(A\right) + b \cdot tr\left(B\right) \end{aligned} \tag{2.19}$$

第一个性质可以视为定义，标量$z \in C$可以视为一个1×1的矩阵，它的迹仅为其自身。

第二个性质非常直观：转置不改变对角线上的元素位置，但共轭转置后迹可能会不同，厄密算子除外。

第三个性质也很简单，设$A \in C^{m \times n}, B \in C^{n \times m}$, 易知$AB$和$BA$的矩阵元素分别为

$$(AB)_{i,j} = \sum_{k=1}^{n} a_{i,k} b_{k,j}, (BA)_{i,j} = \sum_{k=1}^{m} b_{i,k} a_{k,j} \tag{2.20}$$

上式$a_{i,j}, b_{i,j}$分别为矩阵A和B第i行j列的元素，$(AB)_{i,j}$是矩阵AB第i 行j 列的元素，$(BA)_{i,j}$类似。由上式可写出

$$\begin{aligned} tr\left(AB\right) &= \sum_{i=1}^{m} \sum_{k=1}^{n} a_{i,k} b_{k,i} \\ tr\left(BA\right) &= \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{m} b_{i,k} a_{k,i} \end{aligned} \tag{2.21}$$

交换一下第二个等式的指标，即可发现$tr\left(AB\right) = tr\left(BA\right)$。特别需要提醒的是：这个性质不要求$A, B$是同型矩阵，只要$AB$和$BA$满足矩阵运算即可！

第四个性质可以用基本的矩阵加减运算等性质直接验证（这里从略）。

下面回到密度算子的性质上，对于任意密度算子ρ都有：

$$tr\left(\rho\right) = 1 \tag{2.22}$$

证明：

$$tr\left(\rho\right) = tr\left(\sum_i p_i \left|\psi_i\right\rangle \left\langle\psi_i\right|\right) \tag{2.23}$$

首先利用式（2.19）第四个性质：

$$tr\left(\rho\right) = \sum_i p_i tr\left(\left|\psi_i\right\rangle \left\langle\psi_i\right|\right) \tag{2.24}$$

再利用式（2.19）第三个性质：

$$tr\left(\rho\right) = \sum_i p_i tr\left(\left\langle\psi_i|\psi_i\right\rangle\right) \tag{2.25}$$

利用式（2.19）第一个性质：

$$tr\left(\rho\right) = \sum_i p_i \left\langle\psi_i|\psi_i\right\rangle \tag{2.26}$$

注意到量子态都是单位矢量，即

$$\left\langle\psi_i|\psi_i\right\rangle \equiv 1 \tag{2.27}$$

所以得到
$$tr\left(\rho\right)=\sum_{i}p_{i}=1 \tag{2.28}$$
最后一项是密度算子定义要求的概率归一特性。 同样的思路，利用式(2.5)我们还可以发现：
$$tr\left(\rho\right)=\sum_{j}\lambda_{j}=1 \tag{2.29}$$
也就是说，密度算子的所有本征值之和为1。

如果上面这个性质不是很有意思的话，那么下面的这个性质会让你发现迹的一些强大之处：
$$tr\left(\rho^{2}\right)\leq 1 \tag{2.30}$$
当且仅当ρ为纯态时，取等号。这条性质经常用来检验系统是否是纯态。

证明： 设密度算子的谱分解形式为
$$\rho=\sum_{j}\lambda_{j}\left|j\right\rangle\left\langle j\right|$$
可以立刻得到
$$tr\left(\rho^{2}\right)=tr\left(\sum_{i}\lambda_{i}\left|i\right\rangle\left\langle i\right|\sum_{j}\lambda_{j}\left|j\right\rangle\left\langle j\right|\right) \tag{2.31}$$
上式i,j的指标范围相同，为了易于区分，我们使用了不同的记号，这在后面的分析中会反复用到，通常上式中的连续求和可以写为更紧凑的形式
$$tr\left(\rho^{2}\right)=tr\left(\sum_{i,j}\lambda_{i}\lambda_{j}\left|i\right\rangle\left\langle i\right|\left|j\right\rangle\left\langle j\right|\right) \tag{2.32}$$
上式中求和符号内的项$\left|i\right\rangle\left\langle i\right|\left|j\right\rangle\left\langle j\right|$实际上是四个矩阵相乘，即$d\times 1$维、$1\times d$维、$d\times 1$ 和 $1\times d$相乘（我们假定本征态$\left|i\right\rangle$是d维的），矩阵乘法满足结合律，即
$$(AB)C=A(BC) \tag{2.33}$$
于是我们可以先对$\left|i\right\rangle\left\langle i\right|\left|j\right\rangle\left\langle j\right|$中的第二三项进行计算，这是因为$\left\langle i\right|\left|j\right\rangle\equiv\left\langle i|j\right\rangle$ 正是两个本征态的内积！回忆上次整理的内容：内积是一个标量，所以可以提到矩阵的前面，即
$$\left|i\right\rangle\left\langle i\right|\left|j\right\rangle\left\langle j\right|=\left|i\right\rangle\left\langle i|j\right\rangle\left\langle j\right|=\left\langle i|j\right\rangle\left|i\right\rangle\left\langle j\right| \tag{2.34}$$
之前提到，对于厄密算子而言，属于不同本征值的本征态必然正交，于是上式可写为
$$\left\langle i|j\right\rangle\left|i\right\rangle\left\langle j\right|=\delta_{i,j}\left|i\right\rangle\left\langle j\right| \tag{2.35}$$
这里$\delta_{i,j}$定义如下
$$\delta_{i,j}=\begin{cases}1 & i=j\\ 0 & i\neq j\end{cases} \tag{2.36}$$

将式（2.35）带入式（2.32）中，我们可以获得

$$\begin{aligned} tr\left(\rho^2\right) &= tr\left(\sum_{i,j} \lambda_i \lambda_j \delta_{i,j} \left|i\right\rangle \left\langle j\right|\right) \\ &= \sum_{i,j} \lambda_i \lambda_j \delta_{i,j} tr\left(\left|i\right\rangle \left\langle j\right|\right) \\ &= \sum_i \lambda_i^2 tr\left(\left|i\right\rangle \left\langle i\right|\right) \\ &= \sum_i \lambda_i^2 \end{aligned} \tag{2.37}$$

要完成证明，我们还需要知道密度算子的另一个性质：密度算子的所有本征值$\{\lambda_i\}$都满足

$$0 \leq \lambda_i \leq 1 \tag{2.38}$$

很容易证明上面这个结论：由于ρ是厄密的，设其可写为式（2.5）所示的谱分解形式，则对于任意本征态$\left|i\right\rangle$ 都有

$$\left\langle i\right|\rho\left|i\right\rangle = \left\langle i\right|\left(\sum_j \lambda_j \left|j\right\rangle \left\langle j\right|\right)\left|i\right\rangle = \lambda_i \geq 0 \tag{2.39}$$

最后一步用到了密度算子的非负定性质，而式(2.29)已经表明了

$$\sum_i \lambda_i = 1$$

显然有

$$\lambda_i \leq 1 \tag{2.40}$$

现在由$0 \leq \lambda_i \leq 1$可知，

$$\lambda_i^2 \leq \lambda_i \tag{2.41}$$

将上面的结果代入到式（2.37）中，我们就可以得到

$$\begin{aligned} tr\left(\rho^2\right) &= \sum_i \lambda_i^2 \\ &\leq \sum_i \lambda_i \\ &= 1 \end{aligned} \tag{2.42}$$

根据前面的证明，可以发现等号成立的情况是

$$\sum_i \lambda_i^2 = \sum_i \lambda_i \tag{2.43}$$

在约束条件

$$\sum_i \lambda_i = 1, 0 \leq \lambda_i \leq 1$$

下，当且仅当ρ仅有一个非零本征值$\lambda = 1$时，等式成立。至此，这个性质实际上已经证明完成了。或许你可能会有些疑问：前面提到的是当且仅当ρ是纯态时，$tr\left(\rho^2\right) = 1$，而这里证明的是当且仅当$\rho$仅有一个非零本征值$\lambda = 1$时，等式成立。实际上这两个说法是等价的：式（2.3）说明纯态$|\psi\rangle$可以表为

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$$

可以发现ρ满足

$$\rho|\psi\rangle = |\psi\rangle\langle\psi||\psi\rangle = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle = |\psi\rangle = 1\cdot|\psi\rangle \tag{2.44}$$

即

$$\rho|\psi\rangle = 1\cdot|\psi\rangle$$

这正是数学上ρ满足的特征方程，显然$|\psi\rangle$是属于特征值$\lambda = 1$的特征向量。到这里，我们似乎只说明了纯态满足“有且仅有一个非零本征值$\lambda = 1$”，而没有说明所有满足“有且仅有一个非零本征值$\lambda = 1$”的密度算子都是纯态，会不会存在某个混态也满足这个条件？答案是否定的，这里涉及到矩阵的秩的一个应用，一般情况下矩阵的非零特征值个数与矩阵的秩并无特殊联系，但是对于厄密算子而言非零特征值个数等于矩阵的秩（这个就不证明了，要不越说越远了，有兴趣的话可以试着证明一下）。由于混态中必然存在线性无关的态（思考一下为什么？），所以密度算子的秩一定大于1，导致其非零特征值个数超过1，因此混态不可能满足条件。

前面花了很多时间来说明密度算子的一些基本性质，我觉得还是很有用的，能让我们熟悉一下矩阵的迹和厄密算子的谱分解等等的应用，当然这只是冰山一角，还有许多数学工具还没有介绍。下面就先严格地用密度算子来描述基本原理吧。

3 基本假设

(1) 状态空间假设

实际上，前面的叙述已经叙述了这个假设了：任何孤立的量子系统都联系着一个Hilbert空间，可以用一个对应的密度算子来完全描述，这里的“对应”是指，如果Hilbert空间是d维的，则密度算子是$d\times d$维的。密度算子的符号一般用ρ, σ, τ 等表示。系统的密度算子满足非负定，迹归一。具体地，如果量子系统是$\{p_i, |\psi_i\rangle\}$，则系统的密度算子是

$$\rho \equiv \sum_i p_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i| \tag{3.1}$$

由于纯态也满足上式，所以不妨将$|\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \rho_i$，于是上式可重新表述为

$$\rho \equiv \sum_i p_i\rho_i \tag{3.2}$$

上式的物理含义是，以概率p_i来制备量子态ρ_i，尽管只是改变了写法，但是密度算子的定义允许我们考虑ρ_i是混态的情况！也就是说以概率p_i制备的量子态ρ_i也是一个混态

$$\rho_i = \sum_j p_{j|i} \rho_{j|i}$$

这里$p_{j|i}$是在量子态ρ_i的条件下，系统被制备为$\rho_{j|i}$的概率。同样，$\rho_{j|i}$之中可能又包含其它的混态！这是一种非常简洁的表述方式，使得我们无需考虑系统内在的复杂情况。

(2) **演化假设**

孤立系统的演化过程由一个酉算子U来描述，设系统在没有经历U之前的状态为ρ，则经过该酉演化后系统的状态为

$$\rho' \equiv U \rho U^\dagger \tag{3.3}$$

这里我们用加了撇号的ρ来表示演化后的系统状态。上式很容易理解：如果给定系综$\{p_i, |\psi_i\rangle\}$和一个酉算子U，设

$$|\psi_i'\rangle = U |\psi_i\rangle \tag{3.4}$$

则系统在该酉算子的作用下以概率p_i演变为$|\psi_i'\rangle$，所以演化后的系统的密度算子为

$$\rho' = \sum_i p_i |\psi_i'\rangle \langle\psi_i'| = \sum_i p_i U |\psi_i\rangle \langle\psi_i| U^\dagger \tag{3.5}$$

上式中酉算子U是与状态无关的量，可以提到求和符号外：

$$\rho' = \sum_i p_i U |\psi_i\rangle \langle\psi_i| U^\dagger = U \left(\sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i| \right) U^\dagger = U \rho U^\dagger \tag{3.6}$$

这正是式（3.3）所描述的状态！

(3) **测量假设**

同样我们先描述投影测量，稍后再扩展到一般测量。给定任意量子态ρ和一测量算子M，由于投影测量中的测量算子都是厄密算子（如果忘记了可以看上次的东西），所以存在谱分解：

$$M = \sum_i \lambda_i P_i \tag{3.7}$$

考虑到可能存在简并的情形，所以上式直接写成了本征值λ_i和本征子空间P_i的形式。

那么测量得到本征值λ_i的结果的概率为

$$p(i) = tr\left(P_i^\dagger P_i \rho\right) = tr\left(P_i \rho\right) \tag{3.8}$$

上式用到了本征子空间P_i的投影性质：$P_i^\dagger = P_i$ 且$P_i^2 = P_i$（如果不是很清楚了，再复习一下投影算子的基本性质）。

测量得到本征值λ_i后系统的状态为

$$\rho_i' = \frac{P_i \rho P_i^\dagger}{tr\left(P_i \rho\right)} \tag{3.9}$$

根据式（3.7）可能的测量结果有$\lambda_1, \lambda_2, \ldots$，于是系统的状态为

$$\rho' = \sum_i p(i) \rho_i' = \sum_i \frac{P_i \rho P_i^\dagger}{tr\left(P_i \rho\right)} \tag{3.10}$$

将式(3.8)和(3.9)代入上式可得

$$\rho' = \sum_i P_i \rho P_i^\dagger \tag{3.11}$$

上面这些推导也很直观：如果给定系综$\{p_i, |\psi_i\rangle\}$和测量算子M，其中M 满足式（3.7）。回忆上次整理的投影测量假设，对于量子态$|\psi_i\rangle$，测得λ_m的概率为

$$p(m|i) = \langle\psi_i|P_m^\dagger P_m|\psi_i\rangle = \langle\psi_i|P_m|\psi_i\rangle \tag{3.12}$$

这里$p(m|i)$表示在状态$|\psi_i\rangle$的条件下，得到结果λ_m的概率。显然上式可以写为

$$p(m|i) = tr\left(\langle\psi_i|P_m^\dagger P_m|\psi_i\rangle\right) = tr\left(\langle\psi_i|P_m|\psi_i\rangle\right) \tag{3.13}$$

上式成立的原因是，概率是一个标量。再利用前面提到迹的第三个性质：

$$p(m|i) = tr\left(P_m^\dagger P_m \left|\psi_i\right\rangle \left\langle\psi_i\right|\right) = tr\left(P_m \left|\psi_i\right\rangle \left\langle\psi_i\right|\right) \tag{3.14}$$

利用概率论的全概率公式，对于系综$\{p_i, |\psi_i\rangle\}$而言，测得λ_m的概率为

$$\begin{aligned} p(m) &= \sum_i p_i p(m|i) \\ &= \sum_i p_i tr\left(P_m \left|\psi_i\right\rangle \left\langle\psi_i\right|\right) \\ &= tr\left(P_m \sum_i p_i \left|\psi_i\right\rangle \left\langle\psi_i\right|\right) \\ &= tr\left(P_m \rho\right) \end{aligned} \tag{3.15}$$

此即前面提到的式（3.8）！接下来的问题是：对于系综，测得某一个结果后系统的状态是什么？

根据测量假设，如果系统的态是$|\psi_i\rangle$，测得λ_m后，系统的状态变为(如果不熟悉了请回顾上次的内容)

$$|\psi_{i|m}'\rangle = \frac{P_m \left|\psi_i\right\rangle}{\sqrt{\langle\psi_i|P_m^\dagger P_m|\psi_i\rangle}} = \frac{P_m \left|\psi_i\right\rangle}{\sqrt{\langle\psi_i|P_m|\psi_i\rangle}} \tag{3.16}$$

这里$|\psi'_{i|m}\rangle$表示给定初始态为$|\psi_i\rangle$且在测得λ_m的条件下系统的状态。将该式重写为密度算子的形式：

$$\rho'_{i|m} = |\psi'_{i|m}\rangle \langle\psi'_{i|m}| = \frac{P_m |\psi_i\rangle \langle\psi_i| P_m^\dagger}{\langle\psi_i|P_m|\psi_i\rangle} = \frac{P_m |\psi_i\rangle \langle\psi_i| P_m^\dagger}{tr\left(P_m |\psi_i\rangle \langle\psi_i|\right)} \tag{3.17}$$

因此，对于系综而言，测得λ_m后，系统的状态变为

$$\begin{aligned}\rho'_m &= \sum_i p(i|m)\rho'_{i|m} = \sum_i \frac{p(m|i)p_i}{p(m)}\rho'_{i|m} \\ &= \sum_i \frac{p(m|i)p_i}{p(m)} \frac{P_m |\psi_i\rangle \langle\psi_i| P_m^\dagger}{tr\left(P_m |\psi_i\rangle \langle\psi_i|\right)}\end{aligned} \tag{3.18}$$

上式用到了贝叶斯公式：$p(m|i)p_i = p(i|m)p(m)$。注意，这里p_i是系综中各状态的概率分布，由系综本身给出；$p(m|i)$是给定状态$|\psi_i\rangle$测得本征值λ_m的概率，由式（3.14）给出；而$p(m)$ 是测得某一本征值λ_m 的概率，由式（3.15）给出。现将式（3.14）代入上式可得

$$\begin{aligned}\rho'_m &= \sum_i \frac{tr\left(P_m |\psi_i\rangle \langle\psi_i|\right) p_i}{p(m)} \frac{P_m |\psi_i\rangle \langle\psi_i| P_m^\dagger}{tr\left(P_m |\psi_i\rangle \langle\psi_i|\right)} \\ &= \sum_i p_i \frac{P_m |\psi_i\rangle \langle\psi_i| P_m^\dagger}{p(m)} \\ &= \frac{1}{p(m)} \sum_i p_i P_m |\psi_i\rangle \langle\psi_i| P_m^\dagger \\ &= \frac{1}{p(m)} P_m \left(\sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i|\right) P_m^\dagger \\ &= \frac{P_m \rho P_m^\dagger}{p(m)}\end{aligned} \tag{3.19}$$

最后将式(3.15)代入上式可得到

$$\rho'_m = \frac{P_m \rho P_m^\dagger}{p(m)} = \frac{P_m \rho P_m^\dagger}{tr\left(P_m \rho\right)} \tag{3.20}$$

可以发现，上式正是前述的式（3.9）！由于存在许多本征值λ_m，每一个出现的概率为$p(m) = tr\left(P_m \rho\right)$，故更广义的情况下，测量系综后系统的状态是

$$\rho' = \sum_m p(m)\rho'_m = \sum_m tr\left(P_m \rho\right) \frac{P_m \rho P_m^\dagger}{tr\left(P_m \rho\right)} = \sum_m P_m \rho P_m^\dagger \tag{3.21}$$

此即式(3.11)!

至此，用密度算子来描述投影测量的工作已经全部叙述完了。上面的推导已看出密度算子与通常的态矢量在描述测量时是完全等价的，且密度算

子用来描述混态更方便。上面的分析中涉及的求和指标过多，我已经尽量避免了符号的混乱，但是可能还是有些地方会产生误解，如果有不清楚的地方可以指出。另外，各个符号代表的含义可能需要仔细思考一下才能理解。

在介绍最后一个复合系统假设前，有必要说明一下混态的一种特殊情况——最大混态。对于一个d维的量子系统，如果系统的密度算子是如下形式，则称之为最大混态：

$$\rho = \frac{I}{d} \tag{3.22}$$

这里$I \in C^{d\times d}$是单位算子。容易证明，如果等概率地制备一组正交完备态，则此时的系综即是最大混态。例如等概率地制备$|0\rangle$和$|1\rangle$，其密度算子如下

$$\rho = \frac{|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|}{2} = \frac{I}{2}$$

又例如等概率地制备$|+\rangle$和$|-\rangle$，则系统的密度算子为

$$\rho = \frac{|+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -|}{2} = \frac{I}{2}$$

证明：

设量子系统的维度为d，则至多存在d个线性无关的态，因此一组正交完备态的个数为d，任设一组正交完备态$\{|i\rangle\}_{i=1}^{d}$，其中$\langle i|j\rangle = \delta_{i,j}$，关于$\delta_{i,j}$的定义见式(2.36)。 如果等概率地制备这些态，即意味着每个态出现的概率均为$1/d$，那么系统的密度算子表示为

$$\rho = \sum_{i=1}^{d} \frac{1}{d} |i\rangle\langle i| = \frac{1}{d}\sum_{i=1}^{d} |i\rangle\langle i| \tag{3.23}$$

另设一量子态$|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{d} c_j |j\rangle \tag{3.24}$$

由于$\{|i\rangle\}_{i=1}^{d}$是正交完备态，故任何量子态$|\psi\rangle$都可唯一地做如上的展开。可以发现

$$\begin{aligned}
\left(\sum_i |i\rangle\langle i|\right)|\psi\rangle &= \left(\sum_i |i\rangle\langle i|\right)\left(\sum_{j=1}^{d} c_j |j\rangle\right) \\
&= \sum_{i,j=1}^{d} c_j |i\rangle\langle i| |j\rangle \\
&= \sum_{i,j=1}^{d} c_j \delta_{i,j} |i\rangle \\
&= \sum_{j=1}^{d} c_j |j\rangle = |\psi\rangle
\end{aligned} \tag{3.25}$$

同理有

$$\langle\psi|\left(\sum_i |i\rangle\langle i|\right) = \langle\psi| \tag{3.26}$$

上式说明了对于任何态$|\psi\rangle$，左乘或者右乘算子$\sum_i |i\rangle\langle i|$均为其本身，满足此条件的算子有且仅有单位算子$I$，因此

$$\rho = \frac{1}{d}\sum_{i=1}^{d} |i\rangle\langle i| = \frac{I}{d} \tag{3.27}$$

证毕。 □

这里自然会有一个问题：最大混态的制备有没有其他的方式？答案是肯定的，这在量子纠缠里是一个很明显的例子（以后有机会再叙述）。最大混态在研究量子纠缠和量子信息时具有非常重要的地位。

另外你可能会注意到：两个不同的系综可能会产生相同的密度算子！这在前面的例子中已经体现了：等概率地制备$|0\rangle, |1\rangle$ 与等概率地制备$|+\rangle, |-\rangle$其密度算子均为$I/2$。如果感兴趣的话，你可以尝试着证明一下在什么情况下，两个系综会产生相同的密度算子？此问题的证明可能有些困难，如果不想证明可以略去。

(4) **复合系统假设**

最后来重新叙述复合系统假设：设A和B是两个量子系统（维度不一定相同），其中系统A和B的密度算子分别为ρ_A和ρ_B，则复合系统AB的密度算子为

$$\rho_{AB} = \rho_A \otimes \rho_B \tag{3.28}$$

这里下角标代表系统，有的文献中将指标放到上方，即ρ^A和ρ^B等等。假设系统A的量子态为$|a\rangle$，而系统B的态为$|b\rangle$，则A和B的密度算子分别为

$$\rho_A = |a\rangle\langle a|, \rho_B = |b\rangle\langle b| \tag{3.29}$$

所以复合系统的密度算子又可以写为

$$\rho_{AB} = \rho_A \otimes \rho_B = (|a\rangle\langle a|) \otimes (|b\rangle\langle b|) \tag{3.30}$$

另外回顾上次的内容，提到过一个重要的数学公式：

$$(A \otimes B)(|a\rangle \otimes |b\rangle) = (A|a\rangle) \otimes (B|b\rangle) \tag{3.31}$$

这里$A \in C^{m\times n}, B \in C^{k\times l}, |a\rangle \in C^{n\times 1}, |b\rangle \in C^{l\times 1}$。可以简单地验证一下等式两侧的维度：等式左边，首先A与B直积的结果是一个$mk \times nl$维的矩阵，而$|a\rangle$与$|b\rangle$直积的结果是一个$nl \times 1$维的矢量，它们再做矩阵乘法运算得到的是一个$mk \times 1$的矢量。等式右边，首先A 与$|a\rangle$做矩阵乘法运算，其结果是一个$m \times 1$维的矢量，同理，B与$|b\rangle$做矩阵乘法运算后得到一个$k \times 1$维的矢量，二者再做直积，得到的矢量维度为$mk \times 1$（如果忘记了直积的定义及一般性质，请回顾上次的内容）。

将上式应用到式（3.30）中，可以得到

$$\rho_{AB}=(|a\rangle\langle a|)\otimes(|b\rangle\langle b|)=(|a\rangle\otimes|b\rangle)(\langle a|\otimes\langle b|)=|a\rangle|b\rangle\langle a|\langle b| \tag{3.32}$$

上式中$|a\rangle|b\rangle$是$|a\rangle\otimes|b\rangle$的简写，代表的是直积，而非普通的矩阵相乘！我们甚至可以把它简写为$|a,b\rangle$等等，这种记号在量子计算中很普遍。

另一方面，若没有忘记之前的复合系统假设的话，当系统A和B的量子态分别为$|a\rangle$和$|b\rangle$时，则复合系统AB的状态为

$$|a\rangle\otimes|b\rangle=|a\rangle|b\rangle \tag{3.33}$$

显然此时复合系统的密度算子为

$$\rho_{AB}=(|a\rangle|b\rangle)(|a\rangle|b\rangle)^{\dagger}=|a\rangle|b\rangle\langle a|\langle b| \tag{3.34}$$

这里特别需要注意的是：

$$(|a\rangle|b\rangle)^{\dagger}=\langle a|\langle b|=\langle a,b| \tag{3.35}$$

这不同于两个矩阵相乘的情况：

$$(AB)^{\dagger}=B^{\dagger}A^{\dagger} \tag{3.36}$$

上述的分析只是关于两个纯态的复合系统，如果是混态的呢？结论是同样成立！假设系统A为系综$\{p_i,|\psi_i\rangle\}$，而系统B为系综$\{q_j,|\varphi_j\rangle\}$，同样，两个系统的维度可能不同，且$i,j$的指标范围可能也不同。很容易理解：复合系统以概率$p_iq_j$出现状态$|\psi_i\rangle|\varphi_j\rangle$，因此复合系统是系综 $\{p_iq_j,|\psi_i\rangle|\varphi_j\rangle\}$，可以马上写出密度算子是

$$\begin{aligned}\rho_{AB}&=\sum_{i,j}p_iq_j|\psi_i\rangle|\varphi_j\rangle\langle\psi_i|\langle\varphi_j|=\\&=\sum_i p_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i|\otimes\sum_j q_j|\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|\\&=\rho_A\otimes\rho_B\end{aligned} \tag{3.37}$$

同样满足式(3.28)！ 至此我们已经用密度算子描述了所有的基本假设，可见二者是等价的。密度算子不仅在数学上有着独特的优势，而且也能够处理纯态与混态的情况，更重要的是密度算子可以为我们提供更深刻的洞察力，比如单量子比特的布洛赫球面（Bloch Sphere）表示就是基于密度算子的，著名的施密特分解（Schmidt Decomposition）也是用密度算子来描述的，不同于经典的香农信息，量子信息的定义也是采用密度算子的形式，等等，总之，密度算子是非常重要的理论分析工具。

另外，如果没有忘记上次写的内容的话，提到过四个特殊的双量子比特系

统——贝尔态(Bell States)

$$\begin{aligned}|\phi^+\rangle &= \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}\\ |\phi^-\rangle &= \frac{|00\rangle - |11\rangle}{\sqrt{2}}\\ |\psi^+\rangle &= \frac{|01\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}}\\ |\psi^-\rangle &= \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}}\end{aligned} \tag{3.38}$$

它们就是著名的两粒子最大纠缠态，上次还提到他们构成C^4空间下的一组正交完备的态。暂时先不用考虑是什么”最大“纠缠，我们先定义纠缠态的概念： 如果给定一个复合系统AB，其状态为$|a\rangle\,|b\rangle$，那么我们可以很快写出复合系统的密度算子的直积形式：

$$\rho_{AB} = \rho_A \otimes \rho_B$$

其中$\rho_A = |a\rangle\langle a|\,, \rho_B = |b\rangle\langle b|$。 但是如果给定我们复合系统是一个纠缠态，比如$|\phi^+\rangle$，那么你可以把它写为两个密度算子的直积形式吗？答案是不可能的！正式地讲，纠缠态的定义很简单——

纠缠态

如果复合系统不能够被表示为几个子系统的密度算子的直积形式，则该符合系统就是纠缠态。

然而定义简单，但是实际上判定一个系统是否是纠缠的却很棘手。一个两系统复合态的纠缠判据是：施密特分解。如果感兴趣可以参考Nielsen的《量子信息和量子计算》，或者有时间再慢慢整理。

至于刚才所说的”最大“纠缠，涉及到一个纠缠度的概念，两粒子纠缠度已经有了很好的定义，但是多粒子的纠缠仍旧是一个公开问题，甚至多粒子的纠缠判据本身就是一个公开问题！尽管在理论上纠缠的度量等还不完善，但是已有许多基于量子纠缠的重要应用，例如基于纠缠的量子密钥分发，基于纠缠的隐形传输和远程制备，还有上次提到的超密编码等等。这些应用在经典物理中是完全不可能实现的，经典通信中，不可能用1比特来传输2比特的信息，量子超密编码就允许这样的情况；隐形传输可以实现物体不经过物理信道就传输到目的地，简单地说，就是无需发送所要传输的物体，只需要交换双方的信息（包括经典和量子的），就可以让物体在目的地重现，这在经典传输理论中是完全没有道理的，因此有学者认为信息比物质更基础；而基于纠缠的量子密钥分发则可以做到完全地独立于设备的量子密钥分发，其安全性要比传统的BB84协议更强！该协议可以保证在窃听者Eve掌握量子态制备和测量的情况下，双方仍旧可以检验和产生无条件安全的密钥，换句话说，即使是Eve来给Alice和Bob制备量子态，且测量设备也是由Eve 提供的，她可以随意控制这些设备，且允许她有无穷的计算能力，即便如此，协议也可以保证无条件的安全密钥！这在经典密码学中，甚至是BB84协议中都是完全不可能的。简言之，纠缠是一种奇特的量子现象，其潜在的应用非常广泛，基于纠缠的协议层出不穷，是在一个非常值得研究的领域。

这次就先讲到这里吧，最后还没有写出来一般测量假设（尴尬），不过如果对上面讲的这些很熟悉的话，更一般的测量也差不多就是水到渠成了，除此之外所有的量子力学基础都已经讲述完了，更多其它内容我觉得都是关于数学上的东西了，Nielsen那本书上有非常全面的介绍，非常推荐。

P.S.:我好像忘记了提到了布洛赫球面的概念了，有机会再谈吧！如果发现勘误可以告诉我！就以一个练习收尾吧：

练习 3

假设任意一个量子态表示为：

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle \tag{3.39}$$

其中$\theta \in [0, \pi], \varphi \in [0, 2\pi]$。如果定义如下参数：

$$\vec{r} \equiv (\cos\varphi\sin\theta, \sin\varphi\sin\theta, \cos\theta) \tag{3.40}$$

和

$$\vec{\sigma} \equiv (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) \tag{3.41}$$

这里σ_1, σ_2和σ_3就是以前提到过的Pauli算子，在上次我们用σ_x, σ_y 和σ_z来标记的，有时候还会采用X, Y, Z的符号（这在量子计算中经常采用），有时候我们还特别地标记$I = \sigma_0$，这里I是2×2维的单位算子。$\{\sigma_0, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$构成$C^{2\times 2}$空间的一组基。

试证明：

式（3.39）的量子态其密度算子可以写为

$$\rho = \frac{I + \vec{r}\cdot\vec{\sigma}}{2} \tag{3.42}$$

其中，$\vec{r}\cdot\vec{\sigma} \equiv \sum_{i=1}^{3} r_i\sigma_i$。你能发现几何上三维实行向量$\vec{r}$ 代表的是什么吗？你能找出算子σ_x在这个图形上的什么位置上呢？如果给定的是一个单量子比特混态的话，那它一般分布在什么位置上呢？如果是最大混态呢？

这个问题实际上就是有关单量子比特的布洛赫球面表示。