

第三章 量子纠缠、混态与量子系统

QT 认定，任何孤立的微观体系 A ，其状态一定可以用一个纯态来完备地描述。但它和外界环境 B 难以避免有直接或间接的相互影响，这些相互作用导致 A 、 B 状态之间的量子纠缠。量子纠缠的概念和术语由 *Schrodinger* 于 1935 年首次引入量子力学，并称其为“量子力学的精髓”【1】。量子纠缠是一种奇特而又十分复杂的纯量子现象，反映了量子理论的本质——相干性、或然性和空间非定域性，广泛应用于蓬勃发展着的量子通讯和量子计算中。

由于和 B 的量子纠缠，使得对 A 问题的研究复杂化。这时，可以区分不同精度等级考虑 B 对 A 的影响。从最粗糙的用统计平均方式排除 B 对 A 的影响，具体办法是对 B 部分求迹。再经历将 B 对 A 的影响适当平均成为平均场——外场近似，这是单粒子的线性化的近似。再到各类自洽场近似和等效 *Lagrangian* 方法。

这种局限性的观测和统计性的研究导致量子理论在以下三个方面出现重大改变或者说发展：**其一**，产生了和纯态概念完全不同的混态概念。值得注意的是，不像纯态，混态从制备到解释都有着一一定的含混性；**其二**，不像纯态按 *Schrödinger* 方程作么正演化，混态的演化方程称作主方程，其演化一般不再是么正和可逆的；**其三**，测量一般不再是正交投影。由于量子态描述、状态演化方程、测量塌缩三个重要问题上有这些变化发展，量子理论表现出了崭新的面貌，进入一种更多人为干预的、更加实际、更加主动的新阶段。

§3.1, 两体系统量子态分类及纯态 *Schmidt* 分解

1, 纯态与混态、可分离态与纠缠态

▲**两体纯态**。它们是两体系统 $A+B$ 态空间 $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ 中任一相干叠加态。简单说，能够用单一波函数描述的态。普遍表示为

$$|\psi\rangle_{AB} = \sum_{mn} C_{mn} |\psi_m\rangle_A \otimes |\varphi_n\rangle_B \quad (3.1)$$

($\{|\psi_m\rangle_A \otimes |\varphi_n\rangle_B\}$ 为正交归一基矢)。两体纯态可区分为两大类：可分离态，不可分离态。由下面叙述可知，后者对应 *Schmidt* 数大于

1, 常称为纯态纠缠态。

▲未关联态 (*uncorrelated states*) 是这样一些态, 它们密度矩阵可以写作

$$\rho_{AB} = \rho_A \otimes \rho_B \quad (3.2)$$

这些态在部分求迹 (见下) 后, 约化密度矩阵分别就是 ρ_A 和 ρ_B 。

▲可分离态 (*separable states*)——包括可分离混态, 是这样一些纯态和混态, 它们的密度矩阵可以写作一些 (3.2) 式未关联态概率权重之和

$$\rho_{AB} = \sum_k p_k \rho_A^k \otimes \rho_B^k, \quad \sum_k p_k = 1 \quad (3.3)$$

这里 C 是与两个子系统都相关的某个物理量或事件。(3.3) 式就是 A 、 B 两个子系统的任意可分离量子态的定义。注意, 混态可分离态的表达式 (3.3) 容许对求和式中每一项的 A 和 B 都各自单独引入任意不同相因子而不改变状态。当两体系统处于可分离态时, 总可以找到一种分解 (现在是按 C 分解), 使得态的可分离性等价于添加任意内部相因子而不改变这个态, 这有着深刻的含意【9】。

▲ (3.3) 式解释: 关联型空间非定域性与量子纠缠的等价性。

首先, 如果条件 C 下事件 A 和 B 相互独立, 这种相互无关性质可以用下面条件概率的乘积分解来定义,

$$P(AB|C) = P(A|C) \cdot P(B|C) \quad (3.4a)$$

这里 $P(A|C)$, $P(B|C)$ 分别为出现事件 C (C 是两个子系统的“共同特征事件”, 是一类具有完备分类能力的特征事件族) 条件下事件 A 或 B 发生的概率, $P(AB|C)$ 为事件 C 条件下 A 和 B 同时发生的概率。

其次, 可以证明有定理: “对于多体量子系统, 基于类空间隔下关联测量的空间定域性等价于量子态的可分离性。换一种提法, 关联型空间非定域性与量子纠缠本质上等价。”

于是, 两体态的可分离性与类空间隔关联测量意义下的空间定域性是等价的。

证明: 只考虑两体情况, 但论证方法对多体情况同样适用。

这里说的关联测量是指**相对论性定域因果律**的类空间隔下的关联测量。定律主张：**处于类空间隔下的两个子系统 A 和 B 中各自发生的事件，不存在因果关联，相互独立**。可以引用 (3.4a) 式“两个相互独立事件乘积的条件概率等于两个事件条件概率的乘积”。该式思想还可以表示作“**类空间隔下不存在非定域的相关性**”，或者是“**类空间隔下的定域独立性**”。其实这些都是“相对论性定域因果律”的等价表述。容易得出，如用 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 分别表示两个子系统的两个任意算符，那么它们期望值将肯定满足下面关系

$$\boxed{E(\hat{A}\hat{B}|C) = E(\hat{A}|C) \cdot E(\hat{B}|C)} \quad (3.4b)$$

注意 $E(\hat{\Omega}_{AB}) = \text{tr}_{AB}(\rho_{AB} \hat{\Omega}_{AB})$ ，令 p_C 为事件 C 发生的概率，这时 $\hat{A}\hat{B}$ 期望值可以表示为

$$\begin{aligned} E(\hat{A}\hat{B}) &= \sum_C p_C E(\hat{A}\hat{B}|C) = \sum_C p_C E(\hat{A}|C) \cdot E(\hat{B}|C) \\ &= \sum_C p_C \text{tr}_A(\rho_A^C \hat{A}) \cdot \text{tr}_B(\rho_B^C \hat{B}) = \sum_C p_C \text{tr}_{AB}[\rho_A^C \otimes \rho_B^C \hat{A}\hat{B}] \\ &= \text{tr}_{AB} \left\{ \left[\sum_C p_C \rho_A^C \otimes \rho_B^C \right] \hat{A}\hat{B} \right\} \end{aligned}$$

考虑到算符 $\hat{A}, \hat{B}$ 的任意性，即得

$$\rho_{AB} = \sum_C p_C \rho_A^C \otimes \rho_B^C, \quad \sum_C p_C = 1$$

这正是 $A \oplus B$ 两体系统量子态是可分离态的定义式 (3.3)。

注意推导是可逆的。于是可知，**基于两体系统类空间隔下关联测量的空间定域性**（含义见 (3.4a) 式）蕴含了该量子态可分离性；逆过来说，量子态可分离性必蕴含类空间隔下关联测量的空间定域性。逆否过来，又可以说，量子纠缠和上述意义下的空间非定域性——关联型空间非定域性本质上等价。这也是将“关联型空间非定域性”和“量子纠缠非定域性”互相称谓的缘故。定理证毕。

▲不可分离态 (*unseparable states, mixed entanglement states*)，又称作纠缠态——包括纠缠纯态和纠缠混态，是所有不能写成可分离态 (3.3) 形式的纯态和混态。

首先，纯态纠缠态 (*entangled state*)。表观上，这是一些不能按

粒子分解为因子化的两体量子纯态。实质上，纠缠态的共同点是粒子间的状态相互纠缠不可分离，本质上是位相关联的。于是对任一体的每项添加相因子将肯定会改变这个态。**量子纠缠本质上是物理的而非数学表述性的、是量子的而非经典的。它体现了量子相干性、或然性和空间非定域性。**量子纠缠最具深刻科学意义、同时又最具实践价值的地方是：它明显地体现出了量子理论本质特性之一的空间非定域性(*non-locality*)。详细叙述可见以下三章。对相互作用的复合体系，态空间中绝大多数是纠缠态。

比如，两个 $\frac{1}{2}$ 自旋粒子体系的 4 个 *Bell* 基（“*EPR* 对”——涉及 *Einstein-Podolsky-Rosen* 佯谬）：

$$\begin{aligned} |\psi^\pm\rangle_{AB} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A \otimes |1\rangle_B \pm |1\rangle_A \otimes |0\rangle_B) \\ |\phi^\pm\rangle_{AB} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A \otimes |0\rangle_B \pm |1\rangle_A \otimes |1\rangle_B) \end{aligned} \quad (3.5a)$$

就是 4 个典型的纠缠态。以后知道，这些态都是最大纠缠态。对两体分别进行任意局域幺正变换 (*LU*) 所得的态都是最大纠缠态。因为，每个粒子的两个正交态经各自的 *LU* 后仍保持为正交的，所以只需重新定义该粒子的 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 而已。可以检验，这四个 *Bell* 基是力学量算符 $\sigma_x^A \sigma_x^B, \sigma_y^A \sigma_y^B, \sigma_z^A \sigma_z^B$ 的共同本征态。由于它们正交归一完备，可作为此体系态空间的基矢。此外，两个双态粒子体系还常用无耦合基和耦合基：

$$\left\{ \begin{aligned} |\uparrow_z\rangle_A \otimes |\uparrow_z\rangle_B &= |\uparrow, \uparrow\rangle_{AB} \\ |\uparrow_z\rangle_A \otimes |\downarrow_z\rangle_B &= |\uparrow, \downarrow\rangle_{AB} \\ |\downarrow_z\rangle_A \otimes |\uparrow_z\rangle_B &= |\downarrow, \uparrow\rangle_{AB} \\ |\downarrow_z\rangle_A \otimes |\downarrow_z\rangle_B &= |\downarrow, \downarrow\rangle_{AB} \end{aligned} \right\}; \quad \left\{ \begin{aligned} |\uparrow_z\rangle_A \otimes |\uparrow_z\rangle_B &= |\uparrow, \uparrow\rangle_{AB} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \downarrow\rangle_{AB} + |\downarrow, \uparrow\rangle_{AB}) & \\ |\downarrow_z\rangle_A \otimes |\downarrow_z\rangle_B &= |\downarrow, \downarrow\rangle_{AB} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \downarrow\rangle_{AB} - |\downarrow, \uparrow\rangle_{AB}) & \end{aligned} \right\} \quad (3.5b,c)$$

(3.5b) 式一套由未关联态组成；(3.5c) 中只有两个是纠缠态。而 (3.5a) 中 4 个基矢全部是纠缠态。三套基可以相互展开。

其次，纠缠混态。例如，可以证明，下述混态对任何 ($f \neq 1/2$) 均是纠缠的（证明见【15】题解[4.1、4.2]）

$$\rho_{AB} = f|\psi^+\rangle_{AB}\langle\psi^+| + (1-f)|\varphi^+\rangle_{AB}\langle\varphi^+|, \quad 0 < f < 1 \quad (3.6)$$

混态纠缠态。就两体而言，混态纠缠态定义为：当且仅当不能表示为（3.3）式混态可分离态的形式。

▲一般的两体混态表示为

$$\rho_{AB} = \sum_{i,j=0}^3 p_{ij} |i\rangle_{AB} \langle j| \quad (3.7)$$

这里系数 p_{ij} 必须使矩阵 ρ_{AB} 是厄密的， $\text{Tr}\rho_{AB}=1$ ，并且 $\text{Tr}\rho_{AB}^2 < 1$ 。

取 A 、 B 的 *Pauli* 矩阵及单位矩阵直积作为此体系 16 个基：

$$[\Sigma_i, (i=0,1,2,\dots,15)] = \{I, \sigma_x^A, \sigma_y^A, \sigma_z^A, \sigma_x^B, \sigma_y^B, \sigma_z^B, \sigma_x^A \sigma_x^B, \sigma_x^A \sigma_y^B, \dots, \sigma_z^A \sigma_z^B\} \quad \text{用这组基可将 } \rho_{AB} \text{ 展开为}$$

$$\rho_{AB} = \frac{1}{4} \sum_{i=0}^{15} \lambda_i \Sigma_i \quad (3.8)$$

这里 λ_i 是实系数（ $\lambda_0=1$ ），且有 $\lambda_i = \text{Tr}(\rho_{AB} \Sigma_i)$ 。于是两体两能级体系的任一混态密度矩阵最多需用 15 个实参数来确定。

▲约化密度矩阵 (*reduced density matrices*)。对两体纯态 $|\psi\rangle_{AB}$ 为：

$$\rho_A = \text{Tr}^{(B)}(|\psi\rangle_{AB} \langle\psi|); \quad \rho_B = \text{Tr}^{(A)}(|\psi\rangle_{AB} \langle\psi|) \quad (3.9a)$$

一般对两体混态 ρ_{AB} 为

$$\begin{aligned} \rho_A = t_r^{(B)}(\rho_{AB}) &= \sum_{j=1}^M {}_B \langle j | \rho_{AB} | j \rangle_B, \quad \left(\sum_{j=1}^M |j\rangle_B {}_B \langle j| = I_B \right) \\ \rho_B = t_r^{(A)}(\rho_{AB}) &= \sum_{i=1}^N {}_A \langle i | \rho_{AB} | i \rangle_A, \quad \left(\sum_{i=1}^N |i\rangle_A {}_A \langle i| = I_A \right) \end{aligned} \quad (3.9b)$$

比如说，如果只对大系统 AB 的子系统 A 感兴趣，就应当在统计平均意义上预先等权地计入 B 处在所有可能态时， B 对 A 的影响。办法是对大系统态密度矩阵 ρ_{AB} 实行对 B 所有可能态的量子态平均——对 B 实行部分求迹，得到只与 A 算符和态矢有关的、统计平均描述 A 的约化密度矩阵 ρ_A 。这里值得指出，其实 B 的完备性条件常常是相对的，对 B 部分求迹时，只需要考虑由问题条件可能制约的 B 的一部分子空间，不必动辄对 B 全部态空间 $\mathcal{H}_B$ 求迹。

2, 两体纯态的 *Schmidt* 分解(*Schmidt decomposition*)

i, 可以证明: “两体系统的任一纯态 $|\psi\rangle_{AB}$ 总可以表示成如下 *Schmidt* 分解的形式:

$$\left| \psi \right\rangle_{AB} = \sum_i \sqrt{p_i} |i\rangle_A |i'\rangle_B, \quad {}_A\langle i|j\rangle_A = \delta_{ij}, \quad {}_B\langle i'|j'\rangle_B = \delta_{ij}, \quad \sum_i p_i = 1 \quad (3.10)$$

这里 $\sqrt{p_i}$ 约定取正根。 $\{|i\rangle_A\}$ 和 $\{|i'\rangle_B\}$ 分别是 $\mathcal{H}_A$ 和 $\mathcal{H}_B$ 中两组可能与态 $|\psi\rangle_{AB}$ 有关的特殊正交基。”

证明: 设 $\{|i\rangle_A\}$ 和 $\{|\mu\rangle_B\}$ 分别是 $\mathcal{H}_A$ 和 $\mathcal{H}_B$ 的正交归一基, 系统一般纯态可以表示为

$$|\psi\rangle_{AB} = \sum_{i\mu} \alpha_{i\mu} |i\rangle_A |\mu\rangle_B \equiv \sum_i |i\rangle_A |\tilde{i}\rangle_B, \quad |\tilde{i}\rangle_B \equiv \sum_{\mu} \alpha_{i\mu} |\mu\rangle_B$$

注意, 这里 $\{|\tilde{i}\rangle_B\}$ 既不一定是正交的, 也不一定是归一的。

原则上, 对于子系统 A 的任意态 ρ_A , 总可以选到这样一组 A 的正交基 $\{|i\rangle_A\}$, 使得 ρ_A 在这组基中是对角的 (总可以对给定的 ρ_A 求对角化来找到), 即总可以将任给的 ρ_A 取作它的谱表示,

$$\rho_A = \sum_i p_i |i\rangle_{AA} \langle i|$$

另一方面, 用上面给定的任意态 $|\psi\rangle_{AB}$ 对子系统 B 部分求迹也得到一个 ρ_A , 即

$$\rho_A \equiv \text{tr}_B (|\psi\rangle_{AB} {}_{AB}\langle\psi|) = \text{tr}_B \left\{ \sum_{ij} |i\rangle_{AA} \langle j| \otimes |\tilde{i}\rangle_{BB} \langle \tilde{j}| \right\} = \sum_{ij} {}_B\langle \tilde{j} | \tilde{i} \rangle_B \{ |i\rangle_{AA} \langle j| \}$$

上式的最后一步等号, 设 $\{|k\rangle_B\}$ 是 B 的正交归一基, 即得

$$\text{tr}_B (|\tilde{i}\rangle_{BB} \langle \tilde{j}|) = \sum_k {}_B\langle k | \tilde{i} \rangle_{BB} \langle \tilde{j} | k \rangle_B = \sum_k {}_B\langle \tilde{j} | k \rangle_{BB} \langle k | \tilde{i} \rangle_B = {}_B\langle \tilde{j} | \tilde{i} \rangle_B$$

假定 $|\psi\rangle_{AB}$ 开始展开式中的 $\{|i\rangle_A\}$ 就是 $|\psi\rangle_{AB}$ 的约化密度矩阵 ρ_A 的本征矢量, 于是得到同一个 ρ_A 的两个表达式, 相比较即得

$${}_B\langle\tilde{j}|\tilde{i}\rangle_B = p_i\delta_{ij}$$

可知 $\{|\tilde{i}\rangle_B\}$ 也相互正交。将它们归一，即令

$$|i'\rangle_B = \frac{1}{\sqrt{p_i}}|\tilde{i}\rangle_B$$

最后就得到

$$|\psi\rangle_{AB} = \sum_i \sqrt{p_i} |i\rangle_A |i'\rangle_B$$

这就是两体量子系统任一纯态 $|\psi\rangle_{AB}$ 的 *Schmidt* 分解。由证明可知，所采用的基一般依赖于态 $|\psi\rangle_{AB}$ 。就是说，一般不能用这两组正交归一基 $\{|i\rangle_A\}$ 、 $\{|i'\rangle_B\}$ 同时又去对另一纯态 $|\varphi\rangle_{AB}$ 作 *Schmidt* 分解。

ii, 如只对 ρ_{AB} 中的 A 或 B 粒子单独取迹所得到的矩阵称为约化密度矩阵。这时有

$$\begin{aligned} \rho_A &= t_r^{(B)}(|\psi\rangle_{AB} {}_{AB}\langle\psi|) = \sum_i p_i |i\rangle_A {}_A\langle i| \\ \rho_B &= t_r^{(A)}(|\psi\rangle_{AB} {}_{AB}\langle\psi|) = \sum_i p_i |i'\rangle_B {}_B\langle i'| \end{aligned} \quad (3.11)$$

iii, 注意 *Schmidt* 分解只限于两体系统，而 A 和 B 不必为双态系统，也不要求 A 和 B 的态空间维数相同。由 *Schmidt* 分解表达式对子系统部分求迹运算可以看到：任意两个量子体系纠缠成为一个两体纯态，其结果必定使 ρ_A 与 ρ_B 的非零本征值相同，但同时，却未曾要求 $\mathcal{H}_A$ 和 $\mathcal{H}_B$ 维数相同，因此 ρ_A 与 ρ_B 零本征值个数可以不同。

iv, *Schmidt* 分解步骤：将任给纯态 $|\psi\rangle_{AB}$ 作并矢，部分取迹，求得两个约化密度矩阵 ρ_A 、 ρ_B ，将它们对角化，找到两组正交归一基 $\{|i\rangle_A\}$ 、 $\{|i'\rangle_B\}$ 以及本征值 p_i ，代入表达式就得到分解式。

v, 应当指出，【6】中指明 $\sqrt{p_i}$ 必须取非负值。其实这只是一约定。但却是一种并非必要的约定。实际上也可能因为采用了已有的基矢而出现负号。一个计算例证讨论见本讲习题[3.10]。

§3.2, 两体系统量子纠缠，定义与分析

1, 两体系统量子纠缠与 von Neumann 熵

量子纠缠只有对多体量子态才有意义。下面记 m 个量子体系为 $A, B, C, D, \dots, M$, 它们分属于可能处于不同地方的观测者 *Alice, Bob, Claire, Daniel, \dots, Mary* 分别持有。每个量子体系又可以包含一个或多个光子, 电子等等。为研究方便, 假定每个量子体系 *Hilbert* 空间维数有限, 但不一定相同。本章主要研究两体量子体系。

两体纠缠纯态的判断。一种普遍提法是: 当且仅当它的 *Schmidt* 数大于 1 时, 是个纠缠纯态。对于两体混态判断是: 按混态纠缠态定义, 当且仅当不能表示为 (3.3) 式混态可分离形式时, 是混态纠缠态。

为了量度纠缠的程度, 引入纠缠度概念。由于考察角度不同, 纠缠度的定义有好几种。分别有不同的用途, 也不完全相互吻合。但是, 作为量子纠缠程度的定量描述, 不论如何定义, 都应当满足一些共同的准则。它们是:

i) 可分离态的纠缠度应为零。

ii) 对任一组份粒子进行的任何局域么正变换 (LU) 不应改变纠缠度; 这就是说, LU 等价的态应有相同的纠缠度。

iii) 在各参加方的各自局域操作以及他们彼此间的经典通讯, 以便交换信息调整各自操作这一大类操作 ($LOCC$) 之下, 表征整个系统量子特性的纠缠度不应增加。比如, 在 $LOCC$ 操作下, 4 个 *Bell* 基显然可以彼此转换, 因此它们纠缠度应当相等。

iv) 直积态纠缠度应当是可加的。按理说, 不论纯态和混态的所有纠缠度定义都应当一律遵守这条, 但事实是对有些纠缠度定义, 尚未能够证明满足这个张量积可加条件, 甚至已经弄清楚了, 可提纯纠缠度(由于存在束缚态)对于某些混态并不遵守这一条件。

von Neumann 概念详见【15】第 13 章, 下面只预先简单介绍。

【定义】任何密度矩阵 ρ 的 *von Neumann* 熵为:

$$S(\rho) = -\text{tr}(\rho \log \rho) \quad (3.12)$$

物理上, 一个量子态的 *von Neumann* 熵是对这个量子态缺少了解、认识不完备的一种度量, 但却没有说明这种认识不完备性的来源。

选取使密度矩阵 ρ 对角化的正交基 $\{|x\rangle\}$ ，求得其谱表示，有

$$\rho = \sum_x \lambda_x |x\rangle\langle x| \rightarrow f(\rho) = \sum_x f(\lambda_x) |x\rangle\langle x|$$

$$\therefore \boxed{S(\rho) = -\sum_x \lambda_x \log \lambda_x = H(X)} \quad (3.13)$$

这里，系综 $X = \{x, \lambda_x\}$ 含义是：力学量取 x 值时的概率是 λ_x 。所以，将密度矩阵转向谱表示即知，量子系综 $\rho = \{\rho_x, p_x\}$ 的 *von Neumann* 熵 $S(\rho)$ ，其数值等于对应经典系综 $X = \{x, \lambda_x\}$ 的 *Shannon* 熵 $H(X)$ 。推导 (3.13) 式的过程也是最常见的计算 *von Neumann* 熵的办法。在转换到量子态的本征表象，或是在完全退相干到相互正交态之后，情况都将如此。总而言之，在信号字符表是由相互正交归一纯态组成情况下，量子信息源就退化为经典信息源：所有信号态都能够理想地可区分开，并且 $S(\rho) = H(X)$ 。

例如，最简单的二维混态——*Bloch* 球心的信息垃圾态 $\rho = \frac{1}{2}I$ ，*von Neumann* 熵 $S\left(\frac{1}{2}I\right) = 1$ 为最大，并等于经典 *Shannon* 熵 $H\left(\frac{1}{2}\right) = 1$ 。

为了方便，*von Neumann* 熵定义中，对数的底数取作 2。

再例如，对两个 *qubit* 的最大纠缠态——4 个 *Bell* 基，可得

$$E_p = S(\rho_A) = S(\rho_B) = S\left(\frac{1}{2}I\right) = -\text{tr}\left\{\frac{1}{2}\log\frac{1}{2}\right\} = 1; \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

从而 *Bell* 基的纠缠度也归一化为 1。作为两粒子的统一体系的纯态，*von Neumann* 熵 $S(\rho_{AB}) = 0$ ；但就 A 或 B 单粒子而言，*von Neumann* 熵都相同：最大值 $S(\rho_A) = S(\rho_B) = 1$ 。这表明，所有关于这个态的信息完全蕴含在它们相互关联之中，任一单个粒子的状态都是完全不确定的、知识都是完全不定的，各自 *von Neumann* 熵都是最大的。注意，这里“不确定性”是指人们对该粒子态知识的“缺乏”，不应当和 *Heisenberg* 不确定性相混淆。后者关于测量预言和测量极限的不确定性，即便对纯态也存在。

第三个例子，设

$$\rho = \frac{3}{4}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{4}|0\rangle\langle 1| + \frac{1}{4}|1\rangle\langle 0| + \frac{1}{4}|1\rangle\langle 1| = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

可得 ρ 本征值 $\lambda_1 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \right), \lambda_2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \right)$, 此 ρ 的 *von Neumann* 熵为

$$S(\rho) = -\lambda_1 \log \lambda_1 - \lambda_2 \log \lambda_2 = 0.6009$$

2, 纠缠度的定义。目前, 常用的纠缠度定义有 4 种:

i) 部分熵纠缠度 (*the partial entropy of entanglement*)。

【部分熵纠缠度定义】量子态 $|\psi\rangle_{AB}$ 的部分熵纠缠度 $E_p(|\psi_{AB}\rangle)$ 为:

$$\begin{cases} E_p(|\psi\rangle_{AB}) = S(\rho_A) \\ S(\rho_A) = -\text{tr}^{(A)}(\rho_A \log \rho_A); \quad \rho_A = \text{tr}^{(B)}\rho_{AB} \equiv \text{tr}^{(B)}(|\psi\rangle_{AB}\langle\psi|) \end{cases} \quad (3.14a)$$

这是将单体量子态无知程度的度量 (部分熵) 转换当作两体之间量子纠缠程度的度量, 就是说, 将单体制备信息丧失程度作为了两体之间纠缠程度的一种量度。对于两体混态, 部分熵纠缠度 E_p 可直接推广为 *von Neumann* 相对信息熵 E_I 。 E_I 等于互信息 $S(A:B)$ 之半:

$$E_p = E_I = \frac{1}{2} S(A:B) = \frac{1}{2} \{S(\rho_A) + S(\rho_B) - S(\rho_{AB})\} \quad (3.14b)$$

由【15】第 12 章中 *von Neumann* 熵的次可加性, E_I 肯定为非负的。但相对信息熵 E_I 包含了经典的信息关联, 在 *LOCC* 下可以增加, 因此它也不是对量子纠缠程度的好的度量。

ii) 相对熵纠缠度 (*the relative entropy of entanglement*)。

【相对熵 $S(\rho_{AB} \parallel \sigma_{AB})$ 定义】态 ρ_{AB} 相对于可分离态 σ_{AB} 的相对熵:

$$S(\rho_{AB} \parallel \sigma_{AB}) = \text{tr} \{ \rho_{AB} (\log \rho_{AB} - \log \sigma_{AB}) \} \quad (3.15)$$

可以证明: (3.15) 式对任何两个态总是正的。

证明: 利用对于任意凸性函数 $f(x)$ 的广义 *Klein* 不等式:

$$\text{tr} \{ (f(b) - f(a)) \} \geq \text{tr} \{ (b - a) f'(a) \}$$

取体系任意两个态 ρ_1, ρ_2 , 令凸性函数 $f(\rho_i) = -\rho_i \log \rho_i, i=1,2$ 。有

$$\begin{aligned} -S(\rho_1 \parallel \rho_2) &= \text{tr} \{ -\rho_1 (\log \rho_1 - \log \rho_2) \} = \text{tr} \{ f(\rho_1) - f(\rho_2) + f(\rho_2) + \rho_1 \log \rho_2 \} \\ &\leq \text{tr} \{ (\rho_1 - \rho_2)(-\log \rho_2 - 1) - (\rho_2 - \rho_1) \log \rho_2 \} = -\text{tr}(\rho_1 - \rho_2) = 0 \end{aligned}$$

所以 $S(\rho \parallel \sigma) \geq 0$ 。

【相对熵纠缠度 $E_r(\rho_{AB})$ 定义】量子态 ρ_{AB} 对于所有可分离态 σ_{AB} 相对熵中的最小值：

$$E_r(\rho_{AB}) = \min_{\sigma_{AB} \in D} S(\rho_{AB} \parallel \sigma_{AB}) \quad (3.16)$$

这里 D 为所有两体可分离态的集合。如果用 σ_{AB}^* 表示能使此处相对熵取最小值的可分离态，则态 ρ_{AB} 相对熵纠缠度计算的关键是找出这个可分离态 σ_{AB}^* 。由相对熵纠缠度的定义可以看出，它常常难于计算，所以下面叙述两个定理，有助于这些计算。

iii) 形成纠缠度 (entanglement of formation)。

【形成纠缠度定义】量子态 ρ_{AB} 的形成纠缠度 $E_F(\rho_{AB})$ 是 ρ_{AB} 的所有可能分解中部分熵权重和的极小值：

$$E_F(\rho_{AB}) = \min_{\{p_i, |\psi_i\rangle_{AB}\}} \sum_i p_i E_p(|\psi_i\rangle_{AB}) \quad (3.17)$$

其中， $\{p_i, |\psi_i\rangle_{AB}\}$ 是 ρ_{AB} 各种分解中的一种 $\rho_{AB} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle_{AB} \langle \psi_i|$ ，而

$E_p(|\psi_i\rangle_{AB})$ 是 $|\psi_i\rangle_{AB}$ 的部分熵纠缠度。注意，这里 ρ_{AB} 分解不一定是相互正交的，只要求 $|\psi_i\rangle_{AB}$ 是此两体的归一化纯态。

iv) 可提纯纠缠度 (entanglement of distillation)。

设 Alice 和 Bob 共享 N 份两体量子态 ρ_{AB} ，他们通过 LOCC 能够获得的 EPR 对个数最多为 $k(N)$ 。

【可提纯纠缠度定义】量子态 ρ_{AB} 可提纯纠缠度 $D(\rho_{AB})$ ：

$$D(\rho_{AB}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{k(N)}{N} \quad (3.18)$$

这里 LOCC 是 Alice 和 Bob 各自所作的局域测量与相互间的经典信息通讯。如果限制信息传递的方向，则情况和定义有所不同。注意，有的多粒子纠缠可提纯，有的不可以，见文献【15】§4.2 第 5 点。

最后指出，对两体纯态，以上不同纠缠度定义给出的纠缠度都是相等的，即唯一的。*Popescu* 和 *Rohrlich*【3】仿照热力学第二定律证明得出：对两体纯态，纠缠度只有一种，是唯一的。他们论证的主要出发点是：在渐近可逆的 *LOCC* 作用下，纠缠度应该不变。但对于多体纯态和两体及多体混态，按不同定义算出的数值可能不等，并且大小的顺序也不固定，甚至难以引入合理的纠缠度定义。

3，量子纠缠的物理本质和若干误解

i) 量子纠缠的物理本质

从实验观测角度：纠缠的本质是关联塌缩 (*the non-local correlation collapse*);

从理论分析角度：纠缠等价于关联非定域性；

从允许内部相对位相差角度：两粒子量子态存在纠缠的充要条件是：无论以什么方式在两粒子间引入任意相对位相差都将改变这个量子态。反之，如果在两粒子间引入任意相对位相差而量子态不改变，此量子态必定是可分离的。此时也就必定能够容纳定域性的隐变数。但反之不行，因为也有遵守不等式的（能容纳隐变数的）量子态。

从量子信息论角度：纠缠的本质是量子关联中的信息。

ii) 量子纠缠概念的若干误解

“量子纠缠纯粹是一个与表象有关的、如何进行因式化的数学表述问题”。不是这样。量子纠缠是个纯量子的、物理的概念。一个多体纠缠态不可能通过任何因式化分析而成为可分离的形式。反过来，一个多体的可分离态，如果表面上看去似乎是纠缠的，那只是因为使用了（全部或部分）纠缠态基矢来表达的结果。

“量子纠缠就是（或体现是）*Bell* 不等式意义上的空间非定域性——*Bell* 非定域性”。这是片面的。因为也有量子纠缠态是遵守 *Bell* 不等式的。必须知道，任一 *Bell*-型理论（不等式或等式的形式）不但难以定量度量两体量子纠缠的程度，甚至也不一定就是显示量子纠缠、显示量子理论空间非定域性的最恰当的工具！就目前大多数 *Bell* 型理论来说，破坏 *Bell* 型不等式只是显示量子纠缠存在的充分条件，而不是必要条件。这些将在后面空间非定域性中阐述。

“单粒子（在其不同自由度之间）也有量子纠缠”。这样理解

不合适。量子纠缠概念是个多体概念，主要用于量子通讯领域。

“从实验观测角度，量子纠缠本质是测量中体现的关联”。这没有将“关联”说清楚。因为实验上，可分离态也可以有关联，但这时的关联不具有相干性质，不是量子关联，而是经典关联。详见以后有关讲的内容以及下面混态可分离态的描述。

“力学量耦合必定导致量子态纠缠”。虽然常常如此，但并不总是如此。简单例子是两个电子自旋耦合的 4 个耦合基中就有两个是可分离态。

“量子态纠缠总是直接来自相互作用”。不一定。比如 *Swapping* 过程就表明，可以用间接并遥控的方式产生量子纠缠。

§3.3，混态及其描述

1，再谈混态概念

由于经常研究众多量子体系的集体行为，也由于宏观观察常有的局限性，特别是大量重复观测，为了便于描述一类量子体系组成系综的状态和统计测量结果，不得不经常使用混态概念。混态是量子体系若干个不一定相互正交纯态 $|\psi^i\rangle_{AB}$ 的非相干混合。非相干混合是指，这些纯态 $|\psi^i\rangle_{AB}$ 之间没有固定的位相关联，不存在相干叠

加产生干涉问题。经常将大量多粒子现象折算到单个量子体系上，说单个量子体系处在某个混态上，并说混态是“稠密的”等等，这些说法只是归一化的等效提法。比如，太阳热核聚变中大量处于激发态的原子，它们彼此间并无相干性，发出的太阳光就是非相干光，如果整体地、宏观地描述这种大量激发原子系综的状态，便需要混态的概念。再有，电子枪中受热金属发射的热电子，它们自旋状态也是非极化的混态。但要注意，事实上，自然界中任何单个微观粒子总是处在纯态上，即便是处在含时叠加纯的态上，或是和别的粒子纠缠关联着处在某种纯态上。

多粒子系统的一般混态是前面两粒子情况的简单推广。对混态的描述常用两种办法。

其一，“纯态系综”概念：一个多粒子混态其实是一个量子系综，是一些不一定相互正交的纯态集合。归一化为单体语言，混态是一

些不一定相互正交的纯态按某种概率分布的非相干混合：

$$\left\{ p_i, |\psi^i\rangle_{AB\dots M}, i=1,2,\dots, \sum_i p_i=1 \right\} \quad (3.19)$$

注意，混态的系综表述同时也指明了此混态的具体制备方法。此外，系综表述的最一般情况是一些纯态和混态的非相干混合序列。

其二，密度矩阵 $\rho_{AB\dots M}$ 表述：系统一般状态也常用正定厄米的密度矩阵来描写。注意，如果知道上面纯态系综表述，容易写出系统的密度矩阵，但反之则不能。因为不像前者，密度矩阵描写方法未能指明此混态的具体制备办法。不过，总可以将给定的密度矩阵用谱表示，

$$\rho_{AB\dots M} = \sum_i p_i |\psi^i\rangle_{AB\dots M} \langle \psi^i|, \quad \sum_i p_i=1, \quad 0 < p_i \leq 1 \quad (3.20a)$$

$$\begin{cases} |\psi^i\rangle_{AB\dots M} = \sum_{ab\dots m} C_{ab\dots m}^i |\psi_a\rangle_A \otimes |\phi_b\rangle_B \otimes \dots \otimes |\chi_m\rangle_M \\ {}_{M\dots BA} \langle \psi^j | \psi^i \rangle_{AB\dots M} = \delta_{ij} \end{cases} \quad (3.20b)$$

$$t_r(\rho_{AB\dots M})=1, \quad t_r(\rho_{AB\dots M}^2) < 1 \quad (3.20c)$$

表明一种正交态制备办法。但一般情况是 $\rho_{AB\dots M}$ 可以由一些非正交态混合而成，这时就不可能由 $\rho_{AB\dots M}$ 推知原来的制备方法。另外注意，由于混态密度矩阵至少含有两个线性无关纯态的非相干混合（如果不能直接由所给表达式看出这点，最好对这个态做 *Schmidt* 分解，所得项数必定 ≥ 2 ），所以对混态密度矩阵平方求迹肯定小于 1；而纯态则是 $t_r(\rho_{AB\dots M}^2)=1$ ，这也是 $\rho_{AB\dots M}$ 为纯态的标志。

2，三谈混态概念——混态起源于纠缠与测量

系统 A 处于混态的原因有二：其一，与环境（或另一系统）B 相互作用造成的量子纠缠。这时分为两种情况：一是对 B 测量，造成 A 的关联塌缩，成为混态。另一是，如果只限于局部观察 A，不考虑（也常常难以精确考虑）B 的影响，常用办法是对 B 部分求迹。两种情况结果都呈现出：所研究系统 A 的量子态，即使原来是个纯态，也因为和环境的量子纠缠而经历某种非幺正的演变——退相干过程（*decoherent process*），成为一个混态；**其二，量子测量的塌缩【8】。**即使原先是一个孤立体系 A 的某个纯态，当实验上对大量同

类体系的同一纯态进行重复测量时，（除本征态测量之外）将产生 A 的各种可能塌缩，即非相干“选择”（*alternative*），使得即便由相同纯态组成的集合，测量后也变成一个混态系统——以一定概率分布容纳着不同的纯态（注意，这些不同的纯态未见得彼此正交！具体结果由测量方案——或许是复合型的测量方案所决定。甚至，每次塌缩后也可能是个混态，如果输入的被测态就是混态的话。）此外，混态更经常是上面两条（量子纠缠加测量）的综合结果。简言之，纠缠和测量导致混态。更进一步说，

测量 $\xrightarrow{\text{非相干选择}}$ 产生相应的纯态系统——混态

有时实验装置能够从 A 和 B 纠缠态 $\alpha|\psi_1\rangle_A \otimes |\varphi_1\rangle_B + \beta|\psi_2\rangle_A \otimes |\varphi_2\rangle_B$ 中分离开 A 与 B 。比如，实验装置留下 A ，让 B 出去：谐振腔中原子 A 留下，光场光子 B 出去；*Stern-Gerlach* 装置中，磁场指示装置留下而入射电子出去；中子干涉仪的晶体留下而两路中子出去，等等。这时，留下的 A 的情况决定出去的 B 的状态。即，

——如果 $|\psi_1\rangle_A$ 和 $|\psi_2\rangle_A$ 之间位相差是无规的，或是对 A 做了测量

（“选择”），则出去的 B 为混态： $\rho_B = |\alpha|^2 |\varphi_1\rangle_B \langle \varphi_1| + |\beta|^2 |\varphi_2\rangle_B \langle \varphi_2|$ ；

——如果 $|\psi_1\rangle_A$ 和 $|\psi_2\rangle_A$ 相同或位相差固定（例如： A 为中子干涉仪而 B 是由两路行进的中子；或者，磁场在 Z 轴、入射极化在 $X-Y$ 面内的 *Stern-Gerlach* 装置， B 是由磁场出来的电子）。则出去的 B 为叠加纯态： $|\varphi\rangle_B = \alpha|\varphi_1\rangle_B + \beta|\varphi_2\rangle_B$ 。

§3.4，混态系统解释的含糊性

1，密度矩阵集合的凸性

注意，一个 N 维厄密矩阵共有 $\frac{1}{2}(2N^2 - 2N) + N = N^2$ 个独立变数。

而在半正定厄密矩阵集合中，密度矩阵由于迹为 1，自由度为 $N^2 - 1$ 。

【定义 1】一个矢量空间的子集被说成是凸的，如果连结子集中任何两点的直线段也包含在这个子集中。

【定理】在 N 维 *Hilbert* 空间 $\mathcal{H}$ 中，所有密度矩阵构成 $N \times N$ 厄密半正定矩阵的 N^2 维空间中的一个 $(N^2 - 1)$ 维凸集。

证明：设 ρ_1, ρ_2 是两个密度矩阵，就是说满足前述三个条件（厄密、

半正定、迹为 1)。则它们的任意凸性和（表现为 λ 是 $[0, 1]$ 中的任意数）

$$\rho(\lambda) = \lambda\rho_1 + (1-\lambda)\rho_2$$

也满足密度矩阵三个条件。其实只须证明对任意态满足半正定就够了。事实确实如此，因为

$$\langle\psi|\rho(\lambda)|\psi\rangle = \lambda\langle\psi|\rho_1|\psi\rangle + (1-\lambda)\langle\psi|\rho_2|\psi\rangle \geq 0$$

证毕。

【定义 2】在凸集中不能表达为其它元素的线性组合的元素称为凸集的端点（极点）。

【定理】不可能将一个纯态密度矩阵表示为另两个密度矩阵的凸性和。就是说，纯态密度矩阵必是密度矩阵集合的端点。

证明：用反证法。假设 $\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = \lambda\rho_1 + (1-\lambda)\rho_2$ ，记与 $|\psi\rangle$ 态正交的任一态矢为 $|\psi^\perp\rangle$ ，即 $\langle\psi|\psi^\perp\rangle = 0$ 。于是有

$$0 = \langle\psi^\perp|\rho|\psi^\perp\rangle = \lambda\langle\psi^\perp|\rho_1|\psi^\perp\rangle + (1-\lambda)\langle\psi^\perp|\rho_2|\psi^\perp\rangle$$

由于右边两项都是非负的，总和为零必要求它俩分别为零。如设 $\lambda \neq 0, 1$ ，则要求 ρ_1, ρ_2 均垂直于 $|\psi^\perp\rangle$ 。但 $|\psi^\perp\rangle$ 为垂直于 $|\psi\rangle$ 的任意态矢，

即， ρ_1, ρ_2 垂直于和 $|\psi\rangle$ 垂直的任意态矢，就是说 $\rho_1 = \rho_2 = \rho$ 。证毕。

但反之不一定：不能说只有纯态是密度矩阵的端点。事实上，当 $N \geq 3$ 时，端点已不一定是纯态。因为 $N \geq 3$ 时，不等于零的本征值的个数可能超过 1，从而是个混态。虽然混态必定是一些纯态的凸性和（混态密度矩阵写成谱表示为 $\rho = \sum_i p_i |i\rangle\langle i|$ ，这里求和项数不

会少于两项），但却可能是一个更高维凸集的端点——假如此处的混态已经有了零本征值的话。因为密度矩阵凸集的边界是由这样一些矩阵组成的，它们至少具有一个零本征值——于是它的附近将有负本征值的矩阵——超出密度矩阵凸集合的元素存在。简单些说，端点处的混态是这一类混态，它们的某一个或几个本征值开始要变成负值了。

其实，在 *Bloch* 球情况里已经碰到这种结构了。双态系统所有

的纯态和混态密度矩阵集合是 2×2 厄密非负单位迹的矩阵的一个三维集合，这个集合构成一个单位球。球是凸性的，它的端点是球面上的点——对应一个纯态，而球内每点对应一个混态。

2，三谈混态概念

下面从系综制备观点分析混态概念和密度矩阵描述的含糊性。

虽然任何经典的概率分布总可以唯一的分解为一些极端分部的凸性和；然而量子理论中，对任一混态 ρ ，虽然只有一种正交分解，但非正交纯态 ρ_i 的凸性组合却有无穷多种。如果将混态按“纯态系综”解释，那么这类解释（和制备）将是含糊的、远不是唯一的【6】。就是说，虽然纯态的制备方法是唯一的、确定的，但混态的非正交分解与制备方法不是唯一的。不过，制备出的这些 ρ_A （仅就 A 中所做的）对任何观察的测量结果将完全相同。

从纯态系综来看一个给定的混态，混态的密度矩阵就是将这些纯态密度矩阵按给定的概率分布非相干相加。正是在这种概率相加合并过程中，丧失了如何组成和制备这个混态的信息，含糊性也就由此产生！所以，每个混态密度矩阵其实都是代表了如此一类纯态系综，这类系综在统计行为上完全相同，因而是统计地不可区分的。甚至，由于量子测量塌缩的相干分解和随机性，一般说也难于由各个系综里单个态测量来区分这些不同的系综。

总之，将混态概念用到单个微观粒子上的提法仅仅是就归一化意义上说的。混态概念纯粹属于系综的概念，不属于单个微观粒子的，正如同温度概念属于平衡态统计系综的，并不属于单个空气分子一样。但是，由于混态在实验制备解释上的含糊和多义，它甚至还不及平衡态统计系综的温度概念。

其实，混态概念和密度矩阵都是不细致的，丢掉了许多量子信息的描述方法。它们是两个非但不全面，甚至有含糊性的描述。但是，真正物理的东西不应当是含糊的，公说公有理婆说婆有理，不唯一的。再说，观察任何单个微观体系，都是处在纯态上！甚至可以处在含时叠加纯态或是和别的粒子纠缠纯态上！决无可能观察到任何单个微观粒子处在某个（容许插入内部相因子而不改变的）混态上！即使单次测量随机塌缩中，被测纯态也总是塌缩向其某个分支纯态！这两点使我们可以说：混态概念和密度矩阵方法仅仅是描

述大量同类测量结果的人造事物，用于计算统计效果的数学工具，是关于无穷多同类纯态序列在统计行为上的等效概括。*Gleason* 定理则表明了这个使全部测量数据逻辑自洽的数学工具是存在的。

§3.5, 两体量子系统纠缠度计算

1, 两体相对熵计算的定理 1 及应用【13】

相对熵纠缠度在量子信息领域起着很重要的作用，对于两体纯态，它等于部分熵纠缠度、形成纠缠度、可提纯纠缠度等；对于两体混态，它是可提纯纠缠度的上限，但它的计算却比较困难。现在，这里推广了只针对纯态情况的 *Vedral—Plenio* 定理【11】——相对熵纠缠度就等于部分熵纠缠度。下面叙述对该定理的推广，从而能够求出一大类两体量子态相对熵纠缠度的数值。

【相对熵计算定理 1】 【12、13】

“对可以表示为 $\rho_{AB} = \sum_{n_1 n_2} \alpha_{n_1 n_2} |\varphi_{n_1} \psi_{n_2}\rangle_{ABBA} \langle \varphi_{n_2} \psi_{n_1}|$ 形式的两体量子

态，其相对熵纠缠度由下式给出

$$E_r(\rho_{AB}) = -\sum_n \alpha_{nn} \ln \alpha_{nn} - S(\rho_{AB}) \quad (3.21a)$$

而且使 E_r 取最小值的可分离态为

$$\sigma_{AB}^* = \sum_n \alpha_{nn} |\varphi_n \psi_n\rangle_{AB} \langle \varphi_n \psi_n| \quad (3.21b)$$

其中 $\{|\varphi_n\rangle_A\}\{|\psi_n\rangle_B\}$ 为 A 和 B 体系的一组正交归一基。

$S(\rho_{AB}) = -\text{tr}\{\rho_{AB} \log \rho_{AB}\}$ 是 ρ_{AB} 的 *von Neumann* 熵。”

【定理 1 证明】既然有了 σ_{AB}^* 的一个猜测，现在需要证明它是使 $E_r(\rho_{AB})$ 取最小值的可分离态。证明分为两部分。

【第一部分】对任意可分离态 σ_{AB} ，可证有 ($0 < x \leq 1$)

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} S(\rho_{AB} \| (1-x)\sigma_{AB}^* + x\sigma_{AB}) \right|_{x=0} \geq 0$$

【证明】为简明令 $(1-x)\sigma_{AB}^* + x\sigma_{AB} \equiv A(x)$, 于是

$$\log A(x) = \int_0^\infty \left[\frac{t}{t^2 + 1} - \frac{1}{A(x) + t} \right] dt$$

于是

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x} S(\rho_{AB} \| ((1-x)\sigma_{AB}^* + x\sigma_{AB})) &\equiv \frac{\partial}{\partial x} S(\rho_{AB} \| A(x)) \\
&= \frac{\partial}{\partial x} \text{tr} \{ \rho_{AB} \log \rho_{AB} - \rho_{AB} \log A(x) \} \\
&= -\text{tr} \left\{ \rho_{AB} \frac{\partial}{\partial x} \int_0^\infty \left[\frac{t}{t^2+1} - \frac{1}{A(x)+t} \right] dt \right\} \\
&= \text{tr} \left\{ \rho_{AB} \int_0^\infty \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{A(x)+t} \right) dt \right\}
\end{aligned}$$

利用逆算符求导公式

$$\begin{aligned}
\Omega(x)^{-1} &= \Omega(x)^{-1} \Omega(x) \Omega(x)^{-1} \Rightarrow \frac{d\Omega(x)^{-1}}{dx} = -\Omega(x)^{-1} \frac{d\Omega(x)}{dx} \Omega(x)^{-1} \\
\left. \frac{\partial}{\partial x} S(\rho_{AB} \| A(x)) \right|_{x=0} &= -\text{tr} \left\{ \rho_{AB} \int_0^\infty \left(\frac{1}{A(x)+t} \frac{\partial A(x)}{\partial x} \frac{1}{A(x)+t} \right) dt \right\} \Big|_{x=0} \\
&= -\text{tr} \left\{ \rho_{AB} \int_0^\infty \left(\frac{1}{\sigma_{AB}^* + t} (\sigma_{AB} - \sigma_{AB}^*) \frac{1}{\sigma_{AB}^* + t} \right) dt \right\} \Big|_{x=0}
\end{aligned}$$

小括号中 σ_{AB}^* 和分母对易， t 积分可以积出，结果为 1。得

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} S(\rho_{AB} \| A(x)) \right|_{x=0} = 1 - \int_0^\infty \text{tr} \left\{ (\sigma_{AB}^* + t)^{-1} \rho_{AB} (\sigma_{AB}^* + t)^{-1} \sigma_{AB} \right\} dt$$

注意 $\sigma_{AB}^* = \sum_n \alpha_{nn} |\varphi_n \psi_n\rangle_{AB} \langle \varphi_n \psi_n|$ 为投影算符对应相乘求和，不难得到

$$(\sigma_{AB}^* + t)^{-1} \rho_{AB} (\sigma_{AB}^* + t)^{-1} = \sum_{nn'} (\alpha_{nn} + t)^{-1} \alpha_{nn'} (\alpha_{n'n'} + t)^{-1} |\varphi_n \psi_n\rangle \langle \varphi_{n'} \psi_{n'}|$$

令 $g(n, n') \equiv \alpha_{nn'} \int_0^\infty dt (\alpha_{nn} + t)^{-1} (\alpha_{n'n'} + t)^{-1}$, $g(n, n) = 1$, $|g(n, n')| \leq 1$, 继续上述

计算。暂且令可分离态 σ_{AB} 为最简单情况，

$$\sigma_{AB} = |\alpha\rangle_A \langle \alpha| \otimes |\beta\rangle_B \langle \beta|, \quad |\alpha\rangle_A = \sum_n a_n |\varphi_n\rangle_A, \quad |\beta\rangle_B = \sum_{n'} b_{n'} |\psi_{n'}\rangle_B,$$

得

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} S(\rho_{AB} \| A(x)) \right|_{x=0} - 1 = - \sum_{n_1 n_2} g(n_1, n_2) a_{n_2} b_{n_2} a_{n_1}^* b_{n_1}^*$$

可以估值,

$$\begin{aligned} \left| \left. \frac{\partial}{\partial x} S(\rho_{AB} \| A(x)) \right|_{x=0} - 1 \right| &\leq \sum_{n_1 n_2} |g(n_1, n_2)| \cdot |a_{n_2} b_{n_2} a_{n_1}^* b_{n_1}^*| \\ &\leq \sum_n |a_n|^2 \cdot \sum_m |b_m|^2 = 1 \end{aligned}$$

由此即得

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} S(\rho_{AB} \| ((1-x)\sigma_{AB}^* + x|\alpha\beta\rangle\langle\alpha\beta|)) \right|_{x=0} \geq 0$$

对于一般分离态

$$\sigma_{AB} = \sum_i r_i |\alpha^i \beta^i\rangle_{AB} \langle \alpha^i \beta^i| \in D$$

由上面导数公式所表明的导数与 σ_{AB} 呈线性关系, 即得

$$\left. \frac{\partial}{\partial x} S(\rho_{AB} \| ((1-x)\sigma_{AB}^* + x\sigma_{AB})) \right|_{x=0} = \sum_i r_i \left. \frac{\partial}{\partial x} S(\rho_{AB} \| ((1-x)\sigma_{AB}^* + x|\alpha\beta\rangle\langle\alpha\beta|)) \right|_{x=0} \geq 0$$

【第二部分】接着证明: 由这个导数不等式, 再根据下面证明的相对熵是凹性(平均值的函数不大于函数的平均值)的结论, 上面 σ_{AB}^* 对应的是最小点。定理即得证明。

【证明】对任意两个两体态 σ_1, σ_2 , 有

$$S(\rho \| ((1-x)\sigma_1 + x\sigma_2)) = \text{tr} \{ \rho \log \rho - \rho \log [(1-x)\sigma_1 + x\sigma_2] \}$$

由对数函数的凸性(平均值的函数不小于函数的平均值), 继续有

$$\begin{aligned} &\leq \text{tr} \{ \rho \log \rho - (1-x)\rho \log \sigma_1 - x\rho \log \sigma_2 \} \\ &= \text{tr} \{ (1-x)\rho \log \rho + x\rho \log \rho - (1-x)\rho \log \sigma_1 - x\rho \log \sigma_2 \} \\ &= (1-x)S(\rho \| \sigma_1) + xS(\rho \| \sigma_2) \end{aligned}$$

这表明, 对任意两个两体态 σ_1, σ_2 , 相对熵是凹性的,

$$0 \leq S(\rho \| ((1-x)\sigma_1 + x\sigma_2)) \leq (1-x)S(\rho \| \sigma_1) + xS(\rho \| \sigma_2)$$

令 $\sigma_1 = \sigma_{AB}^*$, $\sigma_2 = \sigma_{AB}$, 有

$$0 \leq S(\rho \| (1-x)\sigma_{AB}^* + x\sigma_{AB}) \leq (1-x)S(\rho \| \sigma_{AB}^*) + xS(\rho \| \sigma_{AB})$$

最后证明定理成立, 即, 对任意 $\sigma_{AB} \in D$, 总有

$$S(\rho_{AB} \| \sigma_{AB}) \geq S(\rho_{AB} \| \sigma_{AB}^*)$$

【证明】 按上面已证的相对熵是凹性的结论, 有

$$S(\rho_{AB} \| (1-x)\sigma_{AB}^* + x\sigma_{AB}) \leq (1-x)S(\rho_{AB} \| \sigma_{AB}^*) + xS(\rho_{AB} \| \sigma_{AB})$$

这意味着 ($0 < x \leq 1$)

$$\frac{S(\rho_{AB} \| (1-x)\sigma_{AB}^* + x\sigma_{AB}) - S(\rho_{AB} \| \sigma_{AB}^*)}{x} \leq S(\rho_{AB} \| \sigma_{AB}) - S(\rho_{AB} \| \sigma_{AB}^*)$$

当 $x \rightarrow 0$ 时, 前面已经证明: 对任意可分离态 $\sigma_{AB} \in D$ 和给定的这一类 σ_{AB}^* , 左边导数总大于零。这说明

$$S(\rho_{AB} \| \sigma_{AB}^*) \leq S(\rho_{AB} \| \sigma_{AB})$$

定理 1 证毕。

【定理特例】 如果 ρ_{AB} 是纯态, 则有 $\alpha_{n_1 n_2} = \sqrt{p_{n_1} p_{n_2}}$, 此处定理即

简化为针对纯态的 *Vedral-Plenio* 定理。

定理 1 将 *Vedral-Plenio* 定理推广到更一般情况之后, 可以用来计算一大类两体量子态的相对熵。本节所得的结论对于计算形如

$$\rho_{AB} = \sum_{n_1 n_2} a_{n_1 n_2} |\varphi_{n_1} \psi_{n_1}\rangle \langle \varphi_{n_2} \psi_{n_2}| \quad (3.22)$$

量子态的相对熵纠缠度是非常有用的。比如, 对最简单的双 *qubit* 体系的量子态

$$\rho_{AB} = x|00\rangle\langle 00| + (1-x)|11\rangle\langle 11| + \alpha|00\rangle\langle 11| + \alpha^*|11\rangle\langle 00|$$

其相对熵纠缠度可由定理直接给出为

$$E_r(\rho_{AB}) = -x \log x - (1-x) \log(1-x) + \lambda \log \lambda + (1-\lambda) \log(1-\lambda)$$

其中

$$\lambda = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \sqrt{1 - 4[x(1-x) - |\alpha|^2]} \right\}$$

2, 两体相对熵计算的定理 2 及应用【12、13】

【定理 2】“体系 A 、 B 、 C 处于三体纯态 $|\Psi\rangle_{ABC}$ ，假如这里总共三个两体密度矩阵 $\rho_{AB}, \rho_{AC}, \rho_{BC}$ 中至少有两个是可分离态，则有等式

$$S(\rho_A) + E_r(B, C) = S(\rho_B) + E_r(A, C) = S(\rho_C) + E_r(A, B) \quad (3.23)$$

证明：不失一般性，设 ρ_{AB}, ρ_{BC} 为可分离态。其中 ρ_{BC} 可写为

$$\rho_{BC} = \sum_{i=1}^M p_i |\psi_i^B\rangle\langle\psi_i^B| \otimes |\phi_i^C\rangle\langle\phi_i^C|$$

其中， $\varepsilon = \{p_i, |\psi_i^B \phi_i^C\rangle, i=1, 2, \dots, M\}$ 是实现 ρ_{BC} 所需成员态最少的一个系综。

首先证明这里 ρ_{BC} 中的态 $|\phi_i^C\rangle$ 总可以取成是相互正交的。

Alice 附加一个附加体系 $A1$ ，并对此扩大了的体系做一么正变换，使 *Alice* 总体系的量子态由 $|\Psi\rangle_{ABC} \otimes |0\rangle_{A1}$ 变成

$$|\tilde{\Psi}\rangle_{ABC} = \sum_{i=1}^M \sqrt{p_i} |i^A \psi_i^B \phi_i^C\rangle$$

其中 $|i^A\rangle$ 是 *Alice* 扩大了的体系 $(A+A1)$ 的一组正交归一基矢，

Hughston-Jozsa-Wootters 的定理【14】保证这总是可实现的。

既然局域的么正变换不改变纠缠度，*Alice* 和 *Bob* 总体系所处的量子态

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{AB} &= \text{tr}^{(C)}(|\tilde{\Psi}\rangle_{ABC} \langle\tilde{\Psi}|) \\ &= \sum_{i,j=1}^M \sqrt{p_i p_j} \langle\phi_j^C|\phi_i^C\rangle \cdot |i^A\rangle\langle j^A| \otimes |\psi_i^B\rangle\langle\psi_j^B| \end{aligned}$$

仍是可分离态，于是 $\tilde{\rho}_{AB}$ 可写为

$$\tilde{\rho}_{AB} = \sum_k p_k \cdot \rho_k^A \otimes \rho_k^B$$

设 P_A 为 *Alice* 扩大了的体系的 *Hilbert* 空间的一个投影算子，很显然量子态

$$\rho_P = (P_A \otimes I_B) \tilde{\rho}_{AB} (P_A \otimes I_B)$$

仍是一个可分离态(除了一个归一化因子)。

$$P_A = |m^A\rangle\langle m^A| + |n^A\rangle\langle n^A|,$$

可得

$$\begin{aligned}\rho_P &= p_m |m^A\rangle\langle m^A| \otimes |\psi_m^B\rangle\langle \psi_m^B| + p_n |n^A\rangle\langle n^A| \otimes |\psi_n^B\rangle\langle \psi_n^B| + \\ &+ \sqrt{p_m p_n} \langle \varphi_m^C | \varphi_n^C \rangle \cdot |n^A\rangle\langle m^A| \otimes |\psi_n^B\rangle\langle \psi_m^B| \\ &+ \sqrt{p_m p_n} \langle \varphi_n^C | \varphi_m^C \rangle \cdot |m^A\rangle\langle n^A| \otimes |\psi_m^B\rangle\langle \psi_n^B|\end{aligned}$$

记 $|\psi_n\rangle = \alpha|\psi_m\rangle + \beta|\psi_{1/m}\rangle$, 其中 $\beta|\psi_{1/m}\rangle = (|\psi_n\rangle - \langle\psi_m|\psi_n\rangle \cdot |\psi_m\rangle)$ 与 $|\psi_m\rangle$ 正交。

我们选取 $|\psi_m\rangle, |\psi_{1/m}\rangle$ 做为体系 B 的基矢, 把 ρ_P 部分转置得

$$(\rho_P)^{T_B} = \begin{pmatrix} p_m & 0 & K\alpha & 0 \\ 0 & 0 & K\beta & 0 \\ K^*\alpha^* & K^*\beta^* & p_n|\alpha|^2 & p_n\alpha\beta^* \\ 0 & 0 & p_n\alpha^*\beta & p_n|\beta|^2 \end{pmatrix}$$

其中 $K = \sqrt{p_n p_m} \langle \varphi_n^C | \varphi_m^C \rangle$ 。因为 ρ_P 可分离, 所以 $(\rho_P)^{T_B}$ 正定, 这要求有

$$\langle \varphi_n^C | \varphi_m^C \rangle = 0$$

或者 $\beta = 0$ 。这就是说, 对任意 $i \neq j$, 有

$$|\varphi_j^C\rangle \perp |\varphi_i^C\rangle$$

或者

$$|\psi_j^B\rangle = |\psi_i^B\rangle$$

如果 $|\psi_j^B\rangle \neq |\psi_i^B\rangle$, 那么 $|\varphi_j^C\rangle \perp |\varphi_i^C\rangle$ 。如果 $|\psi_j^B\rangle = |\psi_i^B\rangle \neq |\psi_k^B\rangle$, 则总有

$$p_i |\varphi_i^C\rangle\langle \varphi_i^C| + p_j |\varphi_j^C\rangle\langle \varphi_j^C| = p'_i |\varphi_i'^C\rangle\langle \varphi_i'^C| + p_j |\varphi_j'^C\rangle\langle \varphi_j'^C|$$

其中 $p'_i + p'_j = p_i + p_j$, 且 $|\varphi_i'^C\rangle \perp |\varphi_j'^C\rangle$ 。既然量子态 $|\varphi_j'^C\rangle$ 和 $|\varphi_i'^C\rangle$ 都是 $|\varphi_j^C\rangle$ 和

$|\phi_i^C\rangle$ 的线性叠加，于是 $|\phi_j^C\rangle$ 和 $|\phi_i^C\rangle$ 也与 $|\psi_k^B\rangle$ 正交。这就是说， ρ_{BC} 可以重新写为

$$\rho_{BC} = \sum_{i=1}^M p'_i |\psi_i^B\rangle \langle \psi_i^B| \otimes |\phi_i^C\rangle \langle \phi_i^C|$$

其中 $|\phi_i^C\rangle$ 为体系 C 的一组正交归一基矢。于是我们就证明了，前面 ρ_{BC} 写为可分离形式时，其中的态 $|\phi_i^C\rangle$ 总是可以取成相互正交的。

Alice 通过附加体系和局域的幺正变换可以将态 $|\Psi\rangle_{ABC}$ 变成

$$|\tilde{\Psi}\rangle_{ABC} = \sum_{i=1}^M \sqrt{p'_i} |i^A \psi_i^B i^C\rangle$$

这里 $\sum_i p'_i = 1$ ，且 $|i^A\rangle$ 和 $|i^C\rangle \equiv |\phi_i^C\rangle$ 分别是体系 A 和 C 的一组正交归一

态矢，而 $|\psi_i^B\rangle$ 为体系 B 的一组归一态矢，但不一定相互正交。

这时，*Alice* 和 *Claire* 总体系的量子态为

$$\begin{aligned} \rho'_{AC} &= \text{tr}^{(B)} \left(|\tilde{\Psi}\rangle_{ABC} \langle \tilde{\Psi}| \right) \\ &= \sum_{i,j} \sqrt{p'_i p'_j} \langle \psi_j^B | \psi_i^B \rangle \cdot |i^A i^C\rangle \langle j^A j^C| \end{aligned}$$

考虑到局域的幺正变换不改变相对熵纠缠度和 *von Neumann* 熵，由定理 1，可得

$$\begin{aligned} E_r(A, C) &= E_r(\rho_{AC}) = E_r(\rho'_{AC}) \\ &= -\sum_i p'_i \log p'_i - S(\rho_{AC}) = H(\{p'_i\}) - S(\rho_B) \end{aligned}$$

其中 $H(\{p'_i\}) = -\sum_i p'_i \log_2 p'_i$ 。因为 ρ_{AB} 和 ρ_{BC} 都是可分离态，所以

$$E_r(A, B) = E_r(B, C) = 0$$

同时有

$$\begin{aligned}
\rho'_A &= \text{tr}^{(C)}(\rho'_{AC}) = \sum_i p'_i \cdot |i^A\rangle\langle i^A| \\
\rho'_C &= \text{tr}^{(A)}(\rho'_{AC}) = \sum_i p'_i \cdot |i^C\rangle\langle i^C| \\
S(\rho_A) &= S(\rho'_A) = -\sum_i p'_i \log_2 p'_i \equiv H(\{p'_i\}) \\
S(\rho_A) &= S(\rho_C) = H(\{p'_i\})
\end{aligned}$$

这样就得到

$$S(\rho_A) + E_r(B, C) = S(\rho_B) + E_r(A, C) = S(\rho_C) + E_r(A, B) = H(\{p'_i\})$$

这就证明了定理 2。

由定理 2 可直接得如下推论：

【推论】 如果两体量子态 ρ_{AB} 可以被纯化为三体纯态 $|\Psi_{ABC}\rangle$

$\{\rho_{AB}$ 可以被纯化为三体纯态 $|\Psi_{ABC}\rangle$ 含意是 $\rho_{AB} = \text{tr}^{(C)}(|\Psi_{ABC}\rangle\langle\Psi_{ABC}|)\}$ ，而约化的两体密度矩阵 ρ_{AC} 和 ρ_{BC} 是可分离态，则 ρ_{AB} 的相对熵纠缠度由下式给出

$$E_r(\rho_{AB}) = S(\rho_A) - S(\rho_C) = S(\rho_B) - S(\rho_C) \quad (3.24)$$

其中 $\rho_{\alpha\beta}$ 为两体系 α 和 β ($\alpha, \beta = A, B, C, \alpha \neq \beta$) 的约化密度矩阵，而 ρ_α 为体系 α 的约化密度矩阵。很显然这时有 $S(\rho_A) = S(\rho_B)$ 。

例如，两体量子态 $\rho_{AB} = \frac{1}{3}\{2|01\rangle\langle 01| + |10\rangle\langle 10| + |01\rangle\langle 10| + |10\rangle\langle 01|\}$ ，可以被纯化为三体纯态

$$|\Psi_{ABC}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\{|100\rangle + |011\rangle + |010\rangle\}$$

而 ρ_{AC} 和 ρ_{BC} 是可分离态，由上述结论即得

$$E_r(\rho_{AB}) = S(\rho_A) - S(\rho_C) = H\left(\frac{2}{3}\right) - H\left(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{5}}{6}\right)$$

这里 $H(p) = -p \ln p - (1-p) \ln(1-p)$ ，是 *Shannon* 熵。

3、两体连续变量量子态纠缠度的计算方法【20、15】

关于连续变量纠缠度计算问题，*Parker* 等人【16】在这方面迈出了重要的一步，他们利用积分本征值方程方法给出了针对两体情况的纠缠度计算公式。但在一般情况下，对该积分方程只能用数值

方法去求得其本征值数列，而给出其函数解族的计算更为繁重。所以实际操作计算不但繁重，而且还难于给出约化密度算符。下面介绍在此工作基础上我们发展的，*Fock* 空间中高斯纠缠纯态纠缠度的解析计算公式。这一方法的优点是操作十分方便，即便不知道约化密度算符的本征值，利用公式也可以非常容易直接求出结果。

设 $|Z\rangle = |z_1\rangle \otimes |z_2\rangle$ 为双模相干态，则对任意 *Boson* 算符 Ω 已知有如下对角表示公式

$$\Omega =: \exp \left\{ (a_1^+, a_2^+) \begin{pmatrix} \partial_{z_1^*} \\ \partial_{z_2^*} \end{pmatrix} + (\partial_{z_1}, \partial_{z_2}) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \right\} : \langle Z | \Omega | Z \rangle \Big|_{z_1=z_2=0} \quad (3.25)$$

这里 $: \dots :$ 表示正规乘积符号。由此可将任意两体密度算符表示为

$$\rho_{12} =: \exp \left\{ (a_1^+, a_2^+) \begin{pmatrix} \partial_{z_1^*} \\ \partial_{z_2^*} \end{pmatrix} + (\partial_{z_1}, \partial_{z_2}) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \right\} : \langle Z | \rho_{12} | Z \rangle \Big|_{z_1=z_2=0} \quad (3.26)$$

为求得约化密度算符 $\rho_1 = \text{tr}^{(2)} \rho_{12}$ ，对上式求部分迹并插入相干态完备性条件，得

$$\begin{aligned} \rho_1 &= \text{tr}^{(2)} \rho_{12} = \text{tr}^{(2)} \int \frac{d^2 z_2'}{\pi} |z_2'\rangle \langle z_2'| : \exp \left\{ (a_1^+, a_2^+) \begin{pmatrix} \partial_{z_1^*} \\ \partial_{z_2^*} \end{pmatrix} + (\partial_{z_1}, \partial_{z_2}) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \right\} : \times \\ &\quad \times \langle Z | \rho_{12} | Z \rangle \Big|_{z_1=z_2=0} \\ &= \text{tr}^{(2)} \int \frac{d^2 z_2'}{\pi} : \exp \left(a_1^+ \partial_{z_1^*} + \partial_{z_1} a_1 \right) : \times \exp \left(z_2' \partial_{z_2^*} + \partial_{z_2} z_2' \right) \langle Z | \rho_{12} | Z \rangle \Big|_{z_1=z_2=0} \end{aligned} \quad (3.27)$$

此式是任意两体连续变量纠缠纯态的部分求迹的一般公式。因此对于给定的任意两体连续变量纠缠纯态，可以方便地由此式求得该体系的约化密度算符。

作为一个例算，下面对任意两体 *Gauss* 纠缠纯态作具体计算。任意两体 *Gauss* 纠缠纯态的一般形式为

$$\rho_{12} = A_0 : \exp \left\{ \frac{1}{2} \left[(a_1^+, a_1) M_1 \begin{pmatrix} a_1^+ \\ a_1 \end{pmatrix} + (a_2^+, a_2) M_2 \begin{pmatrix} a_2^+ \\ a_2 \end{pmatrix} + 2(a_1^+, a_1) M_{12} \begin{pmatrix} a_2^+ \\ a_2 \end{pmatrix} \right] \right\} : \quad (3.28)$$

其中 M_1, M_2 为厄密矩阵； M_{12} 为对称矩阵 $M_{12} = \begin{pmatrix} e & 0 \\ 0 & e^* \end{pmatrix}$ ，矩阵元 e 是

任意复数。由于指数上含 a^+, a 一次的线性项对纠缠度没有贡献，所以在此处 ρ_{12} 表达式中没有考虑它们。可以算出它在相干态中的对角矩阵元为

$$\langle Z | \rho_{12} | Z \rangle = A_0 : \exp \left\{ \frac{1}{2} \left[(z_1^*, z_1) M_1 \begin{pmatrix} z_1^* \\ z_1 \end{pmatrix} + (z_2^*, z_2) M_2 \begin{pmatrix} z_2^* \\ z_2 \end{pmatrix} + 2(z_1^*, z_1) M_{12} \begin{pmatrix} z_2^* \\ z_2 \end{pmatrix} \right] \right\} : \quad (3.29)$$

利用 *Gaussian* 积分公式

$$\int \frac{d^2 z}{\pi} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (z^*, z) Q \begin{pmatrix} z^* \\ z \end{pmatrix} + (u, v) \begin{pmatrix} z^* \\ z \end{pmatrix} \right\} = \frac{1}{\sqrt{-\det Q}} \exp \left\{ \frac{1}{2} (u, v) Q^{-1} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \right\} \quad (3.39)$$

这里，对称矩阵 $Q = \tilde{Q}$ 为非奇异的， u 和 v 是任意复数。将 (3.25) 代入 (3.27) 式后进行积分，即得

$$\rho_1 = \frac{A_0}{\sqrt{-\det M_2}} : \exp \left\{ \frac{1}{2} \left[\begin{pmatrix} a_1^+ & a_1 \end{pmatrix} (M_1 - M_{12} M_2^{-1} \tilde{M}_{12}) \begin{pmatrix} a_1^+ \\ a_1 \end{pmatrix} \right] \right\} : \quad (3.31)$$

按量子变换理论【17】，容易脱去此式正规乘积符号，遂成为

$$\rho_1 = A_0 \sqrt{\frac{c}{-\det M_2}} \exp \left\{ \frac{1}{2} (a_1^+, a_1) N \Sigma_B \begin{pmatrix} a_1^+ \\ a_1 \end{pmatrix} \right\} \quad (3.32)$$

这里，

$$\begin{cases} (M_1 - M_{12} M_2^{-1} \tilde{M}_{12}) \Sigma_B^{-1} \equiv \begin{pmatrix} c^{-1} - 1 & c^{-1} d \\ c^{-1} b & 1 - c^{-1} \end{pmatrix} \\ M \equiv \begin{pmatrix} a & d \\ b & c \end{pmatrix}, \quad N \equiv \ln M, \quad \Sigma_B \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \end{cases}$$

其中 N 为所谓“**负厄密矩阵**”，它满足在负厄密操作下不变，即有

$$N^- = N. \text{ 负厄密操作是，对于任意偶阶 } 2n \times 2n \text{ 复矩阵 } M = \begin{pmatrix} \alpha & \delta \\ \beta & \gamma \end{pmatrix},$$

$\alpha, \beta, \gamma, \delta$ 为四个任意复 n 维方阵，负厄密操作定义如下

$$M^- \equiv \begin{pmatrix} \alpha^+ & -\beta^+ \\ -\delta^+ & \gamma^+ \end{pmatrix} \quad (3.33)$$

最后即得 *von Neumann* 熵，也即此两体的部分熵纠缠度为

$$S(\rho) = -\frac{1}{2} \left\{ \ln \left| \det(e^{-N} - 1) \right| + \text{tr} \frac{N}{1 - e^N} \right\} \quad (3.34)$$

从此式可知，对于两体情况，利用已有的配分函数公式，可以非常容易地、并且在不知道密度算符本征值的情况下，直接求出混态的纠缠度。对于多模 *Gauss* 混态情况，其约化密度算符是 (3.31) 式的直接推广，因此多模 *Gauss* 混态 *von Neumann* 熵计算公式和 (3.34) 式相同。详见【15】§13.2。

练习题

[3.1] 证明：4 维态矢空间中的 *EPR* 态

$$|\psi^-\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_A|1\rangle_B - |1\rangle_A|0\rangle_B) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle_{AB} - |10\rangle_{AB})$$

不可能写成 *AB* 两体态的直积形式，即，它是不可分离的。

[3.2] 证明：所谓 *robuster* 态 $|W\rangle_{ABC} = \frac{1}{\sqrt{3}}(|100\rangle_{ABC} + |010\rangle_{ABC} + |001\rangle_{ABC})$

(也见 (4.3) 式) 其实是用三个 1/2 自旋粒子构造出的自旋角动量为 3/2 的态 $|S, m_S\rangle = |3/2, -1/2\rangle$ 。另外几个是

$$|3/2, 3/2\rangle = |111\rangle, |3/2, 1/2\rangle = 1/\sqrt{3}(|011\rangle + |101\rangle + |110\rangle), |3/2, -3/2\rangle = |000\rangle$$

[3.3] 给定完全非极化态 $\rho = \frac{1}{2}(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|)$ ，按照算符 $\sigma_{n_A}^y, \sigma_{n_B}^y$ 和 $\sigma_{n_C}^y$ 执行一系列过滤操作。计算下列结果的概率：

- i, 测量 $\sigma_{n_A}^y$ 并得到 +1，接着测 $\sigma_{n_B}^y$ 得到 +1，再测 $\sigma_{n_C}^y$ 得到 +1。
- ii, 测量 $\sigma_{n_A}^y$ 并得到 +1，接着测 $\sigma_{n_B}^y$ 得到 +1 或 -1，再测 $\sigma_{n_C}^y$ 得到 +1。
- iii, 测量 $\sigma_{n_A}^y$ 并得到 +1，接着测 $\sigma_{n_C}^y$ 得到 +1。

[3.4] 考虑下述粒子数 $N \gg 1$ 的五个量子系综：

- i, S_1 由在态 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 中随机分布的粒子所组成；
- ii, S_2 由态 $\frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle)$ 和 $\frac{1}{2}(|0\rangle - |1\rangle)$ 中随机分布粒子所组成；

iii, S_3 由态 $\frac{1}{2}(|0\rangle - i|1\rangle)$ 和 $\frac{1}{2}(|0\rangle + i|1\rangle)$ 中随机分布粒子所组成;

iv, S_4 由在态 $\sin(\theta/2)|0\rangle + \cos(\theta/2)e^{i\varphi}|1\rangle$ 的粒子所组成, 这里 θ

和 φ 是两个常数分布的随机变数;

v, S_5 由在态 $\sin(\theta/2)|0\rangle + \cos(\theta/2)|1\rangle$ 的粒子所组成, 这里 θ 是一个常数分布的随机变数;

试问: 有可能去设计一些测量来区分粒子是哪组的吗?

[3.5] 考虑一个初始处在 $|0\rangle$ 态上的粒子。执行 N 次关于算符 $\sigma_k \equiv \hat{n}_k \cdot \vec{\sigma}$

的过滤测量, 这里 $n_k = [\sin(k\pi/2N), 0, \cos(k\pi/2N)] (k=1, 2, \dots, N)$ 。计算

部测量结果都是+1 的概率。当 $N \rightarrow \infty$ 时出现甚麽?

[3.6] *Ramsey* 谱学中一个有兴趣的问题是测量如下 *Hamiltonian* 中的频率 Δ , $H = -\frac{\Delta}{2}\sigma_z$ 。为此, 制备一个两能级系统在 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ 态上, 并让它按这个 H 演化一个固定的时间 T 。在 T 之后测量算符 σ_x ,

i, 计算得到+1 的概率;

ii, 如果重复 N 次实验, 计算得到 n 次为+1 的概率;

iii, 计算得到+1 结果的平均次数, 以及它的方均差;

iv, 证明 Δ 的测量误差是 $\delta\Delta = \frac{1}{T\sqrt{N}}$;

[3.7] 考虑上面问题有退相干情况。即, 假定在 T 期间, 退相干将密度算符非对角项 $|0\rangle\langle 1|$ 、 $|1\rangle\langle 0|$ 衰减一个因子 $e^{-\gamma T}$ 。计算 Δ 的测量误差。

[3.8] 考虑 n 个两能级系统, 它们每一个都由 *Hamiltonian* $H = -\frac{\Delta}{2}\sigma_z$

所描述并执行如下 *Ramsey* 类型的实验 N 次: 制备高纠缠态

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}\{|00L\ 00\rangle + |11L\ 11\rangle\},$$

让它演化 T 时间，接着执行态 $|\psi^\pm\rangle$ 的测量，

$$|\psi^\pm\rangle = \frac{1}{2}\{ |00L\ 00\rangle \pm |11L\ 11\rangle \}$$

如果执行 N 次这样的测量，计算 Δ 的测量误差。将这里的结果和上面 *Ramsey* 谱学的标准测量办法相比较。

[3.9] 将纠缠态 $|\psi\rangle_{AB} = (\sqrt{\beta_1}|1\rangle_A|1'\rangle_B + \sqrt{\beta_2}|2\rangle_A|2'\rangle_B)$ 与对应的混态可分离态 (3.3) 式，代入 $\text{tr}(\rho_{AB}\Omega_{AB})$ 计算，比较在不同项之间有无交叉项。

[3.10] 设 $|\Phi\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle_A \left(\frac{1}{2}|\uparrow\rangle_B + \frac{\sqrt{3}}{2}|\downarrow\rangle_B \right) + \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\rangle_A \left(\frac{\sqrt{3}}{2}|\uparrow\rangle_B + \frac{1}{2}|\downarrow\rangle_B \right)$ ，作此态的 *Schmidt* 分解。

[3.11] 试简明论证：任意三粒子纯态不一定能做 *Schmidt* 分解。

[3.12] 按上面定理的推论 (3.20) 式，具体算出下述两体量子态

$$\rho_{AB} = \frac{1}{3}\{ 2|01\rangle\langle 01| + |10\rangle\langle 10| + |01\rangle\langle 10| + |10\rangle\langle 01| \}$$

的相对熵纠缠度 $E_r(\rho_{AB})$ 。

参考文献

【1】E. Schrodinger, 《Die gegenwartige Situation in der Quanten- mechanik》, *Naturwissenschaften* 23, 807-812(1935)。

【2】张永德,《量子力学》，第二版，科学出版社，2003 年，

【3】S.Popescu and D.Rohrlich, *Phys. Rev. A* 56, R3319(1997)

【4】A.V.Thapliyal, *Phys. Rev. A* 59, 3336(1999)

【5】S.J.Wu, X.M.Chen, and Y.D.Zhang, *Phys.Lett. A* 275, 244(2000)

【6】J.Preskill, 《Lecture Notes for Physics 299: Quantum Information and Quantum Computation》, CIT, Sept. 1998

【7】张永德, 吴盛俊, 侯广, 黄民信,《量子信息，物理原理和某些进展》，华中师范大学出版社，2002 年 11 月。

【8】V.Vedral, M.A.Rippin and P.L.Knight, *PRL*, 78, 2275(1997)

【9】张永德,《高等量子力学》，北京：科学出版社，2010 年。

- 【10】 *M.Horodecki, et.al., PRL, 80, 5239(1998)。*
- 【11】 *V.Vedral and M.B.Plenio, Phys.Rev. A57, 1619(1998)。*
- 【12】 *S.J.Wu, Qian Wu, and Y.D. Zhang, Chin. Phys. Lett., Vol.18, 160(2001)。*
- 【13】 吴盛俊, 中国科学技术大学硕士学位论文《量子纠缠若干理论问题的研究》, 2000 年 6 月; 也见[12], 或[5]。
- 【14】 *L.P. Hughston, R.Jozsa and W.K.Wootters, Phys. Lett. A183, 14(1993)。*
- 【15】 张永德, 《量子信息物理原理》, 北京: 科学出版社, 2011 年。
- 【16】 *S.Parker, S.Bose and M.B.Plenio, Phys. Rev. A61, 032305(2000)*
- 【17】关于量子变换理论的文章主要有: 基本理论框架的 *Y.D.Zhang and Z.Tang, J.Math.Phys., 34, 5639(1993); Y.D. Zhang and Z.Tang, Nuovo Cimento, B109, 387(1994); Si-xia Yu, Yong-de Zhang, Commun. Theor. Phys., Vol.24, 185(1995); Lei Ma and Yong-de Zhang, Nuovo Cimento B, 110(1995)1103; Si-xia Yu, H. Rauch and Yong-de Zhang, Phys. Rev. A, Vol.52, No.4, 2585(1995); Yong-de Zhang, Lei Ma, Xian-bin Wang, Jian-wei Pan, Two Applications of Linear Quantum Transformation Theory in Multi-Mode Fock Space, Commun. Theor. Phys., Vol.26, No.2, 203(1996); Jian-wei Pan, Yong-de Zhang, Xian-bin Wang and Lei Ma, Some Addenda about the General Formula of Normal Product Calculation for Boson Exponential Quadratic Operators, Commun. Theor. Phys., Vol. 26, 479(1996); Xian-bin Wang, Yong-de Zhang and Jian-wei Pan, General Approach to Antinormally Ordering Boson Exponential Quadratic Operators and Its Applications, Chin. Phys. Lett., Vol.13, No.6(1996)401; Xu Xiu-wei and Yong-de Zhang, Two Theorems Re-ordering the Multimode-boson Exponential Quadratic Operators, Chin. Phys. Lett., Vol.14, No.11(1997)812; Jian-wei Pan, Si-xia Yu, Yong-de Zhang and Gueigu Siu, Quantum Statistics for General Quantum Quadratic System, Commun. Theor. Phys., Vol.31, No.1, 121(1999); Xiu-wei Xu and Yong-de Zhang, Various Re-ordering Expressions of General Exponential Quadratic Operators in Multimode boson Systems, Commun. Theor. Phys., Vol.31, No.2, 227(1999). Huaixin Lu, Yongde Zhang, Eigenvalue and eigenfunction of n -mode boson quadratic hamiltonian, International Journal of Theoretical Physics, Vol.39, 447(2000) ; Huaixin Lu, Yongde Zhang,*

Exact solution for super Jaynes-Cummings model, Chin. Phys.(oversea edition), Vol.9, 325(2000) ; Huaixin Lu, Yongde Zhang, Energy spectrum and wave function for multi-mode coupled non-identical harmonic oscillators, Chin. Phys., Vol.9, 5(2000) 。 X.B.Wang, S.X.Yu and Y.D.Zhang, J.Phys.A:Math.Gen., 27, 6563(1994); 马雷, 中国科学技术大学博士学位论文《多模 Fock 空间量子变换理论若干问题的研究》, 1995; 任意矩阵元计算方法的 J.W.Pan, Q.X.Dong, Y.D.Zhang, G.Hou and X.B.Wang, Phys. Rev. E56, 2553(1997); 量子场分立对称变换的 Y.D.Zhang and L.Ma, Commun.Theor. Phys., Vol.27, 87(1997); 配分函数计算的 J.W.Pan, Y.D.Zhang and G.G.Siu, , Chin. Phys. Lett. 14, 241(1997); H.X.Lu, Z.B.Chen, L.Ma and Y.D.Zhang, Mod. Phys. Lett. B16, 241(2002), 等等。

【18】 *A.M.Gleason, J.Math.Mech., 6, 885 (1957)*

【19】 *A.Peres, Quantum Theory: Conceptions and Methods, Kluwer Academic Publishers,1993*

【20】 逯怀新, 中国科学技术大学博士学位论文《连续变量量子信息论的若干问题》, 2003 年 1 月。