



2.2.1 假设一 (状态空间)

2.2.2 假设二 (演化)

2.2.3 假设三 (量子测量)

2.2.8 假设四 (复合系统)

1. 复合系统
2. 多量子比特
3. 练习



- 假设我们对一个复合系统感兴趣，所谓复合系统就是由两个或更多的不同物理系统构成的系统，那么我们该怎么描述复合系统的态矢呢？第四公设给了我们答案，也就是复合系统的态空间是如何从组分系统(component system)的态空间构成的。

假设 4：复合物理系统的状态空间是从分物理系统状态空间的张量积，若将分系统编号为 1 到 n ，系统的状态 i 被置为 $|\varphi_i\rangle$ ，则整个系统的总状态为 $|\varphi_1\rangle \otimes \cdots \otimes |\varphi_n\rangle$ 。



● 多量子比特

- 两个或多个量子比特系统是单个量子比特系统的张量积，例如两量子比特可处于态

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

- 两量子比特系统是一个4维Hilbert空间， $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ 是构成该空间的一组完备正交基。一个两量子比特态可以处在任意一个基态中，因而也可以处在它们的叠加态中。
- n 量子比特系统是一个 2^n 维Hilbert空间，系统所处的状态是该空间中的一个向量，可以是 2^n 个基态的叠加态



➤ n 量子比特系统的完备正交基可以由 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ 通过张量积运算得到

三量子比特系统： $\{|000\rangle, |001\rangle, |010\rangle, |011\rangle, |100\rangle, |101\rangle, |110\rangle, |111\rangle\}$

为了简单，也常写为： $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle, |5\rangle, |6\rangle, |7\rangle\}$

四量子比特系统写作： $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, \dots, |14\rangle, |15\rangle\}$

➤ 任意 n 量子比特系统的可能状态

$$|\varphi\rangle = \sum_{i=0}^{2^n-1} a_i |i\rangle$$

➤ 量子系统的存储能力正是以这种方式呈指数增长



➤ 两量子比特的计算

$$|\phi_1\rangle = a_1|0\rangle + b_1|1\rangle$$

$$|\phi_2\rangle = a_2|0\rangle + b_2|1\rangle$$

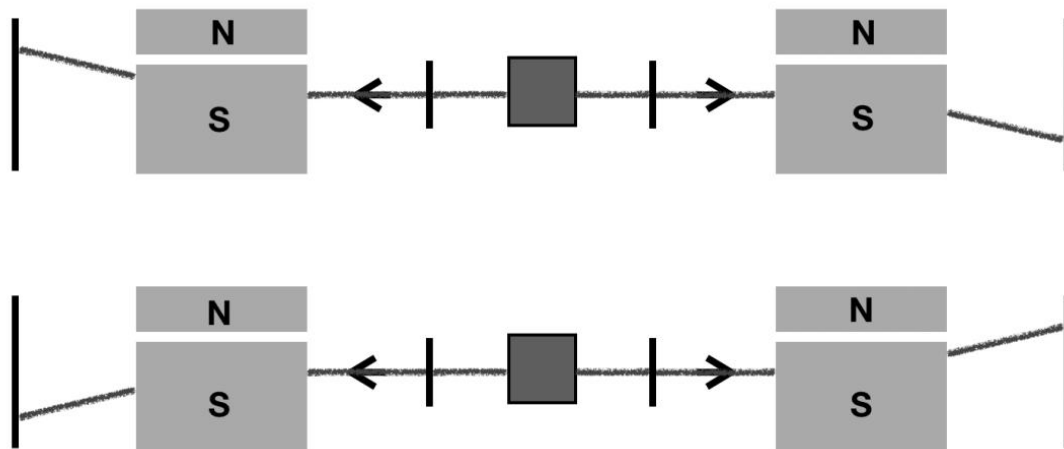
$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= |\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle = (a_1|0\rangle + b_1|1\rangle) \otimes (a_2|0\rangle + b_2|1\rangle) \\ &= a_1a_2|00\rangle + a_1b_2|01\rangle + b_1a_2|10\rangle + b_1b_2|11\rangle \end{aligned}$$

约定在这类直积态中

- ◆ 左边是自旋 1 的态
- ◆ 右边是自旋 2 的态



➤ 双自旋施特恩-格拉赫实验（两量子比特）

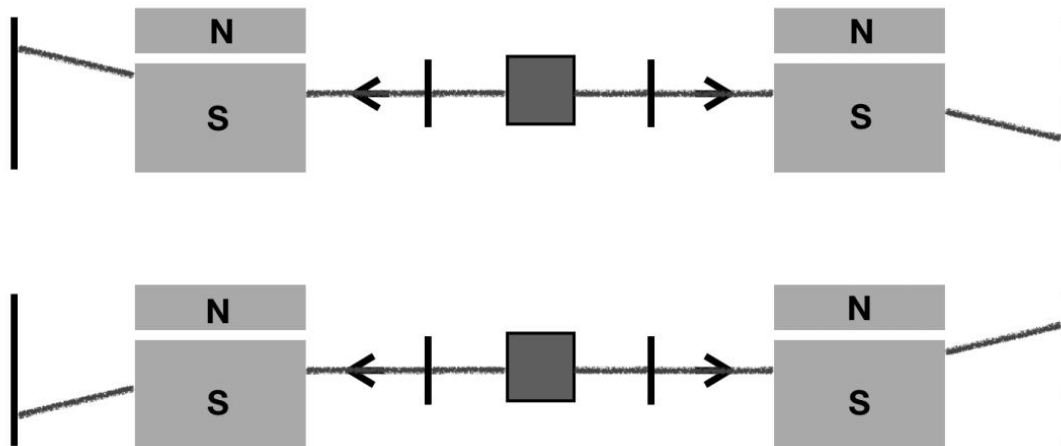


蒸发炉被一个更精巧的装置代替，这个装置能够产生一对一对的自旋：

- ◆ 每对自旋都处于单重态；
- ◆ 两个自旋具有相反的动量，自旋 1 往左飞和自旋 2 往右飞行。
- ◆ 图中示意地描绘了仅有的两种可能观测结果。



➤ 双自旋施特恩-格拉赫实验（两量子比特）



$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle)$$

- ◆ 第一个分量是 $|01\rangle$ ，表示如果自旋 1 处于向上的状态那么自旋 2 处于向下的状态；
- ◆ 第二个分量是 $|10\rangle$ ，表示如果自旋 1 处于向下的状态那么自旋 2 处于向上的状态。

这意味着，在双自旋施特恩-格拉赫实验中，如果粒子源自旋对的产生率很低，以致于每次只有一对自旋通过两侧的非均匀磁场。



➤ 两量子比特的计算

X_2 为自旋2的算符

$$|\phi\rangle = a|00\rangle + b|01\rangle$$

$$\begin{aligned} X_2 |\phi\rangle &= X_2 (a|00\rangle + b|01\rangle) \\ &= a|0\rangle \otimes (X_2 |0\rangle) + b|0\rangle \otimes (X_2 |1\rangle) \\ &= a|01\rangle + b|00\rangle \end{aligned}$$

◆ 自旋1 的算符只作用在自旋 1的态上

◆ 自旋 2 的算符只作用在自旋 2 的态上



Exercise 2.66: 验证对于一个由两个量子比特构成的状态为 $(|00\rangle + |11\rangle)/\sqrt{2}$ 系统的可观测量 $X_1 Z_2$ 的平均值为 0。

◆ 根据我们之前得到的公式，对于可观测量 M 的平均值是 $\langle \varphi | M | \varphi \rangle$ ，所以我们有：

$$\begin{aligned} E(X_1 Z_2) &= \langle \varphi | X_1 Z_2 | \varphi \rangle \\ &= \frac{1}{2} (\langle 00 | + \langle 11 |) X_1 Z_2 (|00\rangle + |11\rangle) \\ &= \frac{1}{2} (\langle 00 | X_1 Z_2 | 00 \rangle + \langle 11 | X_1 Z_2 | 00 \rangle + \langle 00 | X_1 Z_2 | 11 \rangle + \langle 11 | X_1 Z_2 | 11 \rangle) \\ &= \frac{1}{2} (\langle 0 | X_1 | 0 \rangle \langle 0 | Z_2 | 0 \rangle + \langle 1 | X_1 | 0 \rangle \langle 1 | Z_2 | 0 \rangle + \langle 0 | X_1 | 1 \rangle \langle 0 | Z_2 | 1 \rangle + \langle 1 | X_1 | 1 \rangle \langle 1 | Z_2 | 1 \rangle) \end{aligned}$$

■ 经过计算，有 $\langle 0 | X_1 | 0 \rangle = \langle 1 | Z_2 | 0 \rangle = \langle 0 | Z_2 | 1 \rangle = \langle 1 | X_1 | 1 \rangle = 0$ ，带入上式就可得到 $E(X_1 Z_2) = 0$

后边的练习题可自行练习。



2.1 数学基础

2.2 量子力学的假设

2.3 密度算子

1. 密度算子的定义
2. 密度算子的一般性质
3. 约化密度算子

2.4 EPR和Bell不等式



● 密度算子的定义

➤ 我们已经制定了用态矢来描述量子力学的方法。另一个选择是使用密度算符/密度算子 (density operator) 或着密度矩阵 (density matrix) 来描述。在数学上，这两种描述形式是等价的。

➤ 设一个量子系统处在一组态 $|\varphi_i\rangle$ 中的某个态， $|\varphi_i\rangle$ 对应的概率是 p_i 。我们把 $\{p_i, |\varphi_i\rangle\}$ 叫做系综，这个系统的**密度算子定义**为：

$$\rho = \sum_i p_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i|。$$

➤ 密度算符语言提供了一种简便的方式来描述我们尚未完全了解的量子系统。

➤ 可以用密度算符重新描述我们学习过的四个假设。



● 密度算子的一般性质

- 定理 2.5（密度算子的特征）一个算子 ρ 是和某个系统 $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$ 相关联的密度算子，当且仅当它满足如下条件。
 - (1) （迹条件） ρ 的迹等于 1；
 - (2) （半正定条件） ρ 是半正定算子。
- 假设 1：任意孤立物理系统与称之为这系统的状态空间相关联，它是个 Hilbert 空间。系统由作用在状态空间上的密度算子完全描述，密度算子是一个半正定迹为 1 的算子 ρ 。如果量子系统以概率 p_i 处于状态 ρ_i ，则系统的密度算子为 $\sum_i p_i \rho_i$ 。
- 假设 2：封闭量子系统的演化由一个酉变换描述，即系统在时刻 t_1 的状态 ρ 和时刻 t_2 的状态 ρ' 由一个仅依赖于时间 t_1 和 t_2 的酉算子 U 联系， $\rho' = U \rho U^\dagger$ 。



● 密度算子的一般性质

- **假设 3:** 量子测量由一组测量算子 $\{M_m\}$ 描述，这些算子作用在所测量的状态空间上，指标 m 指实验中可能出现的测量结果，如果量子系统在测量前的状态是 ρ ，则得到结果 m 的概率由 $p(m) = \text{tr}(M_m^\dagger M_m \rho)$ 得到，且测量后的系统状态为：

$$\frac{M_m \rho M_m^\dagger}{\text{tr}(M_m^\dagger M_m \rho)}$$

测量算子满足完备性方程

$$\sum_m M_m^\dagger M_m = I$$

- **假设 4:** 复合物理系统的状态空间是分物理状态空间的张量积，而且，如果有系统 1 到 n ，其中系统 i 处于状态 ρ_i ，则全系统的共同状态是 $\rho_1 \otimes \rho_2 \otimes \dots \otimes \rho_n$ 。



● 密度算子的一般性质

➤ **Exercise 2.71:** (判断一个态是混合态还是纯态) ρ 是一个密度算子, 证明 $\text{tr}(\rho^2) \leq 1$, 当且仅当 ρ 是纯态的时候取等号。

➤ 两个不同量子态的系综可以给出相同的密度矩阵。举个例子:

■ 有的人可能会认为, 若一个量子系统的密度矩阵是:

$$\rho = \frac{3}{4}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{4}|1\rangle\langle 1|, \text{ 那么这个量子系统必然以 } \frac{3}{4} \text{ 的概率处于态 } |0\rangle,$$

以 $\frac{1}{4}$ 的概率处于态 $|1\rangle$ 。但是, 不完全是这样, 我们设:

$$\begin{aligned} |a\rangle &\equiv \sqrt{\frac{3}{4}}|0\rangle + \sqrt{\frac{1}{4}}|1\rangle \\ |b\rangle &\equiv \sqrt{\frac{3}{4}}|0\rangle - \sqrt{\frac{1}{4}}|1\rangle \end{aligned}$$



● 密度算子的一般性质

- 并且量子系统处于 $|a\rangle$ 的概率是 $\frac{1}{2}$ ，处于 $|b\rangle$ 的概率是 $\frac{1}{2}$ ，不难验证这样的量子系统对应的密度矩阵仍是：

$$\rho = \frac{1}{2}|a\rangle\langle a| + \frac{1}{2}|b\rangle\langle b| = \frac{3}{4}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{4}|1\rangle\langle 1|。$$

- 总而言之，密度矩阵的特征向量和特征值仅仅代表了密度矩阵对应的无数种系综中的一种而已，没有理由认为由特征向量和特征值构成的这一组系综是特别的。

➤ 通过上面的讨论，我们很自然的提出一个问题，就是什么样的系综可以给出一个特定的密度矩阵？



● 密度算子的一般性质

- 引入一组向量 $|\tilde{\psi}_i\rangle$ ，设这组向量生成了算子 $\rho \equiv \sum_i |\tilde{\psi}_i\rangle\langle\tilde{\psi}_i|$ ，与普通密度算子系综的关联由下式描述： $|\tilde{\psi}_i\rangle = \sqrt{p_i} |\tilde{\phi}_i\rangle$

定理 2.6（密度矩阵系综中西自由度）当且仅当

$$|\tilde{\psi}_i\rangle = \sum_j u_{ij} |\tilde{\phi}_j\rangle$$

两组向量 $|\tilde{\psi}_i\rangle$ 和 $|\tilde{\phi}_j\rangle$ 生成相同的密度矩阵，其中 u_{ij} 是元素标号为 i 和 j 的复酉阵，并且我们在向量集合 $|\tilde{\psi}_i\rangle$ 和 $|\tilde{\phi}_j\rangle$ 中向量较少的一个中补充若干 0 向量，以使两个集合的向量个数相等。



● 约化密度算子的定义

密度算子最深刻的应用就是作为复合量子系统的子系统的描述工具了，这样的密度算子也就是本节要介绍的约化密度算子。

➤ 设我们有两个系统 A 和 B，它们的状态由一个密度算子 ρ^{AB} 来描述。

那么**对于系统 A 的约化算子被定义为：**

$$\rho^A \equiv \text{tr}_B(\rho^{AB})$$

■ 其中 tr_B 是一个算子映射，称为在系统 B 上的偏迹。定义为：

$$\text{tr}_B(|a_1\rangle\langle a_2| \otimes |b_1\rangle\langle b_2|) \equiv |a_1\rangle\langle a_2| \text{tr}(|b_1\rangle\langle b_2|)$$

■ 其中 $|a_1\rangle$ 和 $|a_2\rangle$ 是状态空间 A 中的两个向量， $|b_1\rangle$ 和 $|b_2\rangle$ 是状态空间 B 中的两个向量，等式右边 $\text{tr}(|b_1\rangle\langle b_2|) = \langle b_2|b_1\rangle$ 。

约化密度算子其实就是从复合空间中获得其中某个分空间的相关信息。



- **举例：**一个典型的 Bell 态 $(|00\rangle + |11\rangle) / \sqrt{2}$ ，它的密度算子为：

$$\rho = \left(\frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} \right) \left(\frac{\langle 00| + \langle 11|}{\sqrt{2}} \right) = \frac{|00\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 00| + |00\rangle\langle 11| + |11\rangle\langle 11|}{2}$$

- 对第二个量子比特取迹，得到第一个量子比特的约化密度算子为：

$$\begin{aligned} \rho^1 &= \text{tr}_2(\rho) \\ &= \frac{\text{tr}_2(|00\rangle\langle 00|) + \text{tr}_2(|11\rangle\langle 00|) + \text{tr}_2(|00\rangle\langle 11|) + \text{tr}_2(|11\rangle\langle 11|)}{2} \\ &= \frac{|0\rangle\langle 0|\langle 0|0\rangle + |1\rangle\langle 0|\langle 0|1\rangle + |0\rangle\langle 1|\langle 1|0\rangle + |1\rangle\langle 1|\langle 1|1\rangle}{2} \\ &= \frac{|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|}{2} = \frac{I}{2} \end{aligned}$$

- 由于 $\text{tr}\left(\left(\frac{I}{2}\right)^2\right) = \frac{1}{2} < 1$ ，所以这是一个混合态。

- 双量子比特联合系统是一个纯态，而第一个量子比特处于混合态（纠缠现象的一个特点）