作业六

1. A系统处于混态，由$\rho_A = \frac{1}{3}|0\rangle\langle 0| + \frac{2}{3}|1\rangle\langle 1|$描述. 构造复合系统$|\alpha\rangle_{AF} = \sqrt{\frac{1}{3}}|0\rangle_A|0\rangle_F + \sqrt{\frac{2}{3}}|1\rangle_A|1\rangle_F$. 使得$\rho_A = Tr_F\rho$. 假设F系统的维度是3，基矢$|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle$. 某力学量Q的本征矢是$(|0\rangle + |2\rangle)/\sqrt{2}, (|0\rangle + |1\rangle - |2\rangle)/\sqrt{3}, (|0\rangle - 2|1\rangle - |2\rangle)/\sqrt{6}$. 测量Q，可以使A塌缩到什么状态，几率多大?

直接投影即可，先看Q的第一个本征矢。其对应的投影算符作用到复合系统上是:

$$\begin{aligned}
\langle\alpha|\Pi_1|\alpha\rangle &= \frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{1}{3}}\langle 0|_A\langle 0|_F + \sqrt{\frac{2}{3}}\langle 1|_A\langle 1|_F\right)(|0\rangle + |2\rangle) \\
&\times(\langle 0| + \langle 2|)\left(\sqrt{\frac{1}{3}}|0\rangle_A|0\rangle_F + \sqrt{\frac{2}{3}}|1\rangle_A|1\rangle_F\right) \\
&= \frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{1}{3}}\langle 0|_A\langle 0|_F\right)(|0\rangle + |2\rangle) \times (\langle 0| + \langle 2|)\left(\sqrt{\frac{1}{3}}|0\rangle_A|0\rangle_F\right) \\
&= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{3}}\langle 0|_A\langle 0|_F|0\rangle \times \langle 0|\sqrt{\frac{1}{3}}|0\rangle_A|0\rangle_F \\
&= \frac{1}{6}\langle 0|_A|0\rangle_A
\end{aligned}$$

第一行直接定义丢进去，然后发现稍微大点的括号内1_F的分量是没有对应的，因此可以消去得到第三行。然后发现小括号里2这个分量也没有对应，也消去，最后就得到了最后一行。这意味着概率是六分之一，然后对应的塌缩状态是A系统的0态这是显然的。

后面第二题第三题是完全一样的，但是把式子展开写太麻烦了，我们在头脑里思考就行。显然Q中的0部分可以导致测量结果出现0态，而1部分可以导致测量结果出现1态，并且概率是根号二倍。因此答案呼之欲出了，第二问的结果是A系统的0和1的混合，概率是(1/3*1/3 + 2/3 *1/3=1/3)，并且我们做一下归一化

$$\frac{1}{\sqrt{3}}(|0\rangle_A + \sqrt{2}|1\rangle_A)$$

第三问也是一样的，概率是(1/6*1/3 + 4/6 *2/3=1/2)，对应的态是

$$\frac{1}{3}(|0\rangle_A - 2\sqrt{2}|1\rangle_A)$$

2. 两个自旋1/2粒子构成的系统哈密顿为$H = \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$，处于温度为T的平衡状态. 求出$S_1$的约化密度矩阵，计算$\langle (S_x(1), S_y(1), S_z(1)) \rangle$(取$\hbar = 1$)

首先我们要给出两个粒子对应的矢量的本征值，这是之前没有讨论过的，直接大力出奇迹或许是一种思路，但是既然我们之前使用了单三态来表示复合系统，那么我们从总角动量的思路出发求解能量。

我们引入总自旋$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$，其中$\mathbf{S}_1$和$\mathbf{S}_2$分别是两个粒子的自旋算符。

已知哈密顿量$H = \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$，利用$\mathbf{S}^2 = (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2 = \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$，将哈密顿量改写为$H = \frac{1}{2}(\mathbf{S}^2 - \mathbf{S}_1^2 - \mathbf{S}_2^2)$。
对于自旋$\frac{1}{2}$的粒子，$\mathbf{S}_1^2 = \mathbf{S}_2^2 = s(s+1)\hbar^2$，其中$s = \frac{1}{2}$，所以$\mathbf{S}_1^2 = \mathbf{S}_2^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$（取$\hbar = 1$，则$\mathbf{S}_1^2 = \mathbf{S}_2^2 = \frac{3}{4}$）

这种表示的好处是，尽管粒子会向上向下自旋，但是角动量平方算符必定是数值0.75的，那么对于单重态

$S = 0$时，$\mathbf{S}^2 = S(S+1) = 0$，$\mathbf{S}_1^2 = \frac{3}{4}$，$\mathbf{S}_2^2 = \frac{3}{4}$代入哈密顿量，可得：

$$H = \frac{1}{2}(0 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4}) = -\frac{3}{4}$$

求解三重态（$S = 1$）的本征值一样，答案是

$$H = \frac{1}{2}(2 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4}) = \frac{1}{2} \times \frac{8-3-3}{4} = \frac{1}{4}$$

那么两个自旋粒子处于热平衡状态，上述四种状态的能量决定其概率，也就是密度矩阵就可以得到了

$$\rho_{\text{total}} = \frac{1}{Z}\left(e^{-\beta E_1}\sum_{m=-1}^{1}|1,m\rangle\langle 1,m| + e^{-\beta E_0}|0,0\rangle\langle 0,0|\right).$$

当然了这里并没有写成矩阵的形式，因为三重态和单重态的地位如果写成矩阵的话，容易误判地位，还是写成求和的形式会好一些。总之现在的形式是，复合系统是混合系综，那么根据之前的公式，约化密度算符的矩阵元的表达是

$$\rho_{ii'}^{A} = \sum_k w_k \left[\sum_j \mathcal{C}_{ij}^{(k)} \mathcal{C}_{i'j}^{(k)*}\right]$$

这里的k求和对应于上面的单重态跟三重态的权重，因此我们分开考虑单重态跟三重态。

单态是一个纠缠纯态，其形式为

$$|0,0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle)$$

因此其系数有两项，对应$\mathcal{C}^s_{+-}=\frac{1}{\sqrt{2}}$以及$\mathcal{C}^s_{-+}=-\frac{1}{\sqrt{2}}$,那么这一项导致的约化密度矩阵元分别是

$$\rho^A_{++}=0.5,\rho^A_{+-}=0,\rho^A_{-+}=0,\rho^A_{--}=0.5$$

考虑三态里的纠缠态，其形式为

$$|1,0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle)$$

这个跟上面一样的，尽管正负号反了，但是取迹的时候是要平方的，因此结果一样。

下面考虑三态里两个直积纯态，形式为

$$|1,1\rangle=|\uparrow\uparrow\rangle,\quad |1,-1\rangle=|\downarrow\downarrow\rangle$$

对应的前者显然只对ρ^A_{++}有贡献$\rho^A_{++}=1$，后者也是类似只对ρ^A_{--}贡献，这是对称的。

因此综合上述的内容，最终得到的密度矩阵也是对称的形式，即

$$\rho_1=\frac{1}{Z}\left(\frac{3}{2}e^{-\beta E_1}+\frac{1}{2}e^{-\beta E_0}\right)(|\uparrow\rangle\langle\uparrow|+|\downarrow\rangle\langle\downarrow|)$$

该密度矩阵只有对角项，是一个混合态，并且发现其向上向下自旋的几率是均等的，与温度无关的，也就是完全混合态。

那么接下来完成下一问，求粒子1的自旋期望值，这就基本上直接有结果了。z方向期望值直接对约化密度矩阵求迹，显然抵消，为零。而x和y方向更是泡利矩阵一作用，对角矩阵变为非对角的了，那么求迹必定是零。最终答案是全是零。

$$\langle(S_x(1),S_y(1),S_z(1))\rangle=(0,0,0)$$

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

对B求偏迹，对应的密度矩阵元是$\rho_{00}=0.5,\rho_{01}=0.5,\rho_{10}=0.5,\rho_{11}=0.5$,也就是是一个全部元素都是0.5的矩阵，这咋一看似乎有点像混合态，但是我们可以发现，一个列矩阵(0.5,0.5)乘上一个行矩阵(0.5,0.5)就会得到一个方阵，并且方阵元素全部相同。这启示我们，对于原本A系统的0，1自旋，可以构造向上态=0.5的0自旋+0.5的1自旋，那么这个时候其约化密度矩阵就是一个纯态了，同理对于B也是一样的，因此最后子系统确实是一个纯态，其对应约化密度矩阵只有一项，则复合系统是直积态