第二章　量子态 力学量 Ⅱ

量子力学的测量假设

Hilbert 空间的维数 n 等于在一次观测过程中可以严格区分的状态数. 例如, 在小球-盒子模型或者自旋 1/2 的 SG 实验中, 观测结果有两个, 那么描述小球或者自旋 1/2 粒子的状态的 Hilbert 空间的维数等于 2, 即 $\mathbb{C}^2$.

量子力学的测量假设, Born-Lüders **规则**.

观测量 A 被表示为描述量子系统的 Hilbert 上的厄密算子 A. A 的本征分解 (eigen-decomposition) 形式是

$$A = \sum_{i=1}^{n} a_i \left|\alpha_i\right\rangle\!\left\langle\alpha_i\right|, \quad \langle\alpha_i|\alpha_j\rangle = \delta_{ij} \quad \text{(非简并情形)}$$

系统的量子态在基向量 $|\alpha_i\rangle$ 上的展开为

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} c_i \left|\alpha_i\right\rangle, \quad c_i = \langle\alpha_i|\psi\rangle$$

观测结果是其本征值, 得到某个结果 a_i 的几率等于

$$p_i = |c_i|^2 = |\left\langle\alpha_i|\psi\right\rangle|^2$$

如果得到结果 a_i, 测量后系统处于状态 $|\alpha_i\rangle$.

各个现象出现的几率的总和为 1, 所以

$$1 = \sum_i p_i = \sum_i |\psi_i|^2$$

也就是说, 量子态表示为 Hilbert 空间中归一化的向量.

需要注意的是, 我们观测到的不是观测量的本征值, 而是宏观层面上的现象, 是表现在测量仪器上真实而客观的读数或响应. 经过多轮次的实验观测, 发现仪器的读数不是确定的, 而是随机的. 进一步地可以得到某个读数 (记作 m_i) 出现的概率.

至于仪器的读数 m_i 和被测力学量 A 的本征值 a_i 之间的关系, 量子测量理论描述了一个理想的情形: m_i 和 a_i 之间存在一一对应的函数关系, 即 $a_i = f(m_i)$, 通过读数 m_i, 就可以推知本征值 a_i, 通过 m_i 出现的几率, 就可以得知力学量 A 在量子态 $|\psi\rangle$ 取值 a_i 的几率.

不过, 在很多情况下, 为了叙述上的简明, 我们经常说 "测量力学量 A, 得到它的某个本征值 a_i" 之类的话.

可以看到, 通过量子测量假设, 量子态和力学量这两个量子理论形式系统中的概念与实际观测结果建立了联系, 更确切的说, 与实际观测结果的几率分布建立了联系.

特别地, 如果系统的初态 $|\psi\rangle$ 就是力学量 A 的某个本征态, 比如说 $|\psi\rangle = |\alpha_k\rangle$, 那么, 测量结果一定是 a_k, 换句话说, 得到结果 a_k 的几率是 1, 而得到其它结果的几率一律为 0. 只有在这种情况下, 我们才能看到确定的结果. 这就是我们以前说过的, 在不变的表象中可以看到受限制的经典现象.

设量子系统处于A 的本征态 $|\alpha_k\rangle$, 我们希望知道的却是另一个力学量 B 的测量结果的几率分布, 那么

$$|\alpha_k\rangle = \sum_i \langle\beta_i|\alpha_k\rangle |\beta_i\rangle$$

$$p_i^B = |\langle\beta_i|\alpha_k\rangle|^2$$

如果 $[A, B] \neq 0$, 那么一般情况下 $|\beta_i\rangle$ 不会是 A 的本征态 [1]. 对 B 的测量结果不是确定的, 体现了不确定关系.

从数学形式上说, 在非简并情形下, 可以定义一组一维投影算符 $\Pi_i = |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$, 这些一维投影算符具有如下性质,

$$\Pi_i = \Pi_i^\dagger, \quad \Pi_i\Pi_j = \Pi_i\delta_{ij}, \quad \sum_{i=1}^n \Pi_i = \mathbb{1}$$

$\sum_{i=1}^n \Pi_i = \mathbb{1}$ 实际上就是空间的完备性的体现. 对于自然基向量 $|e_i\rangle$, 容易验证 $\sum_i |e_i\rangle\langle e_i| = \mathbb{1}$. 对于基 $\{|\alpha_i\rangle\}$, 可以有酉变换 V 将自然基向量 $|e_i\rangle$ 变换为 $|\alpha_i\rangle$, 即 $V|e_i\rangle = |\alpha_i\rangle$, 于是

$$\sum_i \Pi_i = \sum_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| = V\Big(\sum_i |e_i\rangle\langle e_i|\Big)V^\dagger = VV^\dagger = \mathbb{1}$$

用 Π_j 作用于 $|\psi\rangle$, 有

$$\Pi_j|\psi\rangle = |\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|\psi\rangle = c_j|\alpha_j\rangle.$$

于是几率 p_j 可以表示为

$$p_j = |c_j|^2 = \langle\psi|\Pi_j|\psi\rangle = \mathrm{Tr}\left[\Pi_j\left(|\psi\rangle\langle\psi|\right)\right] \tag{1}$$

[1] 可能有这样的情况, 虽然 A 和 B 不对易, 但是存在某个 $|\psi\rangle$, 满足 $A|\psi\rangle = B|\psi\rangle = 0$.

即投影算符 Π_j 在 $|\psi\rangle$ 中的期望值. 还要注意到

$$\sum_i p_i = 1 \iff \sum_i \Pi_i = \mathbb{1}$$

关于量子力学的测量假设, 我们有如下评述.

- 用投影算子 $\Pi_i = |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$ 作用于 $|\psi\rangle$, 结果是 $c_i\,|\alpha_i\rangle$. 这并不是量子测量的完整过程. 与本征值 a_i 对应的 $c_i\,|\alpha_i\rangle$ 是一个未归一化的态矢量, 仍然属于 Hilbert 空间, 尚没有表现出经典层面上的现象以及相应的几率. 需注意 c_i 是几率幅, 而几率是 $|c_i|^2$. 对几率幅求模方的过程是量子力学的测量假设规定的.

- 测量结果是要体现在仪器上的. 测量仪器一方面要能够与被测的量子系统产生相互作用, 另一方面还要能够展现经典层面上的客观现象.

- 当某个结果 (用 a_i 标记) 被观测到的时候, 被测量子系统从测量前的状态 $|\psi\rangle$ 变化为测量后的状态 $|\alpha_i\rangle$, 这个过程通常被简单地称为 "塌缩". 听起来这似乎是瞬间完成的. 但是, 任何物理过程都需要一定的时间. 以后将对量子测量理论进行初步讨论.

投影算子 $\Pi_i = |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$ 的性质:

- 投影算子是厄米算子, $\Pi_i = \Pi_1^\dagger$.
- 彼此正交, $\Pi_i\Pi_j = \delta_{i,j}$.
- $\Pi_i^2 = \Pi_i$, 本征值为 1 和 0.
- 完备, $\sum_i \Pi_i = \mathbb{1}$.

还可以定义某个子空间上的投影算子. 设 $\mathbb{C}^n$ 中的一个子空间 $\mathcal{S}$ 的基向量是 $|\alpha_{i_j}\rangle$, $j = 1, \cdots, m$, 这个子空间上的投影算子是

$$\Pi^{\mathcal{S}} = \sum_{j=1}^{m} |\alpha_{i_j}\rangle\langle\alpha_{i_j}|$$

正交子空间上的投影算子也是彼此正交的.

如果两个力学量对易, 那么它们可以有相同的本征向量.

$$A\,|\alpha_i\rangle = a_i\,|\alpha_i\rangle\,, \quad B\,|\beta_j\rangle = b_j\,|\beta_j\rangle\,, \quad [A, B] = 0$$

$$0 = [A, B]\,|\alpha_i\rangle = (AB - BA)\,|\alpha_i\rangle$$

$$A(B\,|\alpha_i\rangle) = BA\,|\alpha_i\rangle = a_i(B\,|\alpha_i\rangle)$$

$$\text{暂不考虑简并情形}$$

$$B\,|\alpha_i\rangle \propto |\alpha_i\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$|\alpha_i\rangle \text{ 是 } B \text{ 的本征态}$$

因此, 当 $[A, B] = 0$ 时, 可以在同一个表象中描述这两个力学量, 可以在相同的实验环境中测量它们, 这两个力学量是相容的.

观测量的期望值

观测量获得本征值 a_i 的几率是 $p_i = |\langle\alpha_i|\psi\rangle|^2$, 期望值是

$$\begin{aligned}
\langle A\rangle_\psi &= \sum_i a_i p_i \\
&= \sum_i a_i |\langle\alpha_i|\psi\rangle|^2 \\
&= \sum_i a_i \langle\alpha_i|\psi\rangle \langle\psi|\alpha_i\rangle \\
&= \sum_i \langle\psi|\alpha_i\rangle a_i \langle\alpha_i|\psi\rangle \\
&= \langle\psi|A|\psi\rangle = \mathrm{Tr}(A \ \ |\psi\rangle\langle\psi|)
\end{aligned}$$

力学量的本征值对应于测量结果, 期望值对应于测量结果的加权平均, 它们都是需要借助测量才能体现. 不能轻易地说力学量具有先验的不变的值.

测量后量子系统的状态

测量前, 系统的状态处于叠加态

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

强调: 这是几率幅的叠加, 而不是几率的混合.

如果作选择, 比如选择 $|\alpha_1\rangle$, 从操作上说, 当仪器的端口 1 上出现响应的时候, 将该端口上的出射粒子保存起来 (假设测量过程是非破坏的), 那么这些粒子的状态就是 $|\alpha_1\rangle$. 做成这件事的概率是 $p_1 = |c_1|^2$. 这可以看作是量子态的制备过程.

如果想选择端口 1 或端口 2 上的出射粒子, 那么还是要在观测到端口 1 或端口 2 有响应的时候设法保存出射粒子. 选择成功的几率是

$$p_{\text{success}} = p_1 + p_2 = |c_1|^2 + |c_2|^2 = |\langle\alpha_1|\psi\rangle|^2 + |\langle\alpha_2|\psi\rangle|^2$$

成功选择后, 所获得的量子系统的状态是 $|\alpha_1\rangle$ 和 $|\alpha_2\rangle$ 的混合 (而不是叠加), 量子态 $|\alpha_1\rangle$ 出现的几率是 $\frac{p_1}{p_1+p_1}$, 量子态 $|\alpha_2\rangle$ 出现的几率是 $\frac{p_2}{p_1+p_1}$.

可能有这样的想法: 用两维子空间上的投影算子 $|\alpha_1\rangle\langle\alpha_1| + |\alpha_2\rangle\langle\alpha_2|$ 作用于 $|\psi\rangle$,

$$(|\alpha_1\rangle\langle\alpha_1| + |\alpha_2\rangle\langle\alpha_2|)\,|\psi\rangle = c_1\,|\alpha_1\rangle + c_2\,|\psi_2\rangle$$

得到的是两维子空间中的一个向量, 归一化, 给出几率

$$p_{1,2} = |c_1|^2 + |c_2|^2$$

归一化的量子态是

$$|\psi_{1,2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{p_{1,2}}}(c_1\,|\alpha_1\rangle + c_2\,|\psi_2\rangle) \tag{2}$$

虽然几率 $p_{1,2}$ 等于上面的 p_{success}, 但是, 以这种方式得到的 $|\psi_{1,2}\rangle$ 不是 $|\alpha_1\rangle$ 和 $|\alpha_2\rangle$ 以不同几率的混合, 而是 $|\alpha_1\rangle$ 和 $|\alpha_2\rangle$ 以几率幅形式的叠加, 二者有本质上的区别.

以两维投影算子 $|\alpha_1\rangle\langle\alpha_1| + |\alpha_2\rangle\langle\alpha_2|$ 作用于 $|\psi\rangle$ 并得到 (2) 的过程实际上是在简并情形下进行选择性量子测量的结果.

设想观测量 A 的两个本征向量 $|\alpha_1\rangle$ 和 $|\alpha_2\rangle$ 对应于同一个本征值 a_1, 那么, 当得到观测结果 a_1 的时候, 系统的测量后的状态就是由 (2) 式给出的 $|\psi_{1,2}\rangle$.

非选择的测量过程完成后, 系统的每一个测量后 (post-measurement) 的状态 $|\alpha_i\rangle$ 以一定的几率一一对应于可以严格区分的宏观现象 m_i, 这时, 系统的状态**不能**写为

$$\cancel{\sum_i p_i\,|\alpha_i\rangle}$$

我们要表示的不是以几率幅的叠加, 而是以几率的混合. 暂且把这种混合状态记作 $\mathcal{E} = \{p_i, \alpha_i\}$,

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\text{非选择测量}} \mathcal{E} = \{p_i, \alpha_i\}, \tag{3}$$

其中 $i = 1, \cdots, n$, $p_i = |c_i|^2 = |\langle\alpha_i|\psi\rangle|^2$. 它的意思是, 系统以几率 p_i 处于被测力学量 A 的某一个本征态 $|\alpha_i\rangle$. 这是混合态 (mixed state).

混合态

前面讨论了测量后系统的状态, 一般情况下, 测量后的状态不能表示为若干个右矢的线性叠加, 因此需要有一个数学形式描述测量后的量子态. 这涉及混合态的概念.

系综

为了介绍混合态, 我们首先需要叙述系综的概念. 系综是一个想象中的假想的概念, 为了说假想的东西, 先得说与此相关的真实的事情. 以自旋 1/2 粒子的 SG 实验为例.

设想我们制备了 100 个处于状态 $|0\rangle = |\uparrow\rangle$ 的自旋 1/2 的粒子. 接着, 让这 100 个粒子通过 SG(x) 装置. 根据量子力学的预言, 即 Born 规则, 每一个粒子偏向 $+x$ 方向和或偏向 $-x$ 方向的几率都是 1/2.

但是, 在实际的实验结果中, 我们未必能看到 50 个粒子偏向 $+x$ 方向或 $-x$ 方向. 说不定只有 45 个粒子偏向 $+x$ 方向, 55 个偏向 $-x$ 方向. 甚至还可能根本没有任何粒子偏向 $+x$ 方向, 所有的 100 个粒子都偏向了 $-x$ 方向. 当然, 这件事情发生的可能性很小. 实际上, 当进入 SG(x) 的粒子数 N 越来越多, 以至于 $N \to \infty$ 的时候, 事件 "偏向 $+x$ 和 $-x$ 方向的粒子数接近各占一半" 发生的可能性变得越来越大, 以至于在极限情形下体现概率 1/2. 这时, 我们才可以说偏向 $\pm x$ 方向的几率各为 1/2, 才能说量子理论的预言有了操作意义上的对应.

但是, 极限情形下已经是假想中的描述了, 我们没有无穷多个样本, 也不可能对无穷多个粒子进行测量. 于是, 在想象中, 我们拥有无穷多个处于 $|0\rangle$ 的粒子, 这些粒子经过了 SG(x) 之后的结果对应于由玻恩规则给出的理论预言.

这想象中的无穷多个处于相同状态的粒子就组成了所谓的纯态系综. 引入系综的概念是为了叙述几率, 因为我们需要无穷多的样本、无穷多个事件才能使频度趋近于几率.

想象中的系综还有一个有别于实际情况的特点: 系综并不对应于多体量子系统. 在施特恩-格拉赫实验中, 为了描述 100 个自旋 1/2 的入射粒子, 需要的空间是 100 个 $\mathbb{C}^2$ 的直积, 即

$$\mathscr{H} = \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{C}^2.$$

如果粒子数更多, 则 $\mathscr{H}$ 的维数更大. 对于 N 个粒子, 我们需要 2^N 维的复空间. 而对于系综则不然. 构成系综的量子系统是想象中的, 不是真实的. 不需要利用更多更大的复空间描述这些想象中的系统. 我们用系综描述自旋 1/2 粒子的量子态, 所在空间仍然是二维的.

系综是基于真实的多体系统的抽象的想象的概念, 反过来, 真实的多体系统可以为我们提供关于系综的形象的具有操作意义的理解. 而且, 在具体的实验中, 比如对量子系统的操控, 需要从系统的特定的初态开始, 对之进行一些列的操作, 这实际上就是量子态的制备过程.

还是以自旋 1/2 粒子为例. 如果希望得到自旋角动量 S_z 的取值为 $+\hbar/2$ 的量子态, 或者说 Pauli 矩阵 σ_z 取值 $+1$ 的本征态, 即 $|z+\rangle$ 态, 或者记作 $|0\rangle$, $|\uparrow\rangle$. 可以让粒子通过 SG(z) 装置, 并在出射粒子中选择向 $+z$ 方向偏转的那一部分. 在理想情形下, 这些被选择的粒子都处于 $|0\rangle$ 态. 可以让它们继续通过第二个 SG(z) 装置, 其结果是, 所有的出射粒子都偏向 $+z$ 方向. 于是, 通过对某个测量结果的选择, 可以制备出若干个以至大量的处于相同量子态的粒子. 一方面, 从具体的实际的角度说,

制备过程得到的结果是由处于相同状态的子系统构成的多体量子系统; 另一方面, 从抽象的想象的角度说, 我们建立了**纯态系综**的概念: 在想象中的构成系综的无穷多个系统具有相同的量子态, 比如 $|\psi\rangle$, 我们称之为纯态, 系综的状态可以用 $|\psi\rangle$ 描述, 是为纯态系综. 此前, 我们接触的量子态基本上都是纯态. 纯态 $|\psi\rangle$ 的特性是, 在原则上存在具有确定结果的测量方式, 即, 测量处于量子态 $|\psi\rangle$ 的量子系统的某个特定的力学量, 得到的结果是确定的而不是随机的.

现在考虑量子态制备的另一种方式及结果. 设想有两个 SG 实验装置, 它们都是 SG(z). 通过第一个 SG(z) 制备了 N_+ 个处于 $|z+\rangle$ 态的粒子, 通过第二个 SG(z) 制备了 N_- 个处于 $|z-\rangle$ 态的粒子, 然后, 将它们混合在一起, 构成总数为 $N = N_+ + N_-$ 的多体系统. 为了描述这个多体系统的状态, 让这 N 个粒子通过第三个 SG(z) 装置. 显然, 出射粒子中将会有 N_+ 个偏向 $+z$ 方向, 有 N_- 个偏向 $-z$ 方向.

换成几率的语言来描述. 设想某人通过以下过程制备量子态: 首先, 制备大量处于 $|z+\rangle$ 态 (以下记作 $|0\rangle$) 的粒子, 把它们储存在某个容器中; 再制备大量处于 $|z-\rangle$ 态 (以下记作 $|1\rangle$) 的粒子, 也把它们储存在另一个容器中. 然后, 制备者根据一个经典随机变量 X 的值决定从哪一个容器中选取粒子. 随机变量 X 有两个值, $x = 0$ 和 $x = 1$, 它们出现的几率分别是 p_0 和 p_1. 当 $x = 0$ 时, 选择处于 $|0\rangle$ 的粒子; 当 $x = 1$ 时, 选择处于 $|1\rangle$ 的粒子. 这就有了**混合系综**的概念: 系综 $\mathcal{E}$ 中每一个想象中的系统以几率 p_0 处于 $|0\rangle$ 态, 以几率 p_1 处于 $|1\rangle$ 态; 或者说, 系综 $\mathcal{E}$ 是两个纯态系综 $\mathcal{E}_0$ 和 $\mathcal{E}_1$ 分别以几率 p_0 和 p_1 混合的结果, 这里 $\mathcal{E}_0$ 是以 $|0\rangle$ 描述的系综, $\mathcal{E}_1$ 是以 $|1\rangle$ 描述的系综. 可以把这个说法形式地表示为

$$\mathcal{E} = p_0\mathcal{E}_0 + p_1\mathcal{E}_1. \tag{4}$$

更一般地, 可以让若干个纯态系综 $\mathcal{E}_i$ 以相应的几率 p_i 混合, 得到混合系综 $\mathcal{E}$,

$$\mathcal{E} = \sum_i p_i\mathcal{E}_i, \quad p_i \geqslant 0, \quad \sum_i p_i = 1 \tag{5}$$

其中的求和没有设定上限, 原则上可以用任意多个纯态系综进行混合. 而且, 描述 $\mathcal{E}_i$ 的量子态 $|\psi_i\rangle$ 也未必是彼此正交的. 例如, 我们可以使用两个不同的 SG 实验装置, 一个是 SG(z), 另一个是 SG(x). 通过 SG(z) 制备出处于 $|z+\rangle$ 的粒子; 通过 SG(x) 制备出处于 $|x+\rangle$ 的粒子, 然后将它们混合在一起. 用几率和系综的语言来说, 得到了混合系综 $p_{z+}\mathcal{E}_{z+} + p_{x_+}\mathcal{E}_{x+}$. 描述其中的两个纯态系综的态矢量不是正交的, 即 $\langle z + |x+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

我们用 (5) 式示意性地表示了通过特定的制备过程得到的混合系综 $\mathcal{E}$, 或者, 可以把 $\mathcal{E}$ 写为

$$\mathcal{E} = \{p_i, \psi_i\}. \tag{6}$$

需要注意的是, 混合系综 $\mathcal{E}$ 描述的是不同的量子态 $|\psi_i\rangle$ 以几率 p_i 混合, 而不是以几率幅叠加. 对此需要稍加说明.

以 (4) 式表示的系综为例. 再重复说一遍它的意思: 自旋 1/2 粒子以几率 p_0 处于 $|0\rangle$ 态, 以几率 p_1 处于 $|1\rangle$ 态. 如果让处于该状态的粒子通过 SG(z) 装置, 那么观测结果将体现这样的几率分布.

现在, 构造如下形式的量子态

$$|\psi\rangle = \sqrt{p_0}\,|0\rangle + \sqrt{p_1}e^{i\delta}\,|1\rangle\,. \tag{7}$$

让处于状态 $|\psi\rangle$ 的自旋 1/2 粒子通过 SG(z) 装置, Born 规则给出的预言是, 出射粒子偏向 $+z$ 方向的几率是 p_0, 偏向 $-z$ 方向的几率是 p_1.

在这种情况下, (7) 式描述的量子纯态与 (4) 式描述的混合系综在 SG(z) 测量过程中给出同样的几率分布.

但这只是一个偶然的结果, 只要换一种观测方式, 我们就能看到它们的不同. 让 (4) 式描述的粒子通过 SG(x). 不论粒子处于 $|0\rangle$ 态或是 $|1\rangle$ 态, 穿过 SG(x) 之后偏向 $\pm x$ 方向的几率都是 1/2. 因此, 不论 p_0 和 p_1 取怎样的值, 最终的实验结果都是, 出射粒子等几率地偏向 $\pm x$ 方向. 然而, 对于 (7) 式描述的自旋 1/2 粒子, 通过 SG(x) 之后偏向 $\pm x$ 方向的几率分别是

$$p(\pm x) = |\langle x_\pm|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{2}\left|\sqrt{p_0} \pm \sqrt{p_1}e^{i\delta}\right|^2.$$

简单地, 令 $\delta = 0$, 将上式简化为 $p(\pm x) = \frac{1}{2}(1 \pm 2\sqrt{p_0 p_1})$. 显然, 一般情况下纯态系综 $|\psi\rangle$ 的实验结果是不同于混合系综的实验结果的. 总之, 混合系综 $\mathcal{E} = \{p_i, \psi_i\}$ 的数学形式不可能表示为 Hilbert 空间的态矢量.

密度算子

混合态的数学表示是密度算子, 在有限维空间的情形下, 可以说密度矩阵. 下面通过力学量的期望值引入密度矩阵.

对于纯态系综, 可以用态矢量 $|\psi\rangle$ 描述. 力学量 A 在 $|\psi\rangle$ 上的期望值记作 $\langle A\rangle_\psi$. 它的意思是:

$$\text{力学量 } A \text{ 的观测结果} \in \{a_i\}$$

$$\text{量子系统处于 } |\psi\rangle$$

$$\text{观测到某个结果 } a_i \text{ 的几率 } p_i = |\langle\alpha_i|\psi\rangle|^2$$

$$\langle A\rangle_\psi = \sum_i p_i a_i = \sum_i \langle\psi|\alpha_i\rangle\, a_i\, \langle\alpha_i|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle$$

可以继续计算下去, 设空间的基向量是 $|\varphi_i\rangle$, 有

$$\begin{aligned}
\langle A\rangle_\psi &= \langle\psi|\,A\,|\psi\rangle \\
&= \sum_i \langle\psi|\varphi_i\rangle\,\langle\varphi_i|\,A\,|\psi\rangle \\
&= \sum_i \langle\varphi_i|\,A\,|\psi\rangle\,\langle\psi|\varphi_i\rangle
\end{aligned}$$

$$= \mathrm{Tr}\left(|\psi\rangle\langle\psi|\, A\right) = \mathrm{Tr}\left(\psi A\right).$$

这里 $\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$.

对于混合系综 $\mathcal{E} = \{p_i, \psi_i\}$, 力学量 A 的期望值是它在每一个 $|\psi_i\rangle$ 上的期望值的加权平均, 权重即是 p_i,

$$\langle A\rangle_{\mathcal{E}} = \sum_i p_i \langle\psi_i|\, A\, |\psi_i\rangle = \sum_i p_i \,\mathrm{Tr}\left(\psi_i A\right) = \mathrm{Tr}\left(\sum_i p_i\psi_i\, A\right). \tag{8}$$

这里 $\psi_i = |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ 是关于 $|\psi_i\rangle$ 的投影算符. 上式最后的形式表明, 可以把混合系综 $\{p_i, \psi_i\}$ 表示为

$$\mathcal{E} = \{p_i, \psi_i\} \longrightarrow \sum_i p_i\, |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\,.$$

这种形式就是**密度算符** (Density Operator), 在有限维空间中也称为密度矩阵.

对于给定的混合系综, 其密度算符有如下定义.

定义 (密度算符) 对于混合系综 $\mathcal{E} = \{p_i, \psi_i\}$, 用 ρ 表示它的密度算符, 其数学形式是

$$\rho = \sum_i p_i\, |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\,, \quad p_i \geqslant 0, \quad \sum_i p_i = 1. \tag{9}$$

密度矩阵表示了系综的平均量子态.

密度算符有如下性质.

性质 1 密度算符的迹为 1, 即 $\mathrm{Tr}(\rho) = 1$.

性质 2 密度算符是厄米的, $\rho = \rho^\dagger$.

性质 3 密度算符是半正定的[2], 即对于任意的向量 $|\phi\rangle \in \mathscr{H}$, 总有 $\langle\phi|\, \rho\, |\phi\rangle \geqslant 0$.

根据密度算符的定义, 上述性质容易证明. 设 Hilbert 空间 $\mathscr{H}$ 的是有限维的, 基向量为 $\{|\varphi_i\rangle\}$.

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}(\rho) &= \sum_i \langle\varphi_i|\, \rho\, |\varphi_i\rangle \\
&= \sum_{i,k} p_k \langle\varphi_i|\psi_k\rangle \langle\psi_k|\varphi_i\rangle \\
&= \sum_k p_k \sum_i |\langle\varphi_i|\psi_k\rangle|^2 \\
&= \sum_k p_k = 1.
\end{aligned}$$

这里用到了 $|\psi_k\rangle$ 的归一化条件, $\sum_i |\langle\varphi_i|\psi_k\rangle|^2 = 1$. 这是性质 1.

[2]有些时候, 为了叙述上的省事, 我们会简单地说 ρ 是正定的.

因为 (9) 式的求和表达式中的每一项都是厄米的, 故 ρ 是厄米的. 这是性质 2.

对于任意的 $|\varphi\rangle \in \mathscr{H}$, 有

$$\langle\varphi|\,\rho\,|\varphi\rangle = \sum_k p_k \langle\varphi|\psi_k\rangle = \sum_k p_k |\langle\varphi|\psi_k\rangle|^2 \geqslant 0.$$

即性质 3.

从性质 3 可知, 密度算符的所有的本征值是非负的; 从性质 1 和性质 3 可知, 密度算符的本征值属于区间 $[0,1]$, 且所有本征值的和为 1. 纯态 $|\psi\rangle$ 的密度矩阵 $\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ 的本征值是唯一一个 1 和若干个 0.

凸集合 不论是经典力学还是量子力学, 系统的状态都构成 "凸 (convex) 集合". 简单地说, 凸结构是这样一种集合, 可以将其中的任意两个点 "混合" 为该集合中的另一个点.

从几何的观点来说, 两个态对应于态空间中的两个点, 两个态的混合对应于连接这两个点的线段上的某个点. 换句话说, 如果有两个点属于凸结构的集合, 那么连接这两点的线段也属于这个凸结构.

给定两个纯态 $|\psi_1\rangle$ 和 $|\psi_2\rangle$, 它们的密度矩阵分别是 $\psi_1 = |\psi_1\rangle\langle\psi_1|$ 和 $\psi_2 = |\psi_2\rangle\langle\psi_2|$, 它们的凸和 (convex sum) 是

$$p_1\psi_1 + p_2\psi_2, \quad p_1, p_2 > 0,\ p_1 + p_2 = 1$$

凸和的结果仍然是一个量子态, 是混合态.

一般地, 任意个量子态的凸和也是一个量子态. 设 ρ_i 是 $\mathbb{C}^n$ 上的密度矩阵, 有

$$\rho = \sum_i p_i\rho_i, \quad \sum_i p_i = 1$$

ρ 是 $\mathbb{C}^n$ 上的密度矩阵.

反过来, 上述形式也可以视作混合态 ρ 的一种解构, $\{p_i, \rho_i\}$.

关于密度算符的理解, 有两点需要说明.

1. 重申密度算符的数学形式中的求和涉及到的是几率, 量子力学的叠加原理也表现为求和的形式, 但涉及到是几率幅, 二者有本质上的不同. 与几率有关的相加不会带来干涉效应, 而与几率幅有关的相加则导致干涉效应. 故可将密度算符视为量子态的非相干叠加, 而叠加原理描述的是量子态的相干叠加.

2. 密度算符提供的是关于量子系综的数学形式上的描述, 但是不能说明系综的具体的构成. 系综的具体形式, 即 $\mathcal{E} = \{p_i, \psi_i\}$, 来自量子态的制备过程. 如果混合系综 $\mathcal{E}$ 的制备者并不把具体的制备过程告知随后的观测者, 那么观测者面对的只能是用密度算符 ρ 表示的量子态. 而对于给定的 ρ, 却有很多的甚至是无穷多的系综与此对应. 以自旋 1/2 粒子的系综 $\left\{\frac{1}{2}, |0\rangle\langle 0|\,;\frac{1}{2}, |1\rangle\langle 1|\,\right\}$ 为例. 从制备

过程来说, 该系综是两个纯态系综 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 的等几率的混合. 它的密度算符是,

$$\rho = \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

有无穷多中不同的系综与此对应,

$$\begin{aligned}\rho = &\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \\ =&\frac{1}{2}|x+\rangle\langle x+| + \frac{1}{2}|x-\rangle\langle x-| \\ =&\frac{1}{2}|y+\rangle\langle y+| + \frac{1}{2}|y-\rangle\langle y-| \\ =&\frac{1}{2}|z+\rangle\langle z+| + \frac{1}{2}|z-\rangle\langle z-| \\ =&\frac{1}{2}|n+\rangle\langle n+| + \frac{1}{2}|n-\rangle\langle n-|.\end{aligned}$$

其中 $|n\pm\rangle$ 表示在空间任意某个方向 $\boldsymbol{n}$ 上的 Pauli 矩阵的两个本征向量. 上式表明了同一种数学形式对应于无穷多种物理上的可能的实现方式.

最大混合态 在 $\mathbb{C}^n$ 中, 定义如下形式的混合态

$$\rho = \frac{1}{n}\operatorname{diag}(1,\ 1,\ \cdots,\ 1)$$

最大混合态缺乏经典对应. 如果以前说过的量子小球处于最大混合态, 那么不能用经典小球模型来模拟.

纯度 对于纯态 $\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$,

$$\operatorname{Tr}\psi = \operatorname{Tr}\psi^2 = 1$$

对于混合态 ρ,

$$\operatorname{Tr}\rho = 1, \quad \operatorname{Tr}\rho^2 < 1$$

这可以视作纯态和混合态的一个判据, 也可以用 $\operatorname{Tr}\rho^2$ 衡量量子态的纯度.

混合态情形下的 Born 规则

以前谈到的 Born 规则是针对纯态而言的, 容易推广到混合态情形.

设系统处于混合态, 密度矩阵是 ρ, 有多种 (实际上无穷多种) 不同形式的混合系综对应于同一个 ρ. 假设 ρ 是某个混合系综 $\{q_k, \psi_k\}$ 的平均量子态, 即

$$\rho = \sum_k q_k \psi_k$$

其中 q_k 混合系综中 ψ_k 的几率, $\sum_k q_k = 1$, 而 ψ_k 是纯态 $|\psi_k\rangle$ 的密度矩阵, $\psi_k = |\psi_k\rangle\langle\psi_k|$.

系统的被测力学量设为 A, 本征值记作 a_i, 即对应的本征向量为 $|\alpha_i\rangle$,

$$A = \sum_i a_i \, |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$$

当系统处于 $|\psi_k\rangle$ 时, 测量 A 得到结果 a_i 的几率是 $|\langle\alpha_i|\psi_k\rangle|^2$, 而系统处于 $|\psi_k\rangle$ 的几率为 q_k, 所以, 对于混合系综 $\{q_k, \psi_k\}$, 测量 A 得到结果 a_i 的几率为

$$\begin{aligned}
p_i &= \sum_k q_k |\langle\alpha_i|\psi_k\rangle|^2 \\
&= \sum_k q_k \langle\alpha_i|\psi_k\rangle \langle\psi_k|\alpha_i\rangle \\
&= \langle\alpha_i| \left[\sum_k q_k \, |\psi_k\rangle\langle\psi_k| \right] |\alpha_i\rangle \\
&= \langle\alpha_i|\rho|\alpha_i\rangle = \mathrm{Tr}(\rho\Pi_i)
\end{aligned}$$

其中 $\Pi_i = |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$. 容易看出, 几率 p_i 不依赖于混合系综的具体组成形式.

得到结果 a_i 后, 系统的状态的状态是 $|\alpha_i\rangle$, 其过程是

$$\rho \longrightarrow \Pi_i \rho \Pi_i^\dagger = \Pi_i \rho \Pi_i = p_i \, |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$$

考虑了所有的测量结果, 有

$$\rho \longrightarrow \sum_i \Pi_i \rho \Pi_i = \sum_i p_i \, |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$$

如果系统的初态是纯态, 也有类似的过程和结果, 即

$$\psi = |\psi\rangle\langle\psi| \longrightarrow \sum_i \Pi_i \psi \Pi_i = \sum_i p_i \, |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| \,, \quad p_i = |\langle\alpha_i|\psi\rangle|^2 = \mathrm{Tr}(\psi\Pi_i)$$

这是一个保迹的过程,

$$\mathrm{Tr}\,\rho = 1, \quad \mathrm{Tr}\left(\sum_i \Pi_i \rho \Pi_i \right) = 1$$

也是一个正定变换 (将正定算子变为正定算子), 而且是 (以后要谈到的) 完全正定变换.

测量前后, 被测力学量 A 的期望值是不变的,

$$\mathrm{Tr}\left(A\ \sum_i p_i \left|\alpha_i\right\rangle\left\langle\alpha_i\right|\right) = \sum_i a_i p_i = \mathrm{Tr}(A\rho)$$

Quantum Non-demolition Measurement (QND)