# 第五章　两体量子系统　I

两体量子系统是一个复合系统, 由子系统 A 和另一个子系统 B 构成. 可以把两个子系统形象地想象为两个微观粒子, 也可以把它们视作同一个粒子的两个不同性质的自由度 (freedom). 这里说的自由度并不是理论力学中说的广义坐标的个数, 而是不能在同一个 Hilbiert 空间中描述的状态. 例如, 在 SG 实验中, 需要考虑银原子的磁矩和空间位置, 前者和粒子的自旋角动量有关, 需要在有限维的 $\mathbb{C}^2$ 空间中描述, 后者需要在无穷维的 Hilbert 空间中描述. 于是在分析该实验的时候, 可以说我们面对的是一个两体量子系统.

## 1 直积空间中的向量

设 $\mathscr{H}^A$ 和 $\mathscr{H}^B$ 分别是描述子系统 A 和子系统 B 的 Hilbert 空间. 这里仍然考虑有限维的情形. 设其维数分别是 $\dim(\mathscr{H}^A) = d^A$ 和 $\dim(\mathscr{H}^B) = d^B$, 并且分别为它们赋予自然基向量组 $\{|i\rangle\}$ 和 $\{|\mu\rangle\}$, 其中 $i = 0, 1\cdots, d^A - 1$, $\mu = 0, 1\cdots, d^B - 1$, 这里我们分别用拉丁字母和希腊字母表示 $\mathscr{H}^A$ 和 $\mathscr{H}^B$ 的基向量. 所谓自然基向量 $|i\rangle$ 是这样的: 在它的列向量表示形式中, 第 $i+1$ 行的分量是 1, 其余各行均为 0, 即

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \cdots, \quad \left| d^A - 1 \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}.$$

$\mathscr{H}^B$ 的基向量组 $\{|\mu\rangle\}$ 与此类似.

描述两体量子系统 $AB$ 的量子态的 Hilbert 空间 $\mathscr{H}$ 是 $\mathscr{H}^A$ 和 $\mathscr{H}^B$ 的直积, 即 $\mathscr{H} = \mathscr{H}^A \otimes \mathscr{H}^B$, 它是一个 $d^A \times d^B$ 维的复空间, 自然基向量组记作 $\{|i\rangle \otimes |\mu\rangle\}$, 简写为 $\{|i\rangle\,|\mu\rangle\}$, 或者 $\{|i\mu\rangle\}$. 这里, 符号 $\otimes$ 表示直积 (direct product), 它的运算规则是这样的. 设 $X$ 是一个 $m \times n$ 的矩阵, $Y$ 是另一个矩阵. $X$ 的第 $i$ 行第 $j$ 列的矩阵元记作 $x_{ij}$. $X$ 和 $Y$ 的直积就是

$$X \otimes Y = \begin{pmatrix} x_{11}Y & x_{12}Y & \cdots & x_{1n}Y \\ x_{21}Y & x_{22}Y & \cdots & x_{2n}Y \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{m1}Y & x_{m2}Y & \cdots & x_{mn}Y \end{pmatrix}.$$

简单地说, 把 $X \otimes Y$ 看成是一个由 $mn$ 个小矩阵拼成的大矩阵, 每一个小矩阵是 $x_{ij}Y$. 于是, $\mathscr{H}$ 的某个基向量,

比如 $|0\rangle\,|1\rangle$, 它的列向量形式可以表示为

$$|0\rangle\,|1\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix}0\\1\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\1\\0\\\vdots\\\vdots\\0\end{pmatrix}.$$

Hilbert 空间 $\mathcal{H}$ 中任意一个态矢量 $|\Psi\rangle$ 可以在 $\{|i\mu\rangle\}$ 上展开,

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=0}^{d^A-1}\sum_{\mu=0}^{d^B-1} c_{i\mu}\,|i\rangle\,|\mu\rangle \tag{1}$$

其中系数 $c_{i\mu} = \langle i\mu|\Psi\rangle$, 并且满足 $\sum_{i,\mu}|c_{i\mu}|^2 = 1$. 以后, 在不会引起歧义的情况下, 我们将略去求和的上下限. 另外, 我们把这样的两体系统简称为 $d^A \otimes d^B$ 系统.

例如, $2\otimes 2$ 量子系统的纯态可以表示为 $\mathbb{C}^2\otimes\mathbb{C}^2$ 中的归一化的向量,

$$|\Psi\rangle = c_{00}\,|00\rangle + c_{01}\,|01\rangle + c_{10}\,|10\rangle + c_{11}\,|11\rangle$$

其中 $|c_{00}|^2 + |c_{01}|^2 + |c_{10}|^2 + |c_{11}|^2 = 1$.

虽然 Hilbert 空间 $\mathcal{H}$ 是 $\mathcal{H}^A$ 和 $\mathcal{H}^B$ 的直积, 但是 $\mathcal{H}$ 中的量子态却并不是总能表示为 $\mathcal{H}^A$ 中的量子态和 $\mathcal{H}^B$ 中的量子态的直积. 如果 $|\Psi\rangle\in\mathcal{H}$ 可以表示为 $|\psi^A\rangle\otimes|\psi^B\rangle$, 其中 $|\psi^A\rangle\in\mathcal{H}^A$, $|\psi^B\rangle\in\mathcal{H}^B$, 那么 $|\Psi\rangle$ 被称为直积态 (product state).

可以选择 $\mathcal{H}^A$ 或 $\mathcal{H}^B$ 的其它形式的基向量, 将 $|\Psi\rangle$ 表示成其它形式. 下面的定理给出了最简单的表示形式.

**定理 (Schmidt 分解 )** 对于给定的某个量子态 $|\Psi\rangle\in\mathcal{H}$, 总能找到 $\mathcal{H}^A$ 和 $\mathcal{H}^B$ 的特定的基向量, 记作 $\{|e_i\rangle\}$ 和 $\{|f_\mu\rangle\}$, 使得 $|\psi\rangle$ 在 $\{|e_i\rangle\,|f_\mu\rangle\}$ 上的展开形式为

$$|\Psi\rangle = \sum_{j=0}^{d} c_j\,|e_j\rangle\,|f_j\rangle\,, \tag{2}$$

其中 $d = \min\{d^A, d^B\} - 1$, 并且每一个 $c_j$ 都是正的. ∎

以后证明这个结论.

## 2

## 直积空间上的矩阵

考虑 $d^A d^B$ 维的空间 $\mathcal{H}$ 上的的算符 $X$, 它可以表示为矩阵形式 [1], 在自然基向量 $|i\rangle\,|\mu\rangle$ 上

$$X = \sum_{ij\mu\nu} x_{i\mu,j\nu}\,|i\mu\rangle\,\langle j\nu| \tag{3}$$

[1] 若非特别指明, 所说的矩阵是 $d^Ad^B\times d^Ad^B$ 的方阵.

其中矩阵元 $x_{i\mu,j\nu}$ 就是

$$x_{i\mu,j\nu} = \langle i\mu| X |j\nu\rangle = \mathrm{Tr}(X\ |j\nu\rangle\langle i\mu|).$$

这里, 用双指标标记矩阵的行和列, 对行的标记是 $i\mu$, 对列的标记是 $j\nu$. 还可以把矩阵 $X$ 表示为

$$X = \sum_{ij\mu\nu} x_{i\mu,j\nu} |i\rangle\langle j| \otimes |\mu\rangle\langle\nu| \tag{4}$$

一般地, Hilbert 空间 $\mathscr{H}$ 上任意一个矩阵不一定总能表示为 $\mathscr{H}^A$ 上的矩阵和 $\mathscr{H}^B$ 上的矩阵的直积, 但是总可以表示为如下分解形式

$$X = \sum_i M_i \otimes N_i \tag{5}$$

其中 $M_i$ 和 $N_i$ 分别是 $\mathscr{H}^A$ 和 $\mathscr{H}^B$ 上的矩阵. 表达式 (4) 体现了这一点.

如果 $X$ 是 $\mathscr{H}$ 上的厄密矩阵, 即 $X = X^\dagger$, 那么 (5) 式中的 $M_i$ 和 $N_i$ 可以是厄密的. 实际上, 可以在 $\mathscr{H}^A$ 和 $\mathscr{H}^B$ 上选择适当的基, 将厄密矩阵表示为实系数的展开形式.

直积空间 $\mathscr{H}$ 上的酉矩阵 $U$ 也不能总是表示为 $U^A \otimes U^B$ 的直积形式. 不具有直积形式的酉变换是整体酉变换, 而 $U^A \otimes U^B$ 描述的是局部酉变换.

在讨论两体问题的时候, 对于某个子空间上的矩阵, 比如说, $A$ 是 $\mathscr{H}^A$ 上的矩阵, 更严格的写法是 $A \otimes \mathbb{1}^B$. 类似地, $\mathscr{H}^B$ 上的矩阵 $B$ 应该理解为 $\mathbb{1}^A \otimes B$. 添加的单位算符意谓着对相应的子空间中的向量不作任何操作. 如果矩阵 $A$ 和 $B$ 分属不同的 Hilbert 空间, 它们一定是对易的, 即

$$[A, B] = [A \otimes \mathbb{1}, \mathbb{1} \otimes B] = 0$$

在讨论两体量子系统作为一个整体随时间演化的时候, 需要给出整个系统的哈密顿量, 例如

$$H = H^A + H^B + H^{\mathrm{int}},$$

其中 $H^A$ 和 $H^B$ 分别是是子系统 A 和 B 的局部的定域的哈密顿量, 它们分别是 $\mathscr{H}^A$ 和 $\mathscr{H}^B$ 上的厄密算符, $H^{\mathrm{int}}$ 则表示二者间的相互作用, 它是 $\mathscr{H}$ 上的厄密算符, 所以, 上式应该写为

$$H = H^A \otimes \mathbb{1}^B + \mathbb{1}^A \otimes H^B + H^{\mathrm{int}}. \tag{6}$$

以后, 在不致混淆的情况下, 我们有时会省略表明子系统的上标.

### 2.1 对矩阵的部分变换

常见的对 Hilbert 空间 $\mathscr{H}$ 上的矩阵的操作有转置、厄密共轭和求迹. 矩阵 $X$ 的转置记作 $X^T$,

$$X^T = \sum_{ij\mu\nu} x_{i\mu,j\nu} |j\nu\rangle\langle i\mu|$$

也可以等价地写为 $X^T = \sum_{ij\mu\nu} x_{j\nu,i\mu} |i\mu\rangle\langle j\nu|$. 厄密共轭是

$$X^\dagger = \sum_{ij\mu\nu} x^*_{i\mu,j\nu} |j\nu\rangle\langle i\mu|$$

可以等价地写为 $X^\dagger = \sum_{ij\mu\nu} x^*_{j\nu,i\mu} |i\mu\rangle\langle j\nu|$. 对矩阵 $X$ 在整个空间上求迹, 结果是

$$\mathrm{Tr}(X) = \sum_{i'\mu'} \langle i'\mu'|X|i'\mu'\rangle$$

$$= \sum_{i'\mu'} \sum_{ij\mu\nu} x_{i\mu,j\nu} \langle i'\mu' | i\mu \rangle \langle j\nu | i'\mu' \rangle$$

$$= \sum_{i\mu} x_{i\mu,i\mu}$$

除了上述常见的操作以外, 还有一些仅仅涉及子空间 $\mathcal{H}^A$ 或 $\mathcal{H}^B$ 的操作, 即部分转置 (partial transpose) 和部分迹 (partial trace).

**定义 (部分转置)** Hilbert 空间 $\mathcal{H} = \mathcal{H}^A \otimes \mathcal{H}^B$ 上的矩阵 $X$ 表示为 (3) 式, 在 $\mathcal{H}^A$ 空间中的转置记作 $X^{T_A}$, 其形式是

$$X^{T_A} = \sum_{ij\mu\nu} x_{i\mu,j\nu} |j\mu\rangle\langle i\nu| = \sum_{ij\mu\nu} x_{i\mu,j\nu} |j\rangle\langle i| \otimes |\mu\rangle\langle\nu| . \tag{7}$$

在 $\mathcal{H}^B$ 空间中的转置记作 $X^{T_B}$, 其形式是

$$X^{T_B} = \sum_{ij\mu\nu} x_{i\mu,j\nu} |i\nu\rangle\langle j\mu| = \sum_{ij\mu\nu} x_{i\mu,j\nu} |i\rangle\langle j| \otimes |\nu\rangle\langle\mu| . \tag{8}$$

■

**定义 (部分迹)** 对形如 (3) 式的矩阵 $X$ 在空间 $\mathcal{H}^B$ 中求迹, 得到一个 $\mathcal{H}^A$ 上的矩阵, 记作 $X^A$,

$$X^A = \mathrm{Tr}_B(X) = \sum_{ij\mu} x_{i\mu,j\mu} |i\rangle\langle j| . \tag{9}$$

类似地, 对 $X$ 在空间 $\mathcal{H}^A$ 中求迹, 得到一个 $\mathcal{H}^B$ 上的矩阵, 记作 $X^B$,

$$X^B = \mathrm{Tr}_A(X) = \sum_{i\mu\nu} x_{i\mu,i\nu} |\mu\rangle\langle\nu| . \tag{10}$$

$X^A$ 和 $X^B$ 分别称为 $X$ 在 $\mathcal{H}^A$ 和 $\mathcal{H}^B$ 上的约化矩阵. ■

例如, 对于 $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ 上的矩阵 $X$, 下面两个图描述了部分转置和部分迹.

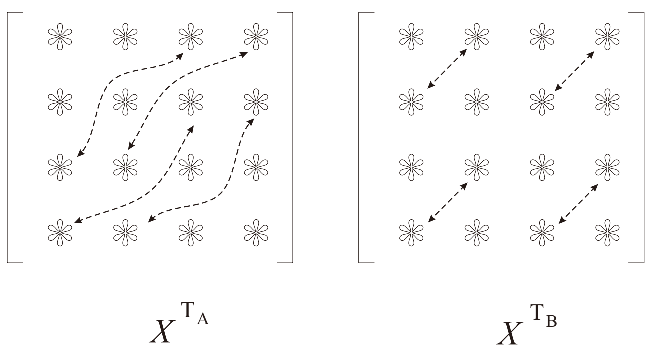


图 1: 将图中用虚线连接的矩阵元对调, 得到关于矩阵 $X$ 的部分转置.

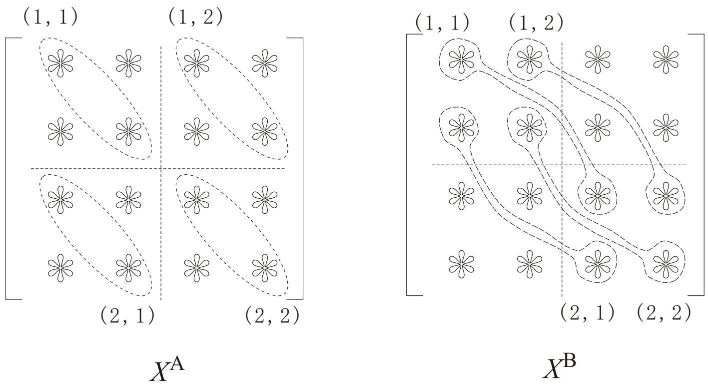


图 2: 将图中用虚线圈起来的矩阵元相加, 再将相加的结果放在 $2 \times 2$ 矩阵的相应的位置, 得到关于矩阵 $X$ 的部分迹.

一般地, $X \neq X^A \otimes X^B$. 还可以看到, 在整个空间 $\mathscr{H}$ 上求迹等于先在 $\mathscr{H}^{A(B)}$ 上求迹, 然后继续在 $\mathscr{H}^{B(A)}$ 上求迹,

$$\mathrm{Tr}(X) = \mathrm{Tr}_A\big[\,\mathrm{Tr}_B(X)\big] = \mathrm{Tr}_B\big[\,\mathrm{Tr}_A(X)\big]$$

其它一些性质:

- 设 $A \in \mathcal{L}(\mathscr{H}^A)$, $C \in \mathcal{L}(\mathscr{H}^A \otimes \mathscr{H}^B)$, 那么有

  $$\mathrm{Tr}(A\,\mathrm{Tr}_B\, C) = \mathrm{Tr}\big[(A \otimes \mathbb{1})C\big] \tag{11}$$

  证明上式. 将 $C$ 表示为

  $$C = \sum_{\mu,\nu} \mathscr{C}_{\mu\nu} \otimes |\mu\rangle\langle\nu|$$

  其中 $\mathscr{C}_{\mu\nu}$ 是 $\mathscr{H}^A$ 上的矩阵 (不是 $C$ 的矩阵元). 容易看出

  $$\mathrm{Tr}_B\, C = \sum_{\mu} \mathscr{C}_{\mu\mu}$$

  计算 (11) 式的左端, 这是在 $\mathscr{H}^A$ 中的求迹,

  $$(11)\ \text{式左端} = \mathrm{Tr}\left(A \sum_{\mu} \mathscr{C}_{\mu\mu}\right)$$

  再看 (11) 式的右端, 先求 $\mathrm{Tr}_B$, 有

  $$\begin{aligned}
  &\mathrm{Tr}_B\big[(A \otimes \mathbb{1})C\big] \\
  =& \sum_{\mu,\nu} \mathrm{Tr}_B\big[\big(A \otimes \mathbb{1}\big)\big(\mathscr{C}_{\mu\nu} \otimes |\mu\rangle\langle\nu|\big)\big] \\
  =& \sum_{\mu,\nu} \mathrm{Tr}_B\big[A\mathscr{C}_{\mu\nu} \otimes |\mu\rangle\langle\nu|\,\big] \\
  =& \sum_{\mu} A\mathscr{C}_{\mu\mu}
  \end{aligned}$$

  再计算 $\mathrm{Tr}_A$, 得到 (11) 式的左端.

- 设 $|\psi\rangle, |\varphi\rangle \in \mathcal{H}^A$, 以及 $C \in \mathcal{L}(\mathcal{H}^A \otimes \mathcal{H}^B)$, 那么有 $\langle\psi|C|\varphi\rangle \in \mathcal{L}(\mathcal{H}^B)$, 并且

$$\langle\psi|C|\varphi\rangle = \mathrm{Tr}_A\big[(|\varphi\rangle\langle\psi| \otimes \mathbb{1})C\big]$$

证明过程如下.

$$\text{左端} = \langle\psi|C|\varphi\rangle = \sum_{\mu,\nu} \langle\psi|\mathcal{C}_{\mu\nu}|\varphi\rangle\ |\mu\rangle\langle\nu|$$

$$\text{右端方括号中的项} = \sum_{\mu,\nu} \big(|\mu\rangle\langle\nu|\,\mathcal{C}_{\mu\nu}\big) \otimes |\mu\rangle\langle\nu|$$

$$\text{右端} = \sum_{\mu,\nu} \mathrm{Tr}_A\big(|\mu\rangle\langle\nu|\,\mathcal{C}_{\mu\nu}\big)\,|\mu\rangle\langle\nu| = \sum_{\mu,\nu} \langle\psi|\mathcal{C}_{\mu\nu}|\varphi\rangle\ |\mu\rangle\langle\nu| = \text{左端}$$

## 2.2 约化密度矩阵

空间 $\mathcal{H} = \mathcal{H}^A \otimes \mathcal{H}^B$ 中的任意一个混合态的密度矩阵 $\rho$ 可以在自然基上表示为

$$\rho = \sum_{ij\mu\nu} \rho_{i\mu,j\nu}\, |i\mu\rangle\, \langle j\nu| = \sum_{ij\mu\nu} \rho_{i\mu,j\nu}\, |i\rangle\langle j| \otimes |\mu\rangle\langle\nu| \tag{12}$$

当然, 矩阵元 $\rho_{i\mu,j\nu}$ 须满足密度矩阵的要求.

我们先来考虑力学量在混合态 $\rho$ 中的期望值. 设 $X$ 是两体系统整体的力学量, 那么它的期望值是

$$\langle X\rangle_\rho = \mathrm{Tr}(X\rho) = \sum_{ij\mu\nu} \langle i\mu|\,\rho\,|j\nu\rangle\, \langle j\nu|\,X\,|i\mu\rangle \tag{13}$$

如果我们仅仅考虑属于子系统 A 的某个力学量 $A$, 那么应该如何求得它在 $\rho$ 上的期望值呢?

考虑两体系统的时候, 子系统的力学量 $A$ 应该写为 $A \otimes \mathbb{1}$. 因此 $A$ 的期望值就是

$$\begin{aligned}\langle A\rangle_\rho &= \mathrm{Tr}\Big[(A \otimes \mathbb{1}^B)\rho\Big]\\ &= \mathrm{Tr}\Bigg[(A \otimes \mathbb{1}^B) \sum_{ij\mu\nu} \rho_{i\mu,j\nu}\, |i\rangle\langle j| \otimes |\mu\rangle\langle\nu|\Bigg]\\ &= \sum_{ij\mu\nu} \rho_{i\mu,j\nu}\, \mathrm{Tr}\big[A\,|i\rangle\langle j| \otimes |\mu\rangle\langle\nu|\big] \end{aligned}\tag{14}$$

上述求迹是对整个空间 $\mathcal{H}$ 而言的, 等价于先后在两个子空间上求迹, 即 $\mathrm{Tr} = \mathrm{Tr}_A\,\mathrm{Tr}_B = \mathrm{Tr}_B\,\mathrm{Tr}_A$. 对 (14) 式求 $\mathrm{Tr}_B$, 导致 $\mu = \nu$, 求和指标中不再出现 $\nu$, 接着还要计算 $\mathrm{Tr}_A$, 即

$$\langle A\rangle_\rho = \mathrm{Tr}_A\Bigg[A \sum_{ij\mu} \rho_{i\mu,j\mu}\, |i\rangle\langle j|\Bigg] = \mathrm{Tr}_A\big[A\rho^A\big] \tag{15}$$

这里, $\rho^A$ 是 $\rho$ 在 $\mathcal{H}^A$ 上的约化密度矩阵, 即

$$\rho^A = \mathrm{Tr}_B(\rho) = \sum_{ij\mu} \rho_{i\mu,j\mu}\, |i\rangle\langle j| \tag{16}$$

需要检验 $\rho^A$ 是否满足密度矩阵的三个性质. 容易看出 $\mathrm{Tr}\big(\rho^A\big) = 1$ 以及 $\rho^A = (\rho^A)^\dagger$. 以下过程可以说明它的正定性. 对于任意的 $|\chi\rangle \in \mathcal{H}^A$, 有

$$\langle\chi|\,\rho^A\,|\chi\rangle = \mathrm{Tr}_A(\rho^A\,|\chi\rangle\langle\chi|) = \mathrm{Tr}\big[\rho\,(|\chi\rangle\langle\chi| \otimes \mathbb{1}^B)\big] \tag{17}$$

$$
\begin{aligned}
&= \mathrm{Tr}\left[\rho\left(|\chi\rangle\langle\chi| \otimes \sum_{\mu} |\mu\rangle\langle\mu|\right)\right] \\
&= \sum_{\mu} \mathrm{Tr}\left[\rho\left(|\chi\rangle \otimes |\mu\rangle\right)\left(\langle\chi| \otimes \langle\mu|\right)\right] \\
&= \sum_{\mu} \big(\langle\chi| \otimes \langle\mu|\big)\rho\big(|\chi\rangle \otimes |\mu\rangle\big) \geqslant 0
\end{aligned}
$$

其中 (17) 式的第二个等式可以通过 (12) 得到, 也是以前提到过的关于部分迹的一个性质.

这里不带下标的求迹运算 Tr 是在整个空间 $\mathscr{H}$ 上进行的. 上式的结果表明, 对于任意的 $|\chi\rangle$, $\langle\chi|\rho^A|\chi\rangle \geqslant 0$, 即 $\rho^A$ 是正定的. 于是 $\rho^A$ 满足密度矩阵的要求, 描述了子系统 $A$ 的局部的定域的量子态. 同理, 约化密度矩阵 $\rho^B = \mathrm{Tr}_A(\rho)$ 描述了子系统 $B$ 的局部的量子态. 一般情况下, $\rho \neq \rho^A \otimes \rho^B$, 即整体的量子态不一定具有局部量子态的直积形式.

如果整体量子态是直积形式, 即 $|\Psi\rangle = |\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle$, 那么局部量子态分别是是 $|\psi\rangle$ 和 $|\varphi\rangle$.

如果整体量子态不是直积形式, 即处于纠缠态, 那么局部量子态是混合态. 从整体上的纯态到局部上的混合态, 反映了这样的事实: 当子系统之间存在关联的时候, 如果孤立地看到某个子系统, 那么不能明确地描述这个子系统的状态.

约化密度矩阵来自整体密度矩阵的部分迹, 在某种程度上, 数学上的求迹运算意味着物理上的测量过程, 或者退相干过程, 所以, 简单而直接地谈论约化密度矩阵或局部量子态缺乏物理上的支持. 尽管如此, 约化密度矩阵的数学形式可以很好地描述局部测量的结果的几率分布. 考虑 $\mathscr{H}^A$ 和 $\mathscr{H}^B$ 上的投影算符 (不一定是一维的) $\Pi_a^A$ 和 $\Pi_b^B$, 把它们视作测量算符, 对应的观测结果记作 $a$ 和 $b$, 那么得到结果 $a$ 和 $b$ 的几率分别是 $\Pi^A$ 和 $\Pi^B$ 的期望值,

$$
\begin{aligned}
p(a) &= \mathrm{Tr}\left[\rho(\Pi_a^A \otimes \mathbb{1}^B)\right] = \mathrm{Tr}_A[\rho^A \Pi_a^A] \\
p(b) &= \mathrm{Tr}\left[\rho(\mathbb{1}^A \otimes \Pi_b^B)\right] = \mathrm{Tr}_B[\rho^B \Pi_b^B]
\end{aligned}
$$

这意味着局部测量结果的几率分布取决于相应的约化密度算符. 另一方面, 联合测量结果 $(a, b)$ 的几率等于 $p(a, b) = \mathrm{Tr}\big[\rho(\Pi^A \otimes \Pi^B)\big]$, 我们可以从联合测量结果的几率分布得到边缘几率分布,

$$
p(a) = \sum_b p(a, b), \quad p(b) = \sum_a p(a, b)
$$

而且, 几率 $p(a)$ 并不依赖于子系统 B 的观测对象的选择, 就是说, 如果对子系统 B 测量另一个力学量 $B'$, 测量结果结果记作 $b'$, 那么同样有

$$
p(a) = \sum_{b'} p(a, b')
$$

只要对 B 的测量是完全的 (complete) 而不是选择的 (selective), 就总有上述关系. 一般地, 对子系统 B 进行保迹的物理操作不会对子系统 A 产生任何影响, 当然也不会影响关于 A 的测量结果的几率分布, 这是定域性的体现.

虽然我们可以从联合分布得到边缘分布, 但是, 在一般情形下, $p(a, b) \neq p(a)p(b)$. 即便在经典几率中, 这也是很自然的事情, 表明二者之间有关联.

3

# 联合测量

## 3.1 联合测量

设两体系统 AB 的整体的量子态是 $|\Psi\rangle$. 再设想 $X$ 是 AB 的整体力学量, 即 $X$ 是 $\mathscr{H}$ 上的厄密算符, 本征值和相应的本征向量分别用 $x_i$ 和 $|\xi_i\rangle$ 表示, $i=0,1,\cdots,\dim\mathscr{H}-1$, 即 $X|\xi_i\rangle = x_i|\xi_i\rangle$. 在 $|\Psi\rangle$ 中测量 $X$ 得到结果 $x_i$ 的几率是 $p(x_i)=|\langle\xi_i|\Psi\rangle|^2$. 这种对于两体系统整体的测量被称为**联合测量**.

**两个自旋 1/2 粒子的自旋角动量**

两个自旋 1/2 粒子的自旋角动量分别记作 $\mathbf{S}^A$ 和 $\mathbf{S}^B$, 总的自旋角动量是 $\mathbf{S}=\mathbf{S}^A+\mathbf{S}^B$. 现在选择 $\mathbf{S}$ 在 $z$ 方向上的分量 $S_z$ 作为观测量,

$$S_z = S_z^A + S_z^B = S_z^A\otimes\mathbb{1}^B + \mathbb{1}^A\otimes S_z^B$$

$S_z$ 的形式是一个对角矩阵 (这里令 $\hbar=1$),

$$S_z = \mathrm{diag}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & -1\end{pmatrix}$$

$S_z$ 的本征值和本征向量是

| 本征值 | 本征向量 |
|---|---|
| 1 | $|0\rangle\otimes|0\rangle$ |
| $-1$ | $|1\rangle\otimes|1\rangle$ |
| 0 | $\mathrm{Span}\{\,|0\rangle\otimes|1\rangle\,,|1\rangle\otimes|0\rangle\,\}$ |

其中本征值 0 是两重简并的, 由 $|01\rangle$ 和 $|10\rangle$ 张开的两维子空间中的任意向量都是 $S_z$ 的本征值为零的本征向量.

测量结果 $+1$, $-1$ 和 0 对应的投影算子分别是

$$\Pi_+ = |00\rangle\langle 00|\,,\quad \Pi_- = |11\rangle\langle 11|\,,\quad \Pi_0 = |01\rangle\langle 01| + |10\rangle\langle 10|$$

它们又可以表示为

$$\Pi_+ = \Pi_0^A\otimes\Pi_0^B,\quad \Pi_- = \Pi_1^A\otimes\Pi_1^B$$

$$\Pi_0 = \Pi_0^A\otimes\Pi_1^B + \Pi_1^A\otimes\Pi_0^B$$

其中 $\Pi_0^{A(B)}=\frac{1}{2}\big(\mathbb{1}+\sigma_z^{A(B)}\big)$, $\Pi_1^{A(B)}=\frac{1}{2}\big(\mathbb{1}-\sigma_z^{A(B)}\big)$, 它们是局部测量 $\sigma_z^A$ 或 $\sigma_z^B$ 得到结果 $\pm1$ 的投影算子. 在空间 $\mathbb{C}^2\otimes\mathbb{C}^2$ 上的投影算子 $\Pi_+$ 描述的是一个联合事件 —— $(\sigma_z^A=+1)\wedge(\sigma_z^B=+1)$, 将给出一个联合几率, $\Pi_-$ 也是如此. $\Pi_0$ 是两维子空间上的投影算子, 描述了两个联合事件的 “和”, 即

$$\big\{(\sigma_z^A=+1)\wedge(\sigma_z^B=-1)\big\}\vee\big\{(\sigma_z^A=-1)\wedge(\sigma_z^B=+1)\big\}$$

$\Pi_0$ 不能简单地表示为 $\mathscr{H}^A$ 上的投影算子 $\otimes$ $\mathscr{H}^B$ 上的投影算子.

在上面的例子中, 形如 $\Pi_\pm$ 形式的测量给出的是联合事件的几率. 一般地, 设 $A$ 和 $B$ 分别是子系统 A 和子系统 B 的力学量, 它们的本征方程分别是 $A=\sum_i a_i|\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$ 和 $B=\sum_j b_i|\beta_j\rangle\langle\beta_j|$, $i=0,1,\cdots,\dim\mathscr{H}^A-1$,

$j=0,1,\cdots,\dim\mathscr{H}^B-1$. 测量 $A$ 得到结果 $a_i$, 同时测量 $B$ 得到结果 $b_j$ 的几率是

$$p(a_i,b_j)=\left|\left(\langle\alpha_i|\otimes\langle\beta_j|\right)|\Psi\rangle\right|^2$$

有时候, 我们也把上述几率写为 $p(a_i,b_j|A,B)$, 在竖线右边标明了每个子系统的被测力学量, 它们的观测结果写在竖线的左边. 定义投影算符 $\Pi_i^A=|\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$ 和 $\Pi_j^B=|\beta_j\rangle\langle\beta_j|$, 几率 $p(a_i,b_j)$ 又可以写为

$$p(a_i,b_j)=\langle\Psi|\left(\Pi_i^A\otimes\Pi_j^B\right)|\Psi\rangle=\mathrm{Tr}\Big[\left(\Pi_i^A\otimes\Pi_j^B\right)\left(|\Psi\rangle\langle\Psi|\right)\Big]\tag{18}$$

这是观测到结果 $a_i$ 和 $b_j$ 这两个事件同时出现的几率, 是联合几率. 对此有以下两点需要说明.

1. **可以从联合几率得到边缘 (marginal) 几率**

若联合几率 $p(a_i,b_j)$ 是已知的, 那么可以有

$$p(a_i)=\sum_j p(a_i,b_j),\quad p(b_j)=\sum_i p(a_i,b_j)$$

$p(a_i)$ 和 $p(b_j)$ 就是边缘几率, 它们分别是在 $|\Psi\rangle$ 中仅仅测量 $A$ 并得到结果 $a_i$ 和仅仅测量 $B$ 并得到结果 $b_j$ 的几率. 这种从整体到部分, 从联合到边缘的过渡是经典概率论的内容, 但也符合 Born 规则给出的结论. 需要注意的是, 量子几率在本质上不能用经典概率论解释.

注意到与结果 $a_i$ 对应的投影算符是 $\Pi_i^A$, 根据 Born 规则, 有

$$p(a_i)=\langle\Psi|\left(\Pi_i^A\otimes\mathbb{1}^B\right)|\Psi\rangle$$

上式的意思是, 对 B 系统不作任何操作, 所以有 $\mathbb{1}^B$. 而且, 利用性质 (11), 可以将上式表示为

$$p(a_i)=\mathrm{Tr}\left[\Pi_i^A\,\mathrm{Tr}_B(\Psi)\right],\quad \Psi=|\Psi\rangle\langle\Psi|$$

这里的 $\mathrm{Tr}_B(\Psi)$ 就是稍后要讨论的约化密度算子.

将 $\mathbb{1}^B$ 表示为 $\sum_j\Pi_j^B$, 几率 $p(a_i)$ 可以继续写为

$$p(a_i)=\sum_j\langle\Psi|\left(\Pi_i^A\otimes\Pi_j^B\right)|\Psi\rangle=\sum_j p(a_i,b_j)$$

类似地可以得到 $p(b_j)=\sum_i p(a_i,b_j)$.

2. **这里说的同时并不一定必须是时间上的同步**

实际上可以分两步进行. 例如, 我们可以先测量 $B$, 以一定的几率 $p(b_j)$ 得到结果 $b_j$, 在此基础上再测量 $A$, 以条件几率 $p(a_i|b_j)$ 得到结果 $a_i$, 于是联合几率 $p(a_i,b_j)=p(a_i|b_j)p(b_j)$. 这种叙述同样也是经典概率论的内容, 而在量子力学中也有同样的结论. 选择 $\mathscr{H}^B$ 的基向量为 $\{|\beta_j\rangle\}$, 总可以将 $|\Psi\rangle$ 表示为

$$|\Psi\rangle=\sum_j|\tilde{\psi}_j\rangle\otimes|\beta_j\rangle$$

这里 $|\tilde{\psi}_j\rangle$ 未归一, 彼此也不一定正交. 从这个表达式可以看出, 测量 $B$ 得到结果 $b_j$ 的几率就是 $\langle\tilde{\psi}_j|\tilde{\psi}_j\rangle$. 计算过程是

$$\begin{aligned}p(b_j)&=\langle\Psi|\mathbb{1}^A\otimes\Pi_j^B|\Psi\rangle\\&=\Big(\sum_m\langle\tilde{\psi}_m|\otimes\langle\beta_m|\Big)\left(\mathbb{1}^A\otimes\Pi_j^B\right)\Big(\sum_{m'}|\tilde{\psi}_{m'}\rangle\otimes|\beta_{m'}\rangle\Big)\end{aligned}$$

$$= \sum_{m,m'} \langle \tilde{\psi}_m | \tilde{\psi}_{m'} \rangle \ \langle \beta_m | \Pi_j^B | \beta_{m'} \rangle = \langle \tilde{\psi}_j | \tilde{\psi}_j \rangle$$

将 $|\tilde{\psi}_j\rangle$ 归一化, 令

$$|\psi_j\rangle = \frac{1}{\sqrt{p(b_j)}} |\tilde{\psi}_j\rangle$$

结果 $b_j$ 出现之后, 两体系统的状态是 $|\psi_j\rangle \otimes |\beta_j\rangle$. 继续测量 $A$, 得到结果 $a_i$ 的几率就是条件几率 $p(a_i|b_j)$,

$$p(a_i|b_j) = \big( \langle \psi_j | \otimes \langle \beta_j | \big) \big( \Pi_i^A \otimes \mathbb{1}^B \big) \big( |\psi_j\rangle \otimes |\beta_j\rangle \big) = \langle \psi_j | \, \Pi_i^A \, | \psi_j \rangle$$

如果根据 $p(a_i, b_j) = p(a_i|b_j)p(b_j)$ 计算联合几率, 那么结果是

$$p(a_i, b_j) = p(a_i|b_j)p(b_j) = \langle \psi_j | \, \Pi_i^A \, | \psi_j \rangle \, p(b_j) = \langle \tilde{\psi}_j | \, \Pi_i^A \, | \tilde{\psi}_j \rangle$$

如果直接计算投影算符 $\Pi_i^A \otimes \Pi_j^B$ 在 $|\Psi\rangle$ 的期望值, 那么有

$$\begin{aligned} p(a_i, b_j) &= \langle \Psi | \, (\Pi_i^A \otimes \Pi_j^B) \, | \Psi \rangle \\ &= \sum_{m,m'} \big( \langle \tilde{\psi}_m | \otimes \langle \beta_m | \big) \big( \Pi_i^A \otimes \Pi_j^B \big) \big( |\tilde{\psi}_{m'}\rangle \otimes |\beta_{m'}\rangle \big) \\ &= \langle \tilde{\psi}_j | \, \Pi_i^A \, | \tilde{\psi}_j \rangle \end{aligned}$$

所以, 两种看法给出了相同的结果.

**Bell 测量**

在 $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ 空间中, 定义如下四个彼此正交的量子态,

$$|\Psi_\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle \pm |10\rangle), \quad |\Phi_\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle \pm |11\rangle)$$

这四个量子态都是最大纠缠态, 被称为 Bell 态, 相应的投影算子记作 $\Psi_\pm$, $\Phi_\pm$. 显然

$$\Psi_+ + \Psi_- + \Phi_+ + \Phi_- = \mathbb{1}$$

如果把这四个投影算子当作测量算子, 那么这样的测量就是 Bell 测量.

4

## 系统 Q 和仪器 M

物理理论包含测量理论, 测量理论建立了物理概念与客观事实之间的联系. 可以从两个方面分析测量过程:

$$\text{① 作为一个操作过程, 测量过程定义了物理理论中的观测量.} \tag{19}$$

$$\text{② 测量作为一个物理过程, 服从物理理论.} \tag{20}$$

这第 ① 方面涉及了实验现象的整理和积累, 在这个意义上, 测量过程应该不依赖于物理理论. 第 ② 方面是对物理理论的自洽性和完备性的要求.

在经典物理学中, 测量过程满足两个条件: 一个是, 测量不会改变或破坏被测系统; 另一个是, 测量揭示了观测量的值, 不同的观测量可以同时具有确定的值. 因此, 根据测量过程和测量结果可以给出定义明确的的 (well-defined) 观测量, 因而满足 (19). 经典测量用到的仪器不但是实际存在的, 而且服从经典力学, 测量过程自然满足 (20).

相比而言, 在量子力学中, 如果没有很强的限制条件, 那么上述两个条件都不能成立. 在量子力学中, 观测量没有确定的值. 只有在一种情况下才能说观测量具有确定的值, 那就是, 系统的量子态正好是观测量的本征态. 因此, 量子力学中的观测量不能像经典力学中的力学量那样具有定义明确的实在性, 也不具有一种先验的 (a priori) 固有的 (ontological) 性质.

**什么叫 "没有确定的值"?**

"没有确定的值" 的意思不是 "值是不确定的".

"值是不确定的" 指的是, 系统的力学量是有 "值" 的, 它的可能的取值属于某个固定的集合. 观测到的值表现出不确定性, 这相当于经典的随机变量.

在量子力学中, 有一个看似相同的说法: "对系统的观测量 $A$ 进行测量, 得到的结果属于 $A$ 的本征值的集合." 但是要认识到, 这只是对现象的描述, 不能据此认为观测量具有先验的 (a priori) 值. 在以后讨论 EPR 问题和互文性问题的时候将看到, 如果我们用观测量的本征值为其赋值, 那么将导致矛盾的结果.

而且, 在量子测量过程中, 仪器和被测系统之间的相互作用不可忽略, 测量过程不可避免地对系统带来影响. 因此, 量子测量不能满足 (19). 在下面的讨论中还将看到, 量子理论不能为测量过程提供完整的描述. 系统和仪器发生相互作用并一起随时间演化, 达到前测量 (pre-measurement) 状态 (下文中的 (23) 式), 这个过程可以由量子力学描述. 前测量状态是一个具有叠加形式的纠缠态, 它既不是系统的观测量的本征态, 也不是仪器的指针观测量的本征态. 因此, 仪器的指针观测量不会具有确定的值. 可是, 为什么我们能观测到明确的实验结果呢? 量子力学不能回答这个问题, 或者说, 只能以假设的方式回答这个问题, 比如引入量子态的塌缩假设. 因此可以说, 量子力学不能满足 (20).

量子测量关乎对量子力学的理解. 尽管量子测量有着这样或那样的问题, 量子力学对微观世界的描述和预言迄今为止是正确的. 从实用的角度来说, 我们可以不关心对量子力学的认识论上的理解, 也可以不去理会量子测量带来的问题. 但是也应该注意到, 任何一个物理理论都不是完全服务于实际应用的, 因此有必要尽可能地了解理论中存在的一些问题.

### 4.1 Copenhagen 诠释

在量子力学的 Copenhagen 诠释中, 测量仪器当做经典仪器看待. 所谓 Copenhagen 诠释, 指的是以 Bohr, Heisenberg, Born 为代表的一批物理学家给出的关于量子力学解释. 不过, 他们并没有形成统一意见, Bohr 曾一度将自己与他认为的 Heisenberg 提出的更主观的解释划清界限. Bohr 等人也没有把他们的思想统称为 "Copenhagen 诠释", 这个说法其实是那些反对 Bohr 互补性原理的人们对 Bohr 等人观点的统称.

大体说来, Copenhagen 诠释的核心内容包含三个部分: Bohr 的互补性原理, Heisenberg 的不确定关系以及 Born 规则. Copenhagen 诠释的最简单的说法是, 透过经典 "眼镜" 看量子世界. 所谓经典 "眼镜", 指的是被当做经典装置对待的观测仪器.

**互补性原理**

我们知道, 在量子力学中, 如果两个观测量 $A$ 和 $B$ 在经典力学意义上是正则共轭的, 那么不能对它们进行同

时的精确测量, 或者说, 没有一种互不干扰的测量方式, 使得对 $A(B)$ 的测量不会影响 $B(A)$. 对于量子力学的这个特征, Bohr 给出的解释是, 这是 "互补性原理" 在起作用. Bohr 认为, 可以有测量仪器 M(A) 和 M(B) 分别测量观测量 $A$ 和 $B$, 而且是精确测量. 但是, 面向微观世界的测量受到互补性原理的制约, 这表现在测量仪器 M(A) 和 M(B) 是不相容的, 它们不能共存, 从而不能构造这样一个仪器 M(A, B), 可以对 $A$ 和 $B$ 进行联合精确测量 (或者说, 在测量 $A$ 的时候不会影响到 $B$, 反之亦然).

**不相容 $\neq$ 相互排斥**

相互排斥 (mutually exclusive) 的两个事件指的是, 如果其中一个出现了, 那么另一个一定不会出现. 用量子态的语言来说, 如果两个量子态彼此正交, 那么它们可能对应的事件是彼此互斥的. 理想测量情况下, 不同观测结果就是相互排斥的.

不相容 (incompatible) 的意思是我们曾经说过的不同的表象不相容, 不能共存. "不相容" 或者 "不共存" 缺乏经典物理学中的对应. 从量子态的角度来说, 如果 $|\langle\psi|\varphi\rangle| \in (0,1)$, 那么与 $|\psi\rangle$ 和 $|\varphi\rangle$ 对应的事件是不相容的. 如果 $|\psi\rangle, |\varphi\rangle \in \mathbb{C}^N$, 并且 $|\langle\psi|\varphi\rangle| = \frac{1}{\sqrt{N}}$, 那么与 $|\psi\rangle$ 和 $|\varphi\rangle$ 对应的事件是互补的.

### Heisenberg 不确定关系

再来谈谈 Heisenberg 的不确定关系. Heisenberg 思考了这样一个问题, 如果试图非常精确地测量单个粒子 (比如电子) 的位置, 会发生什么. Heisenberg 意识到, 这就像在黑暗的田野里寻找丢失的钱包一样, 用手电筒四处照, 直到找到你要找的东西. 但是普通的手电筒对电子不起作用, 因为可见光的波长太大了. 为了测量电子的位置, 应该利用波长较短的光 —— $\gamma$ 射线 —— 来发现电子. 在房间里放一个 $\gamma$ 射线手电筒, 就可能找到电子. 但是 $\gamma$ 射线会把一个 $\gamma$ 光子从电子上反弹回来, 电子因此会向某个方向偏转. 因此你知道电子在哪里, 但是不知道它的速度有多快, 也不知道它现在的方向. 为了避免影响到电子的速度或动量, 也许应该采用波长较长能量较低的光, 但是这样一来就增大了位置测量的误差.

Heisenberg 想知道的是, 在微观世界中, 位置测量的精度和动量改变之间的这种此消彼长的平衡是不可避免的, 还是仅仅是他思想实验的产物. 令他高兴的是, 他发现这些测量上的限制是基本的. 在 Schrödinger 的波动力学的数学形式中, Heisenberg 发现了一个精确的公式: 为了更多地了解一个物体的位置, 你需要放弃多少关于它的动量的信息, 反之亦然. 你可以知道一个物体在哪里或者它是如何运动的, 但是你不可能同时知道这两件事. 在 Bohr 的敦促下, Heisenberg 用 "不确定原理" 来描述这一观点.

与此同时, Bohr 发现 Heisenberg 的不确定原理与他提出的互补性原理非常吻合. 于是在 1927 年的 Como 会议上, Bohr 表达了这样的观点:

> 我们通常对物理现象的描述完全是基于这样一种观点: 现象可以被观察到, 但不会对它们造成明显的干扰. 但是, 正如 Heisenberg 不确定原理所阐明的那样, 任何对原子现象的观测都会涉及到与观测装置的不可忽视的相互作用. 因此, 在普通的物理意义上客观实在性既不能归因于现象, 也不能归因于观察装置. 换句话说, 当没有人看的时候, 人们不能问原子内部到底发生了什么 —— 量子世界只能与某种测量仪器一起被认为是真实的.

Copenhagen 诠释相当于一个 "暗箱" 描述: 输入端是宏观制备过程的结果, 输出端是宏观层面上的测量结果. 至于在 "暗箱" 中发生了什么, 可以用数学形式推导、计算, 但是不赋予物理上的理解和解释. 正如 Bohr 说的:

> There is no quantum world. There is only an abstract quantum physical description. It is wrong to think that the task of physics is to find out how nature is. Physics concerns what we can say about nature.

Born 规则

重述一下关于量子测量的 Born 规则. 被测量子系统记作 Q, 描述系统量子态的空间是 Hilbert 空间 $\mathcal{H}^Q$. 被测力学量设为 A, 在量子力学的数学形式中被表示为厄密算子 $A$, 它的本征值和本征向量分别记作 $a_i$ 和 $|\alpha_i\rangle$ (这里只考虑非简并情形). 测量结果只能属于 $A$ 的本征值的集合. 当系统处于量子态 $|\psi\rangle$ 时候, 得到测量结果 $a_i$ 的几率是 $p_i = |\langle\alpha_i|\psi\rangle|^2$.

量子力学对微观现象的描述和预言是通过 Born 规则体现的. 可以说, 如果没有 Born 规则, 那么所有的理解方式都毫无意义. 从实用的角度来说, 只要知道了 Born 规则, 就可以去做实验了. 但是, 如果从理论的角度审视 Born 规则, 那么将出现一些有待进一步理解的问题:

1. 根据 Born 规则得到的量子几率不能像经典概率论那样用标准的 (Kolmogorov) 几率空间表示. 这样一来, 关于力学量性质的具有客观实在意义的命题, 比如

$$\text{命题 P: 力学量 } A \text{ 的值分布在区间 } [a, a']$$

为真的几率就要被重述为 "在实验中观测到命题 P 为真的几率". 也就是说, 量子力学仅能给出表现在测量仪器上的观测现象的几率. 相对于被观测对象而言, 这是一种 "外在的" 的几率. 因此, 在经典力学中我们可以说力学量, 但是在量子力学中就只能说观测量. 而且, 观测量没有确定的值, 除非系统的量子态正好是观测量的本征值.

2. 在 Copenhagen 诠释中, Bohr 从未将测量过程看作两个量子系统之间的相互作用, 因而测量这个概念缺乏动力学意义上的内涵. 在某个时刻, 观测量没有确定的值, 而在另一个时刻 (例如测量后又进行了重复测量), 观测量具有确定的值, 对于这样的事实, 缺乏动力学描述的测量概念不能给出合理的解释.

总之, Copenhagen 诠释不能提供测量过程的 "内在" 解释, 这就是所谓的测量问题. 针对这个问题, Dirac 和 von Neumann 提出了一个解决办法, 但也带来了新的问题 [2].

## 4.2 von Neumann 的测量方案

为了将测量描述为一个动力学过程, von Neumann 引入了测量仪器 M. 仪器需要在微观层面上与系统发生相互作用, 因此需要用量子力学的语言描述仪器的 "小" 的一面. 与仪器相关的 Hilbert 空间记作 $\mathcal{H}^M$. 描述系统的 Hilbert 空间记作 $\mathcal{H}^Q$. 现在面临的两体量子系统, 所在的 Hilbert 空间是 $\mathcal{H}^Q \otimes \mathcal{H}^M$.

仪器的初态是可以制备的, 设为纯态 $|\varphi\rangle$. 观测对象是系统 Q 的一个观测量, 记作 $A$. 系统和仪器之间要有相互作用, 它们作为一个整体随时间演化的酉算子记作 $U$. 酉算子 $U$ 需要满足的基本条件是

$$|\alpha_i\rangle \otimes |\varphi\rangle \longrightarrow U(|\alpha_i\rangle \otimes |\varphi\rangle) = |\alpha_i\rangle \otimes |\varphi_i\rangle \tag{21}$$

其中 $|\alpha_i\rangle$ 是观测量 $A$ 的本征态, 对应的本征值为 $a_i$. 演化后仪器的状态 $|\varphi_i\rangle$ 彼此正交, 即 $\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij}$. $|\varphi_i\rangle$ 可以看作仪器的指针观测量 (point observable, 记作 $M$) 的本征态, 相应的本征值记作 $m_i$. 我们把 $m_i$ 理解为仪器的读数.

变换 (21) 被称为**校准条件**, 这个条件相当于仪器的调试. (21) 式展现的是具有确定性的量子现象. 在 $|\alpha_i\rangle \otimes |\varphi_i\rangle$ 中, $|\alpha_i\rangle$ 是系统观测量 $A$ 的本征态, $|\varphi_i\rangle$ 是仪器的指针观测量 $M$ 的本征态, 让 $|\varphi_i\rangle$ 对应于特定的现象 $m_i$, 这就有了连接微观量子态和宏观现象的桥梁,

$$|\alpha_i\rangle \longleftrightarrow |\varphi_i\rangle \longleftrightarrow m_i$$

[2] 所以说, 测量问题不是简单的几句话能讲清的, 在不同的场合中, 测量问题有不同的描述和不同的内容.

如果系统的初态不是 $A$ 的本征态, 而是一个叠加形式,

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\alpha_i\rangle$$

那么, 在这种情形下, 观测量 $A$ 没有确定的值.

**回顾一下量子小球模型**

在量子小球的模型中我们说过, 对于处于叠加形式 $|硬\rangle + |软\rangle$ 的量子态, 不能说量子小球可能处于状态 $|硬\rangle$, 也可能处于状态 $|软\rangle$, 因为这样的观点将导致结论:

$$\text{量子小球的硬度观测量可能具有值“硬”, 也可能具有值“软”} \tag{22}$$

这个错误的结论描述的情形是 “值是不确定的” —— 量子小球有一定的可能性是 “硬球”, 有一定的可能性是 “软球”. 根据这个结论, 不能解释对处于量子态 $|硬\rangle + |软\rangle$ 的量子小球进行颜色测量的结果.

因此, 对于在某个表象中处于叠加形式的量子态, 与该表象相关的观测量 “没有确定的值”, 更极端的说法是, 无 “值” 可言. 现在还将看到, 在 von Neumann 的测量模型中, 仪器的观测量也面临同样的困境.

当系统的初态是 $|\psi\rangle = \sum_i c_i |\alpha_i\rangle$, 利用酉变换的线性性, 系统和仪器的整体演化由下式给出,

$$|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle \longrightarrow U(|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle) = \sum_i c_i |\alpha_i\rangle \otimes |\varphi_i\rangle \tag{23}$$

这是前测量状态 (pre-measurement state), 是一个处于叠加形式的纠缠态, 它既不是系统的观测量 $A$ 的本征态, 也不是仪器的指针观测量 $M$ 的本征态. 因此, 和系统观测量 $A$ 一样, 指针观测量 $M$ 也应该 “没有确定的值” (即无值可言). 但是, 我们确实看到了明确的现象, 这些现象属于一个固定的现象集合. 虽然在某一次观测中不能肯定哪一个现象一定出现或一定不出现, 但是我们能够断定, 看到的现象一定属于那个现象集合. 也就是说, 测量结果表现得就像是 “有值, 但不确定”, 需要用统计语言 (概率) 描述某个现象出现的可能性.

现在让我们来用量子态的具体形式说明 “没有确定的值” 和 “值是不确定的”. 比较一下如下两种形式的两体量子态,

$$\text{形式 I:} \quad \sum_i c_i |\alpha_i\rangle \otimes |\varphi_i\rangle \tag{24}$$

$$\text{形式 II:} \quad \sum_i |c_i|^2 |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| \otimes |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \tag{25}$$

其中形式 I 就是刚刚提到的前测量状态, 在这个纠缠态中, 系统的观测量 $A$ 和仪器的观测量 $M$ 都没有确定的值. 形式 II 是一个混合态, 更好的说法是, 态的混合 (mixture of states, 又被称为 Gemenge). 在形式 II 中, 参与混合的成分是 $|\alpha_i\rangle \otimes |\varphi_i\rangle$, 相应的权重 (概率) 是 $|c_i|^2$. 这是一个直积态, 既是 $A$ 的本征态, 又是 $M$ 的本征态. 因此可以认为, 在直积态 $|\alpha_i\rangle \otimes |\varphi_i\rangle$ 中, 系统的观测量 $A$ 有确定的值 $a_i$, 仪器的观测量 $M$ 也有确定的值 $m_i$. 考虑到这个直积态出现的几率是 $|c_i|^2$, 因此 $A$ 和 $M$ 到底取哪一个值是不确定的. 形式 II 描述的是 “值是不确定的” 情形.

显然, 形如 (25) 式的量子态符合测量的要求. 如果两体量子系统 Q+M 能够达到 (25) 式, 那么 von Neumann 的测量模型就能够很好地解释测量过程和测量结果. 换句话说, 量子测量理论面临的问题是: (25) 能出现吗? 或者说, 从 (24) 到 (25) 是一个什么样的过程? 这个问题尚无令人满意的解决方案. 在这里, 我们引入一个假设, 算是对这个问题的回答.

**测量仪器的客观化假设**

量子系统 Q 和测量仪器 M 达到前测量状态 (23) 以后, 测量仪器的指针观测量将给出明确的值 (比如具体的读数), 这个值理解为系统观测量的测量结果.

仪器的客观化假设意味着量子态 (25), 从中可以读出测量结果, 至此, 测量过程完成. 在 (25) 式中出现了几率 $|c_i|^2$, 这便是 Born 规则给出的几率 $|\langle\alpha_i|\psi\rangle|^2$.

还有一个补充说明: 前面提到的校准条件可以放宽. 考虑将 (21) 改写为

$$|\alpha_i\rangle \otimes |\varphi\rangle \longrightarrow U(|\alpha_i\rangle \otimes |\varphi\rangle) = |\psi_i\rangle \otimes |\varphi_i\rangle \tag{26}$$

这里, 不同的 $|\psi_i\rangle$ 可以不是彼此正交的, 但是, $|\alpha_i\rangle$, $|\psi_i\rangle$ 和 $|\varphi_i\rangle$ 三者是一一对应的, 且 $|\varphi_i\rangle$ 依旧满足正交性. 在这种情况下, (23) 式改写为

$$|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle \longrightarrow U(|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle) = \sum_i c_i\,|\psi_i\rangle \otimes |\varphi_i\rangle \tag{27}$$

然后利用仪器的客观化假设, 得到测量结果 $m_i$ 的几率仍然是 $|c_i|^2$.

**比较 (23) 和 (27)**

从 (23) 出发, 有

$$\sum_i c_i\,|\alpha_i\rangle \otimes |\varphi_i\rangle \xrightarrow{\text{仪器客观化假设}} \sum_i |c_i|^2\,|\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| \otimes |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$$

测量后, 系统的状态是一个混合系综 $\{|c_i|^2, |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|\}$, 在每一个 $|\alpha_i\rangle$ 上观测量 $A$ 具有确定的值, 可以继续进行重复测量 (继续对 $A$ 作测量), 观测量结果统计分布是不会改变的.

从 (27) 出发, 有

$$\sum_i c_i\,|\alpha_i\rangle \otimes |\varphi_i\rangle \xrightarrow{\text{仪器客观化假设}} \sum_i |c_i|^2\,|\psi_i\rangle\langle\psi_i| \otimes |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$$

测量后, 系统的状态是一个混合系综 $\{|c_i|^2, |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\}$. 对于每一个 $|\psi_i\rangle$, 观测量 $A$ 没有确定的值. 如果进行重复测量, 则不会重现原先的统计分布.

我们接受 (27) 式作为测量方式的一种选择, 这意味着客观化假设没有用在系统身上. 对于 (23) 式, 可以进一步提出 "实在性假设": 测量后, 系统观测量 $A$ 取得确定的值 $a_i$. 但是对于 (27), 则没有关于系统观测量的进一步陈述.

仅仅对测量仪器提出客观化假设, 这种对测量过程的解释被称为**最小理解** (The minimal interpretation).

**Meaurement Scheme**

四元组 $(\mathcal{H}^M, \varphi^M, U, M)$ 构成测量方案.

- $\mathcal{H}^M$ 是描述仪器的 Hilbert 空间.
- $\varphi^M$ 是仪器的初态, 一般设为纯态, $\varphi^M = |\varphi^M\rangle\langle\varphi^M|$.
- $U$ 是系统与仪器作为一个整体随时间演化的酉算子.

- $M$ 是仪器的指针观测量, 负责给出宏观层面上的现象, 比如读数.

### 4.3 一些数学表示

考虑理想的量子测量. 设系统的初态是

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\alpha_i\rangle$$

仪器的初态是 $|\varphi\rangle$. 经过适当的酉变换后, 系统和仪器的体量子态是

$$|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle \longrightarrow |\Psi\rangle = \sum_i c_i |\alpha_i\rangle \otimes |\varphi_i\rangle$$

其中 $|\varphi_i\rangle$ 是仪器的指针观测量的本征态, $\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij}$.

仪器的客观化假设给出测量后的两体量子态, 记作 $\rho$,

$$\rho = \sum_i |c_i|^2 |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \otimes |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \tag{28}$$

从数学形式上说, 从 $|\Psi\rangle$ 到 $\rho$ 的变换可以看作是投影算子作用的结果. 用投影算子 $\Pi_i^M = |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$ 作用于仪器,

$$|\Psi\rangle \longrightarrow (\mathbb{1} \otimes \Pi_i^M) |\Psi\rangle = c_i |\alpha_i\rangle \otimes |\varphi_i\rangle$$

这是一个未归一的量子态. 在仪器上看到现象 $m_i$ 的几率就是 $|c_i|^2$.

也可以用密度矩阵表示. 先将 $\sum_i c_i |\alpha_i\rangle \otimes |\varphi_i\rangle$ 表示为密度矩阵的形式,

$$\Psi = |\Psi\rangle\langle\Psi| = \sum_{i,j} c_i c_j^* |\alpha_i\rangle\langle\alpha_j| \otimes |\varphi_i\rangle\langle\varphi_j|$$

用投影算子 $\Pi_i^M$ 作用于上述量子态,

$$\left(\mathbb{1} \otimes \Pi_i^M\right) \left[\sum_{i,j} c_i c_j^* |\alpha_i\rangle\langle\alpha_j| \otimes |\varphi_i\rangle\langle\varphi_j|\right] \left(\mathbb{1} \otimes \Pi_i^M\right) = |c_i|^2 |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| \otimes |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$$

考虑所有的观测结果, 即非选择测量, 得到 $\rho$.

如果用系统的投影算子 $\Pi_i^Q = |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$ 作用于 $\Psi$, 也可以得到 $\rho$. 用联合测量的投影算子 $\Pi_i^Q \otimes \Pi_i^M$ 作用于 $\Psi$, 结果也是如此.

几率 $|c_i|^2$ 也可以体现在局部量子态上, $|c_i|^2 = \mathrm{Tr}\left[\Psi(\mathbb{1} \otimes \Pi_i^M)\right]$. 利用以前推导过的公式

$$\mathrm{Tr}(A \,\mathrm{Tr}_B\, C) = \mathrm{Tr}\left((A \otimes \mathbb{1})C\right)$$

将 $|c_i|^2$ 表示为

$$|c_i|^2 = \mathrm{Tr}\left[\Psi(\mathbb{1} \otimes \Pi_i^M)\right] = \mathrm{Tr}\Big(\Pi_i^M \,\mathrm{Tr}_Q\, \Psi\Big) = \mathrm{Tr}\Big(\Pi_i^M \rho^M\Big)$$

类似地,

$$|c_i|^2 = \mathrm{Tr}\left[\Psi(\Pi_i^Q \otimes \mathbb{1})\right] = \mathrm{Tr}\left(\Pi_i^Q \rho^A\right), \quad \rho^Q = \mathrm{Tr}_M\, \Psi$$