

22.复合系统定义和运算、性质

对于复合系统：A + B

对应的希尔伯特空间矢量取直积（张量积）

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$$

例：自旋系统和 $l=1$ 的角动量的系统的复合

- \mathcal{H}_A : $|\pm z\rangle_A$ (或记为 $|0\rangle_A, |1\rangle_A$)
- \mathcal{H}_B : $|+, z\rangle, |0, z\rangle, |-, z\rangle$ (或记为 $|0\rangle_B, |1\rangle_B, |2\rangle_B$)

那么张量积后的基矢为 $|i\rangle \otimes |j\rangle$ ，其中 $i = 0, 1; j = 0, 1, 2$ ，符号上为了简便，也可省略张量积符号，记 $|i\rangle \otimes |j\rangle = |ij\rangle$ 。

例：两个 $S = \frac{1}{2}$ 自旋粒子耦合系统

有 $\alpha\alpha, \alpha\beta, \beta\alpha, \beta\beta$ ，即 $|+\rangle_A|+\rangle_B, |+\rangle_A|-\rangle_B, |-\rangle_A|+\rangle_B, |-\rangle_A|-\rangle_B$ 一共四种情况，那么任何两个自旋复合的系统的态都可以用上述四种情况展开

展开的形式总是

$$|\alpha\rangle = \sum_{ij} C_{ij} |i\rangle_A |j\rangle_B$$

比如对于两个 $S = \frac{1}{2}$ 自旋粒子耦合系统的四种态：

- $\chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ ：总自旋为0，是单态。两个自旋方向相反，一种自旋向上（ \uparrow ）和自旋向下（ \downarrow ）的反对称组合，自旋投影在 z 轴方向的总自旋量子数 $m_s = 0$ 。
- $\chi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$ ：总自旋为1，是三重态之一。两个自旋方向相反，但组合方式是对称的，自旋投影在 z 轴方向的总自旋量子数 $m_s = 0$ 。
- $\chi_{11} = |\uparrow\uparrow\rangle$ ：总自旋为1，是三重态之一。两个自旋都向上，自旋投影在 z 轴方向的总自旋量子数 $m_s = 1$ 。
- $\chi_{1-1} = |\downarrow\downarrow\rangle$ ：总自旋为1，是三重态之一。两个自旋都向下，自旋投影在 z 轴方向的总自旋量子数 $m_s = -1$ 。

上面这四种态其实也构成系统的一组基矢量，其中第三第四种跟之前定义的 $|+\rangle_A|+\rangle_B$ 是一样的，但是区别是这里第一第二种态是复合了两种态的，出现了一次态的相加。

对于可直接写成两态直积的态，叫直积态 $|\alpha\rangle = |\mu\rangle_A |\nu\rangle_B$ ，上面 χ_{11} 、 χ_{1-1} 就是直积态。但上述 χ_{00} 、 χ_{10} 带了加号减号，是无法这么写的，故为纠缠态。

不过值得一提的是，这里的四种态矢量虽然两个是纠缠态两个是直积态，似乎把问题复杂化了，不如写回四个直积态的表示，但在化学分子里这种写法的意义是更明确的。因为化学里常常研究分子光谱，尤其是分子在磁场中会发生裂分，比如电子顺磁共振（EPR）光谱，这个时候研究三线态(上面的三重态)是更为意义明确的。

复合系统的内积定义： $\langle i|\langle p|\cdot|q\rangle_A|j\rangle_B \equiv \langle p|q\rangle_A \cdot \langle i|j\rangle_B$

这个就没啥好说的了，基本数学定义，至此，复合系统的定义和运算基本上就结束了。

对于N个粒子，仍然类似 $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_N$ 。很明显可以发现这叠加起来是指数爆炸的，因此一般不会有人研究高复杂度的复合系统，往往会在子系统里研究。

23.测量与约化密度算符

对于一个双变量的概率函数 $P(\vec{x}_A, \vec{x}_B)$ ，我们显然会有一个二维概率图，然后在概率论与数理统计里研究这类多元概率密度的性质等等。

不过尽管总的概率密度是多元的，但若我们只关心 \vec{x}_A ，则可以做 $P_A(\vec{x}_A) = \sum_{\vec{x}_B} P(\vec{x}_A, \vec{x}_B)$ 的行为，也就是把概率密度对 \vec{x}_B 求和掉，这样就可以只研究我们关心的对象了。

比如假如有一个量的期望值只与 \vec{x}_A 有关，那么其期望值的表示就是

$$\begin{aligned}\langle Q(\vec{x}_A) \rangle &= \sum_{\vec{x}_A \vec{x}_B} Q(\vec{x}_A) P(\vec{x}_A, \vec{x}_B) \\ &= \sum_{\vec{x}_A} Q(\vec{x}_A) \sum_{\vec{x}_B} P(\vec{x}_A, \vec{x}_B) \\ &= \sum_{\vec{x}_A} Q(\vec{x}_A) P_A(\vec{x}_A)\end{aligned}$$

这里第二行把求和符号移开，正式因为待测量与 \vec{x}_B 是无关的，那么自然就用到上面的定义，把总概率密度求和为了约化概率密度

而量子对应下，我们可以认为 $P(\vec{x}_A, \vec{x}_B)$ 对应总系统的密度算符 ρ ，而 $P_A(\vec{x}_A)$ 对应约化密度算符 ρ_A

下面我们考虑复合系统的密度算符，对于纯态(这个系统是复合系统，但是这个系统本身在复合的角度是纯态)

$$|\Psi\rangle = \sum_{ij} C_{ij} |i\rangle_A |j\rangle_B$$

其对应的密度算符

$$\begin{aligned}\rho &= |\Psi\rangle\langle\Psi| \\ &= \sum_{i'j'} C_{i'j'}^* C_{ij} |i\rangle_A |j\rangle_B \langle j'|_B \langle i'|_A\end{aligned}$$

我们时常回用矩阵元素标记算符的内容，这个时候

$|i\rangle_A |j\rangle_B \langle j'|_B \langle i'|_A$ 态对应的分量记作 $C_{ij} C_{i'j'}^* = \rho_{ij, i'j'}$

注意这是一个(2,2)阶张量，记住此时密度算符的矩阵元有利于后续的约化密度算符的对比

那么对于测量算符 Q ，假设其限于某一子系统的测量，比如态 A 空间的测量，那么其作用于复合系统时，对应无系统要利用单位矩阵进行作用。

$$Q|\Psi\rangle = Q_A \otimes I |\Psi\rangle = Q_A |i\rangle_A \otimes I |j\rangle_B = Q_A |i\rangle_A \otimes |j\rangle_B$$

那么求算符的期望值时，也是类似，放着无关的态不管即可，我们有

$$\begin{aligned}\langle Q_A \rangle &= \text{Tr}(Q_A \cdot \rho) \\ &= \sum_{i,j} \langle j|_B \langle i|_A \rho Q |i\rangle_A |j\rangle_B \\ &= \sum_{i,j} \langle j|_B \langle i|_A \rho (Q|i\rangle_A) |j\rangle_B\end{aligned}$$

这里测量只对态矢量 i 进行因此括号括起来了，而其他 B 空间的则不动，因此我们的密度算符完全可以先对外部的 B 空间进行求和运算，也就是像之前约化密度一样。

定义约化密度算符

$$\rho_A = \sum_j \langle j|_B \rho |j\rangle_B$$

于是可以利用这个定义，上面的期望改写为

$$\begin{aligned}\langle Q_A \rangle &= \sum_i \langle i|_A \rho_A Q |i\rangle_A \\ &= \text{Tr}_A(\rho_A Q)\end{aligned}$$

即如果测量的量只跟某个子系统有关，那么无需考虑总密度算符，只用考虑约化密度算符。有了约化密度算符就很方便了，但是如何求约化密度算符呢？

详细计算约化密度，下面把密度算符的展开用 i, i', k, k' 标记：

$$\begin{aligned}\rho_A &= \sum_j \langle j|_B \rho |j\rangle_B \\ &= \sum_j \langle j|_B \sum_{i,k,i',k'} c_{ik} c_{i'k'}^* |i\rangle_A |k\rangle_B \langle k'|_B \langle i'|_B |j\rangle_B \\ &= \sum_{i,i'} \left[\sum_j c_{ij} c_{i'j}^* |i\rangle_A \langle i'|_A \right]\end{aligned}$$

由于最左最右边B空间的矢量可以先进行内积运算，这带来了正交归一性，也就导致了 j, j' 的求和变为了 j 的对角求和，然后我们改写为第三行的形式，这个形式一眼我们就看出来了其矩阵元

$$\text{即 } \rho_{ii'}^A = \sum_j c_{ij} c_{i'j}^*$$

也就是约化密度算符的矩阵元， $|i\rangle_A \langle i'|_A$ 态对应的矩阵元是一个系数的求和，对比一下之前密度算符(2,2)阶张量，矩阵元是数；现在约化密度算符是(1,1)阶张量，矩阵元是(2,2)张量的对B态的元素的求和。这在计算机里是很容易实现的。尤其是基于numpy的einsum库，实现各自张量运算确实可以说是很方便。

下面我们提一下复合系统的混合态

对于混合系综，密度算符的形式很容易写出来，这跟之前没区别

$$\rho = \sum_k w_k |\Psi^{(k)}\rangle \langle \Psi^{(k)}|$$

其对应的矩阵元差不多，多了个求和而已，仍然是一个(2,2)张量

$$\rho_{ij,i'j'} = \sum_k w_k c_{ij}^{(k)} c_{i'j'}^{(k)*}$$

约化密度矩阵元也是类似的，仍然是(1,1)张量

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

24.直积与纠缠态的区别、纠缠熵

考虑一个纯态复合系统，该系统是纠缠态，其形式为

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A|1\rangle_B + |1\rangle_A|0\rangle_B) = \chi_{10}$$

这就是之前讨论过的三线态的一个态，然后我们写出其密度算符

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = \frac{1}{2}[|0\rangle_A|1\rangle_B\langle 1|_A\langle 0|_B + \cdots]$$

这里太多了笔者就不写了，重点在于，我们计算一下其约化密度算符

$$\begin{aligned}\rho^A &= \sum_j \langle j|_B \rho |j\rangle_B \\ &= \frac{1}{2}|1\rangle_A\langle 1|_A + \frac{1}{2}|0\rangle_A\langle 0|_A \\ &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}\end{aligned}$$

计算结果发现约化密度算符是一个显然的混合态算符的形式。也就是说，尽管整个系统是纯态（此时该态是纠缠态），求偏迹后会变成混合态，根据混合态的熵定义，有熵 $S = \frac{1}{2} \ln 2 + \frac{1}{2} \ln 2 = \ln 2$ ，而原本纯态的熵是零 $S = 0$ 即产生了纠缠熵。

不过同样是复合系统的求偏迹，但直积态求偏迹仍是纯态：

$$|\psi\rangle = |0\rangle_A|1\rangle_B$$

则

$$\rho = |0\rangle_A|1\rangle_B\langle B|1\rangle\langle A|0|$$

$$\rho^A = |0\rangle_A\langle 0|_A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

因此事实上，纠缠态与直积态是有大差异的，其中一个差异就反应在纠缠熵，其计算则取决于约化密度矩阵的具体内容 $S_A = -\text{Tr}[\rho_A \ln \rho_A]$ ，一个很显然的结论是约化密度矩阵的矩阵元越平均(各态概率相等)，那么纠缠熵越大，此时系统最无序，或者说纠缠最剧烈。数学上好像不难证明，因为似乎只要求导就可以了？但是笔者稍微想了想，好像严格证明当 $p_i = 1/n, i \in (0, n)$ 时候熵最大还真有点不太好严格证明？不过算了，这个结论应该是显然的。

上述讨论也启发我们，混态可以认为是更大的系统的纯态。因为上面复合系统纠缠态是纯态，但到了子态就是混合态了，那么是否任意的混合态系统都可以构造更大的复合系统使得该复合系统为纯态纠缠态

呢？答案当然是可以的

设 A 处于混合态，想象更大系统上是纠缠态，更大的系统以 $|\alpha\rangle_{AF}$ 为基矢

设此时态 A 的密度算符形式是 $\rho_A = \sum_k \lambda_k |\phi_k\rangle\langle\phi_k|$, $\lambda_k \geq 0$, $\sum_k \lambda_k = 1$

我们直接构造纠缠态 $|\alpha\rangle_{AF} = \sum_k \sqrt{\lambda_k} |\phi_k\rangle_A |k\rangle_F$

则，注意这里我们构造的纠缠态里， $|k\rangle_F$ 是一个与 ϕ_k 有关的变量，因为之前我们构造时候一般 A 和 B 两个系统的态矢量是自由组合的，但是这里为了简单起见(反正我们只要证明存在性即可)，我们不妨让这里 $|k\rangle_F$ 与 ϕ_k 一一对应，那么我们就可以得到密度算符，然后求偏迹，计算开始：

$$\begin{aligned}\rho_A &= \text{Tr}_F[|\alpha\rangle_{AF}\langle\alpha|_{AF}] \\ &= \sum_{k''} \langle k''|_F \left[\sum_k \sum_{k'} \sqrt{\lambda_k \lambda_{k'}} |\phi_k\rangle_A |k\rangle_F \langle k'|_F \langle \phi_{k'}|_A \right] |k''\rangle_F \\ &= \sum_{k''} \lambda_{k''} |\phi_{k''}\rangle\langle\phi_{k''}| \end{aligned}$$

上面也用到了 B 空间态矢量的正交归一性使得求和只剩下 k'' 的项，那么观察最后这一行的形式，我们就证明了混合密度算符，此时的形式正是更大系统纠缠态下的约化算符的形式(回顾之前的公式，确实长这样)

反过来，任意纠缠态纯态也可在小系统变为混合态，这在量子计算中被称为施密特分解Schmidt decomposition

其基本思路是，对于纠缠态 $|\alpha\rangle = \sum_i \sqrt{\lambda_i} |\phi_i\rangle_A |i\rangle_B$

注意这里的构造， i 与 λ_i 是相关的

下面笔者没听懂

构造： $|\alpha\rangle \rightarrow \rho_A = \text{Tr}_B \rho \rightarrow$ 得到 $|\phi_i\rangle_A$, λ_i

则完备性 $|\alpha\rangle = \sum_i |\phi_i\rangle_A \langle\phi_i|_A \cdot |\alpha\rangle = \sum_i \langle\phi_i|\alpha\rangle \cdot |\phi_i\rangle_A$

和 $\langle\phi_i|\alpha\rangle = |\varphi_i\rangle_B$ 即内积给出一个 B 的态

可以证明 $\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \lambda_i \cdot \delta_{ij}$

因为 $\rho = \sum_{ij} |\varphi_i\rangle_A \langle\varphi_j|_A |\varphi_i\rangle_B \langle\varphi_j|_B$

则求迹时对 B 求和，对应系数要求 $\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle_B = \lambda_i \cdot \delta_{ij}$