第 49 卷 第 10 期 2000 年 10 月
1000-3290/2000/49(10)/1912-07

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol. 49, No. 10, October, 2000
©2000 Chin. Phys. Soc.

混合纠缠态的几何描述*

石名俊[1)2)] 杜江峰[1)2)] 朱栋培[2)] 阮图南[2)]

[1)](中国科学技术大学量子通讯和量子计算开放实验室,合肥 230026)

[2)](中国科学技术大学近代物理系,合肥 230027)

(2000 年 1 月 26 日收到;2000 年 4 月 20 日收到修改稿)

给出了 Hilbert-Schmidt(H-S)空间中密度矩阵的向量表示,建立了完整的 H-S 空间中的度规,由此将混合纠缠态的判据纳入到直观的几何图像中,讨论了最大混合态附近可分离态的紧致邻域,得到了关于该邻域体积测度的更强的结果.

关键词:纠缠,混合态,Hilbert-Schmidt 空间

PACC:0365,3330,4230

1 引 言

对于一个多体量子系统,如果其子系统之间在某个时间间隔内有过相互作用,那么,即使在这以后它们彼此相距甚远且没有任何联系,也不能想当然地孤立地研究这些子系统的性质,并希望从中得出有关整个系统的正确描述[1].这些子系统之间表现出来的关联无法用经典的定域实在论(local realism)来解释,就是说,无法赋予这些子系统确定的量子态及确定的实在性,否则得到的结果将与量子力学的理论预言和实验结果相悖[2—8].我们把这种不符合直觉的奇特的关联现象称为量子纠缠(quantum entanglement)或量子关联(quantum correlation).

量子纠缠的奇特之处及其在理论和实验上的重要意义见诸近来大量文献[6—14].具有纠缠现象的量子系统的量子态称为纠缠态(entangled states),它可以是纯态,也可以是混合态.在物理上,纠缠态意味着非定域性,即不能由各个子系统的定域操作来实现.在数学上,纠缠态意味着其密度矩阵无法分解为各子系统的态构成的直积态的凸和形式,是为不可分离性(inseparability)[15].本文认为,量子纠缠或量子关联与不可分离性是等价的,并将不加区分地使用这些概念.

一个重要的问题是,如何判定一个给定的量子态是否为纠缠态,或者说,一种关联是否为量子关联,一个密度矩阵是否不可分离.考虑到量子关联是相对于经典关联而言,不可分离性是相对于可分离性而言,那么,可以首先研究具有经典关联的可分离态所必然具备的共同性质,不具备此类性质的态则是纠缠态.

本文第三节综述了可分离态的一些固有性质,相应地得到了不可分离态的判据.基于第二节引入的 Hilbert-Schmidt 空间及密度矩阵在该空间中的向量表示,将所讨论的内容纳入到一个具体的几何框架中并给出了直观的解释,第四节以此得到了有关可分离态区域的一个更强的结果.

作两点说明:1)本文中主要讨论的物理对象是由两个自旋为 1/2 的粒子构成的两体系统.由于每个粒子都在二维 Hilbert 空间中描述.把这一两体系统简单地记作 2×2 系统,类似地也可以有 2×3,3×3 等两体系统.2)除了对于可分离的量子系统和量子态,不应该声称子系统具有怎样的量子态,但是,为了叙述方便,在下文中会出现这类描述,这只是一种数学形式上的表达而不意味着本文承认这类描述的物理意义.

2 密度矩阵 Hilbert-Schmidt 空间

2.1 Hilbert 空间

设 A,B 为 2×2 量子系统的两个子系统,它们分别用两个二维 Hilbert 空间 $\mathscr{H}^A$ 和 $\mathscr{H}^B$ 描述,描述

* 国家自然科学基金(批准号:19875050 和 6773052)及中国科学院院长基金资助的课题.

整个系统的是一个四维 Hilbert 空间 $\mathscr{H}=\mathscr{H}^A\otimes\mathscr{H}^B$.

$\mathscr{H}^A$ 和 $\mathscr{H}^B$ 的基为各自 Pauli 矩阵 σ_3(即 σ_z)的两个正交归一的本征向量,即

$$|0\rangle_{A(B)}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_{A(B)},\ |1\rangle_{A(B)}=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_{A(B)}. \quad (1)$$

$\mathscr{H}$的基由(1)式的直积构成,即

$$|00\rangle,\ |01\rangle,\ |10\rangle,\ |11\rangle, \quad (2)$$

这里将$|i\rangle_A\otimes|j\rangle_B$ 简写为$|ij\rangle$,于是系统的纯的量子态可以一般地表示为

$$|\Psi\rangle=c_0|00\rangle+c_1|01\rangle+c_2|10\rangle+c_3|11\rangle, \quad (3)$$

其中 c_i 为复数,且满足$\sum_{i=0}^{3}|c_i|^2=1$.

定义 1 如果2×2量子系统某个纯态$|\Psi\rangle$可以表示为子系统的纯态的直积,即

$$|\Psi\rangle=|\psi\rangle_A\otimes|\varphi\rangle_B,\ |\psi\rangle_A\in\mathscr{H}^A,\ |\varphi\rangle_B=\mathscr{H}^B, \quad (4)$$

则该纯态为可分离态,否则为纠缠态.

2.2 密度矩阵

对于混合态,需要用密度矩阵来描述.一般地,密度矩阵可表示为

$$\rho=\sum_{i=1}^{N}p_i|\Psi_i\rangle\langle\Psi_i|, \quad (5)$$

其中 N 为任一自然数,$p_i\geqslant0$ 且$\sum_{i=1}^{N}p_i=1$,$|\Psi_i\rangle\in\mathscr{H}$,各个$|\Psi_i\rangle$归一但不一定彼此正交,将所有 2×2 量子系统的量子态的集合记作 $\mathscr{T}$.

定义 2 如果2×2量子系统某一量子态的密度矩阵可以表示为其子系统的密度矩阵的直积的有限凸和,即

$$\rho=\sum_{i=1}^{M}p_i\rho_i^A\otimes\rho_i^B, \quad (6)$$

其中 M 为任一自然数,$p_i\geqslant0$ 且$\sum_{i=1}^{M}p_i=1$,ρ_i^A 和 ρ_i^B 分别为子系统的A,B 的密度矩阵,那么该量子态是可分离态,否则为纠缠态.

实际上,(6)式中的 ρ_i^A 和 ρ_i^B 均可视作投影算子,即 $\rho_i^A=P_i=|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$,$\rho_i^B=Q_i=|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$,于是(6)式有等价形式

$$\rho=\sum_{i=1}^{M}p_iP_i\otimes Q_i. \quad (7)$$

直观地,我们认为,可分离的态应该表示为 $\rho=\rho^A\otimes\rho^B$,但是,在更广泛的意义上,定义 2 意味着由(6)式描述的两体系统可以通过对子系统的定域操作来实现,即在一定的概率 p_i 下,子系统 A 处于态 ρ_i^A,同时子系统 B 处于态ρ_i^B. A 和B 之间仅有的关联是概率分布 $\{p_i\}$,或者说,这一关联来自于一个具有概率分布 $\{p_i\}$的隐变量 i. 对由(6)式描述的系统的测量结果可用经典概率论来解释,子系统间的关联为经典关联,故(6)式定义了一种广泛意义上的可分离态.

考虑到 $\mathscr{H}$空间的基(2)式,可以把(5)式表示为

$$\rho=\sum_{i,j=0}^{1}\sum_{\alpha,\beta=0}^{1}C_{i\alpha,j\beta}|i\alpha\rangle\langle j\beta|. \quad (8)$$

这里用罗马字母表示 $\mathscr{H}^A$ 中的基,用希腊字母表示 $\mathscr{H}^B$ 中的基.

定义 3 密度矩阵的偏迹(partial trace),约化密度矩阵(reduced density matrices),给定形如(8)式的密度矩阵 ρ,有如下对 A,B 求偏迹的运算:

$$\mathrm{Tr}_A\rho\equiv\sum_{i=0}^{1}\langle i|\rho|i\rangle,\ \mathrm{Tr}_B\rho\equiv\sum_{\alpha=0}^{1}\langle\alpha|\rho|\alpha\rangle. \quad (9)$$

所得结果均为 2×2 矩阵,分别称作关于 B,A 的约化密度矩阵,即

$$\rho_A=\mathrm{Tr}_B\rho,\ \rho_B=\mathrm{Tr}_A\rho. \quad (10)$$

定义 4 密度矩阵的部分转置(partial transposition),给定形如(8)式的密度矩阵,关于子系统 A 的部分转置为

$$\rho^{T_A}=\sum_{i,j=0}^{1}\sum_{\alpha,\beta=0}^{1}C_{i\alpha,j\beta}|j\alpha\rangle\langle i\beta|; \quad (11)$$

关于子系统 B 的部分转置为

$$\rho^{T_B}=\sum_{i,j=0}^{1}\sum_{\alpha,\beta=0}^{1}C_{i\alpha,j\beta}|i\beta\rangle\langle j\alpha|. \quad (12)$$

要注意到 ρ_A 和 ρ_B 满足所有密度矩阵的条件,即它们确实是 2×2 的密度矩阵,而 ρ^{T_A}和 ρ^{T_B}却不一定满足密度矩阵的正定条件,它们可能不对应真正的密度矩阵.

我们把所有可分离态的集合记作 $\mathscr{S}$,则 $\mathscr{S}\subset\mathscr{T}$,且有下述重要定理[16,17].

定理 1 $\mathscr{S}$是凸的,紧致的.

2.3 Hilbert-Schmidt 空间

定义 5 在实数域上,所有作用于四维 Hilbert 空间 $\mathscr{H}$上的厄密算子构成的线性空间称作 Hilbert-Schmidt 空间(H-S 空间),记作 $\mathscr{L}$. 它是一个 16 维线性空间.

考虑到厄密算子的矩阵表示,有

定义 6 对任意的 A,$B\in\mathscr{L}$,内积

$$< A, B > = \mathrm{Tr}(A^+ B). \tag{13}$$

由此我们定义了空间 $\mathscr{L}$ 的度规[18].

定义 7 对任意的 $A \in \mathscr{L}$,其模长

$$\| A \| = \sqrt{< A, A >} = \sqrt{\mathrm{Tr}(A^2)}. \tag{14}$$

定义 8 对任意的 $A, B \in \mathscr{L}$,其间距离

$$d_{AB} = \| A - B \|. \tag{15}$$

至此,我们建立了 $\mathscr{L}$ 的几何结构,显然,$\mathscr{L}$ 是一个 Hilbert 空间.

为了更为直观的表达,我们为空间 $\mathscr{L}$ 选择一组具体的基向量.

定义 9 空间 $\mathscr{L}$ 的基定义为

$$\{e_i\}_{i=1,\cdots,16} \equiv \left\{\frac{1}{2} I \otimes I, \frac{1}{2}\sigma_j \otimes I, \frac{1}{2} I \otimes \sigma_k, \frac{1}{2}\sigma_m \otimes \sigma_n\right\}_{j,k,m,n=1,2,3}, \tag{16}$$

其中 I 为 2×2 单位阵,σ_i ($i=1,2,3$)为 Pauli 矩阵.

显然有

$$< e_i, e_j > = \delta_{ij}, \tag{17}$$

故上述基向量是正交归一的.

特别地,对于任一密度矩阵,我们有其在 $\mathscr{L}$ 空间中的向量表示.

$$\rho = \frac{1}{4}\left(I \otimes I + \boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{\sigma} \otimes I + I \otimes \boldsymbol{s} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \sum_{m,n=1}^{3} t_{mn}\sigma_m \otimes \sigma_n\right), \tag{18}$$

这里 $\boldsymbol{r}, \boldsymbol{s} \in \mathscr{R}^3$,$t_{mn}$ 为实数,实际上,

$$r_i = \mathrm{Tr}(\rho(\sigma_i \otimes I)), \tag{19a}$$

$$s_i = \mathrm{Tr}(\rho(I \otimes \sigma_i)), \tag{19b}$$

$$t_{mn} = \mathrm{Tr}(\rho(\sigma_m \otimes \sigma_n)). \tag{19c}$$

为简单起见,我们把 9 个 t_{mn} 纳入一个 3×3 的矩阵 $T=(t_{mn})$. 于是,任一密度矩阵可以由 $\boldsymbol{r}, \boldsymbol{s}, T$ 唯一地确定,进一步地,我们注意到

$$\rho_A = \frac{1}{2}(I + \boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{\sigma}), \tag{20a}$$

$$\rho_B = \frac{1}{2}(I + \boldsymbol{s} \cdot \boldsymbol{\sigma}), \tag{20b}$$

即 $\boldsymbol{r}, \boldsymbol{s}$ 与 A, B 的约化密度矩阵一一对应.

(18)式满足了密度矩阵的厄米性及迹为 1 的要求,但正定性却难以从中体现. 另一方面,由 $\mathrm{Tr}(\rho^2) \leqslant 1$,有

$$r^2 + s^2 + \| T \|^2 \leqslant 3, \tag{21}$$

其中 $r^2 = |\boldsymbol{r}|^2, s^2 = |\boldsymbol{s}|^2, \| T \|^2 \equiv \mathrm{Tr}(T^{\mathrm{T}} T)$. 从(20)式又可得到

$$r^2 \leqslant 1, s^2 \leqslant 1, \tag{22}$$

(21)至(22)式可视作对 $\boldsymbol{r}, \boldsymbol{s}, T$ 的限制条件,亦是密度矩阵正定性的必要条件. 于是,$\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{s}$ 所表征的两个三维空间中的区域分别相当于孤立地描述两个子系统时的 Bloch 球,而矩阵 T 所在的一个九维空间中则蕴含了子系统间的关联(经典的或量子的).

三 可分离态的性质及不可分离态的判据

首先综述一些可分离态的固有性质,即 1)满足 Bell 不等式,2)满足熵不等式,3)满足部分时间反演变换. 对这些性质的违反就构成了不可分离态的判据.

3.1 Bell 不等式

作为区分定域性与非定域性的最早的判据,Bell 不等式也与系统的可分离性密切相关,我们引用 Clauser 等提出的 Bell 不等式[19].

$$| E(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) - E(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}') | + E(\boldsymbol{a}', \boldsymbol{b}) + E(\boldsymbol{a}', \boldsymbol{b}') \leqslant 2, \tag{23}$$

其中 $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{a}'$ 为三维空间中的单位向量,表示在该方向上对粒子 A 作自旋测量;$\boldsymbol{b}$ 和 $\boldsymbol{b}'$ 则是对粒子 B 而言,$E(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b})$ 为关联函数,其意义为分别对 A, B 两粒子在 $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ 方向上作自旋测量,将结果相同的概率减去结果相反的概率. Gisin 证明了下面的结论[20].

定理 2 仅有的满足 Bell 不等式的纯态是直积态,即可分离态.

这说明在纯态情形 Bell 不等式足够用来判定态的可分离性,至于混合态,考虑到可分离态的表述形式(7)式,其每一个组成部分 $P_i \otimes Q_i$ 均为直积态,应满足 Bell 不等式,则其凸和亦当如此,于是有

定理 3 所有的可分离态均满足 Bell 不等式.

该定理的逆命题并不总是成立,即存在这样的混合态,它们满足 Bell 不等式但不可分离,Werner 态就是一个明显的例证[9,21]. 利用密度矩阵的向量表示(18)式,可以得到任一给定的量子态满足 Bell 不等式的充要条件[22].

定理 4 设密度矩阵 ρ 具有向量表示(18)式,构造矩阵 $U = T^{\mathrm{T}} T$,设 U 的两个较大的本征值为 u 和 $\tilde{u}$,令 $M = u + \tilde{u}$. 则当且仅当 $M \leqslant 1$,ρ 满足 Bell 不等式.

这里我们看到了密度矩阵的向量表示的第一个较有价值的应用.

3.2 熵不等式

首先考虑经典情形，对于一个具有离散随变量 X 的经典系统，Shannon 定义了其熵函数 S_{cla}[23]

$$S_{cla}(X) = -\sum_x p(x)\ln p(x), \tag{24}$$

其中 x 为 X 的取值，x 是离散的.

再考虑包含两个随机变量 X, Y 的经典系统，其联合概率分布由 $p(x, y)$ 给出，相应地有 Shannon 熵

$$S_{cla}(X, Y) = -\sum_x p(x, y)\ln p(x, y). \tag{25}$$

X, Y 的独立概率分布为

$$p(x) = \sum_y p(x, y), p(y) = \sum_x p(x, y), \tag{26}$$

相应的

$$S_{cla}(X) = -\sum_x p(x)\ln p(x),$$

$$S_{cla}(Y) = -\sum_x p(y)\ln p(y). \tag{27}$$

X, Y 之间的相关信息量为

$$I(X:Y) = \sum_{x,y} p(x, y)\ln\frac{p(x, y)}{p(x)p(y)} = S_{cla}(X) - S_{cla}(X \mid Y), \tag{28}$$

其中 $S_{cla}(X|Y)$ 为经典条件熵，显然

$$S_{cla}(X \mid Y) = S_{cla}(X, Y) - S_{cla}(Y) \geqslant 0, \tag{29}$$

类似地

$$S_{cla}(Y \mid X) = S_{cla}(X, Y) - S_{cla}(X) \geqslant 0. \tag{30}$$

把上述过程推广到量子情形，对于一个密度矩阵为 ρ 的量子态 von Neumann 定义了其量子熵函数 $S(\rho)$[24]

$$S(\rho) = -\mathrm{Tr}(\rho\ln\rho). \tag{31}$$

von Neumann 熵函数的一个直接推广是量子Renyiα 熵函数[25].

$$S_\alpha(\rho) = \frac{1}{1-\alpha}\ln \mathrm{Tr}\rho^\alpha, \alpha > 1. \tag{32}$$

注意到当 α 递减地趋于 1 时，$S_\alpha(\rho)$ 回到 $S(\rho)$. 对于 2×2 量子系统，我们除了有(32)式的关于整个系统的熵函数以外，还有关于子系统 A, B 的熵函数，它们由 ρ_A, ρ_B 得到，即

$$S_\alpha(\rho_A) = \frac{1}{1-\alpha}\ln \mathrm{Tr}\rho_A^\alpha,$$

$$S_\alpha(\rho_B) = \frac{1}{1-\alpha}\ln \mathrm{Tr}\rho_B^\alpha. \tag{33}$$

若整个系统是可分离的，则子系统间关联为经典关联，其信息量间的关联应具有与(29)或(30)式类似的特征，有[15]

定理 5 对于任何可分离态 ρ，下面的 α 熵不等式成立.

$$S_\alpha(\rho) \geqslant \max_{i=A,B} S_\alpha(\rho_i), \quad (\alpha = 1, 2). \tag{34}$$

当 $\alpha = 2$ 时，2-熵函数

$$S_2(\rho) = -\ln \mathrm{Tr}\rho^2. \tag{35}$$

利用(18)和(20)式，有

$$\mathrm{Tr}\rho^2 = \frac{1}{4}(1 + r^2 + s^2 + \| T \|^2), \tag{36}$$

$$\mathrm{Tr}\rho_A^2 = \frac{1}{2}(1 + r^2), \quad \mathrm{Tr}\rho_B^2 = \frac{1}{2}(1 + s^2). \tag{37}$$

于是，(34)式在 $\alpha = 2$ 时等价于

$$\| T \|^2 \leqslant 1 - | r^2 - s^2 |. \tag{38}$$

于是我们看到 2-熵不等式在几何图像中有着简洁的表示. Bell 不等式和 2-熵不等式都是量子态可分离性的必要条件，但两者相比，后者更强，下面的定理说明了这一点[26].

定理 6 给定任意一个2×2量子系统的量子态，如果 2-熵不等式成立，则 Bell 不等式亦成立.

2-熵函数中涉及到密度矩阵的平方，于是我们再引入一个与此有关的定理[27].

定理 7 对2×2量子系统的量子态 ρ 和 2×3 量子系统的量子态 ρ'，若它们分别满足

$$\mathrm{Tr}(\rho^2) \leqslant \frac{1}{3}, \mathrm{Tr}(\rho'^2) \leqslant \frac{1}{5}, \tag{39}$$

那么该量子态是可分离态.

注意到定理 7 叙述的是可分离态的充分条件.

3.3 部分时间反演变换

Peres[28]和 Horodecki[16] 提出了量子态可分离性的重要结论.

定理 8 对于 2×2 或 2×3 的量子系统，某一给定的量子态是可分离的，当且仅当 $\rho^{T_A}\geqslant0$(或 $\rho^{T_B}\geqslant0$)，即密度矩阵经部分转置后仍为正定.

该定理指出了某些特定的量子系统可分离性的充要条件，但是对于更复杂的系统(例如 3×3，2×4)并不成立[16,17]. 对 2×2 系统，其密度矩阵经部分转置后的形式可以表示为

$$\rho^{T_B} = \frac{1}{4}(I\otimes I + \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\sigma}\otimes I$$

$$+ s_1 I \otimes \sigma_1 - s_2 I \otimes \sigma_2 + s_3 I \otimes \sigma_3$$
$$+ t_{11}\sigma_1 \otimes \sigma_1 - t_{12}\sigma_1 \otimes \sigma_2 + t_{13}\sigma_1 \otimes \sigma_3$$
$$+ t_{21}\sigma_2 \otimes \sigma_1 - t_{22}\sigma_2 \otimes \sigma_2 + t_{23}\sigma_2 \otimes \sigma_3$$
$$+ t_{31}\sigma_3 \otimes \sigma_1 - t_{32}\sigma_3 \otimes \sigma_2 + t_{33}\sigma_3 \otimes \sigma_3. \quad (40)$$

可以有两种不同的方式理解从 ρ 到 ρ^{T_B} 的形式上的变换：1）向量表示中系数的改变，即 $s_2 \to -s_2$，$t_{m2} \to -t_{m2}$（$m=1,2,3$）；2）基的改变，即将子系统 B 的 Pauli 矩阵 σ_2 变为 $-\sigma_2$，其余不变. 显然第二种理解方式更为简洁，而且，这种基的改变相当于对子系统 B 的 Pauli 矩阵求复共轭，实际上

$$\sigma_1^* = \sigma_1, \sigma_2^* = \sigma_2, \sigma_3^* = \sigma_3. \quad (41)$$

于是，ρ 部分转置相当于对其向量表达式（18）求部分复共轭（注意到向量表示中的系数均为实数，求复共轭运算不会使之改变）. 另一方面，时间反演变换中包含求复共轭的操作，对于单个自旋 1/2 粒子，某一量子态 $|\psi\rangle$ 经时间反演算子

$$\Theta = -\mathrm{i}\sigma_2 K \quad (K\text{ 为求复共轭操作}) \quad (42)$$

作用后变为

$$|\tilde{\psi}\rangle = -\mathrm{i}\sigma_2 |\psi\rangle^*. \quad (43)$$

对于单自旋的混合态，其密度矩阵 ρ_1 经时间反演变换后，有

$$\tilde{\rho}_1 = (-\mathrm{i}\sigma_2)\rho_1^*(\mathrm{i}\sigma_2) = \sigma_2\rho_1^*\sigma_2. \quad (44)$$

于是对于 2×2 两体系统，我们定义下面的部分时间反演算子

$$T = I \otimes \Theta. \quad (45)$$

将该算子作用于 ρ 的向量表示（18），有

$$\rho \xrightarrow{T = I\otimes\Theta} \tilde{\rho} = \frac{1}{4}\Big(I\otimes I + \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\sigma}\otimes I - I\otimes\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{\sigma} - \sum_{m,n=1}^{3} t_{mn}\sigma_m\otimes\sigma_n\Big). \quad (46)$$

虽然 ρ^{T_B} 与 $\tilde{\rho}$ 形式不同，但是它们之间可以通过一个局部酉变换 $U = I\otimes\sigma_2$ 联系起来，即

$$\tilde{\rho} = U\rho^{T_B}U^+. \quad (47)$$

而局部酉变换对系统的纠缠程度没有任何改变[12]，所以在这一意义上，部分转置与部分时间反演变换是等价的.

所谓可分离态满足部分时间反演变换，并不是说该量子态经部分时间反演变换后保持不变，而是指经变换后的态仍是一个具有物理意义的真实的量子态（其密度矩阵保持正定），这也正意味着可分离系统的子系统具有确定的态和确定的性质. 相反地，对于纠缠态，其密度矩阵经部分时间反演变换后负定，将不再是一个真正的密度矩阵，也就不再对应于一个真正的量子态. 另外我们注意到，采用密度矩阵的向量表示这一几何图像使得'部分'变换（例如求部分复共轭，部分转置等）这类操作更易于表达，其结果亦更为直观. 值得注意的是，对于纠缠态，若不采用密度矩阵的向量表示，其部分复共轭运算难以定义，例如对于 Bell 态 $|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle)$，若不写出其形如（18）式的形式，难以想象其经部分复共轭后的形式. 当然有人认为对纠缠态定义部分复共轭运算是没有意义的，这只是指没有物理意义，而在数学上，应是可实现的.

3.4 不可分离性的判据

以上已经得到了一些可分离态的性质定理，这些定理的逆否定理就构成了量子态不可分离性的判据，于是有

定理 9 违反 Bell 不等式的 2×2 的量子态是不可分离的.

定理 10 违反量子2-熵不等式（34）的量子态是不可分离的.

定理 11 对于2×2或 2×3 的量子态，当且仅当其密度矩阵经部分转置后负定，该量子态不可分离.

关于定理 7 的等价说法是：对于不可分离的 2×2 量子态，有 $\mathrm{Tr}(\rho^2) > \frac{1}{3}$，对于不可分离的 2×3 量子态，有 $\mathrm{Tr}(\rho^2) > \frac{1}{5}$. 该说法不能作为纠缠态的判据. 上述定理不能覆盖所有更高维的两体系统，Horodecki 等人提出了对于任意两体量子系统都成立的一般性判据[16]，但就像定义 2 一样，该判据难以由实际上简单易行的操作过程加以描述.

4 可分离态的区域

由定理 1 知，可分离态的集合是紧致的，凸的，故对该集合的研究亦很有意义. 注意到 2×2 任意系统的量子态均可表示为

$$\rho = (1-\varepsilon)\rho_0 + \varepsilon\rho_{\mathrm{a}}, \quad (48)$$

其中 $0\leqslant\varepsilon\leqslant 1$，$\rho_{\mathrm{a}}$ 为任一其他量子态，ρ_0 为最大混合态，即 $\rho_0 = \frac{1}{4}\mathrm{Diag}(1,1,1,1)$.（48）式只是密度矩阵的凸性的一个表示. Braunstein 等人指出[29]，当 $\varepsilon \leqslant 1/9$ 时，不论 ρ_{a} 是否为可分离态，（48）式所表示的所有量子态均是可分离的. 也就是说，在最大可分

离态的某个邻域内所有量子态均可分离，让我们在几何图像中重新考察这一结论.

首先计算(48)式的 ρ 和 ρ_0 之间的距离，由(15)式，有

$$d_{\rho\rho_0} = \| \rho - \rho_0 \| = \frac{\varepsilon}{2}(r_a^2 + s_a^2 + \| T_a \|^2)^{\frac{1}{2}}, \tag{49}$$

其中 r_a, s_a, T_a 为 ρ_a 在向量表示(18)中的系数，考虑到(21)式，当 $\varepsilon \leqslant 1/9$ 时，有

$$d_{\rho\rho_0} \leqslant \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{9} \cdot \sqrt{3} = \frac{1}{6\sqrt{3}}. \tag{50}$$

于是上述邻域可以表示为 $\mathscr{L}$ 空间中的半径为 $\frac{1}{6\sqrt{3}}$ 的超球面，球面内的每一点对应的量子态均可分离. 当然，球面外既存在可分离态，也存在纠缠态.

另一方面，利用定理 7，我们有，若 2×2 量子态 ρ' 可分离，则 $\mathrm{Tr}(\rho'^2) \leqslant \frac{1}{3}$，即

$$\frac{1}{4}(1 + r'^2 + s'^2 + \| T' \|^2) \leqslant \frac{1}{3},$$

其中 r', s', T' 为 ρ' 的向量表示中的系数，显然

$$r'^2 + s'^2 + \| T' \|^2 \leqslant \frac{1}{3}, \tag{51}$$

而 ρ' 与 ρ_0 的距离可表示为

$$d_{\rho'\rho_0} = \| \rho' - \rho_0 \| = \frac{1}{2}(r'^2 + s'^2 + \| T' \|^2)^{\frac{1}{2}}.$$

容易看出

$$d_{\rho'\rho_0} \leqslant \frac{1}{2\sqrt{3}}. \tag{52}$$

于是我们得到的描述邻域的超球面的半径为 $\frac{1}{2\sqrt{3}}$，与(50)式相比，其区域有所扩大，因而由(52)式描述的 ρ_0 的邻域是一个更强的结果. 这意味着我们选择的几何空间及其度规可以更恰当地描述可分离态的区域，而且 H-S 空间实的及线性的特点使得有关纠缠的定量讨论及 $\mathscr{S}$ 在 $\mathscr{L}$ 中的形状研究更为简洁且具直观性.

5 讨　　论

本文给出了密度矩阵的向量表示形式及相应的几何图像，这一图像有助于更直观地考察量子态的纠缠特性. 量子纠缠态的定性判据在这一图像中有着简洁直观的描述，尽管如此，对于复杂的多体量子系统的混合态的研究仍是相当困难的问题. 至于量子纠缠的定量描述，目前对于 2×2 量子系统有形式纠缠度(entanglement of formation)[12]，纠缠提纯度(entanglement of distillation)[12]，相对熵测度(the relative entropy of entanglement)[18]，纠缠辅助度(entanglement of assistance)[30] 和纠缠强度(robustness of entanglement)[31] 等定量测度，这些测度之间差别与联系尚不清楚，迄今也无法统一这些概念，例如对如下形式的 Werner 态

$$\rho_W = \frac{1}{2}\rho_0 + \frac{1}{2}|\Psi^-\rangle\langle\Psi^-|, \tag{53}$$

其形式纠缠态为 $0.117\ln2$[12]，而其相对熵测度为 $0.04\ln2$[32]. 本文定义了 Hilbert-Schmidt 空间 $\mathscr{L}$，其度规由(14)式和(15)式给出，可称作 H-S 度规. 我们以此计算了(53)式的纠缠度，得到的结果亦不同于上述二者，其间的异同有待于进一步研究.

[1] B. d'Espagnat, Conceptual Foundation of Quantum Mechanics (W. A. Benjamin, Inc. 1976).

[2] J. S. Bell, *Physics*, **1** (1964), 195; J. S. Bell, Speakable and Unspeakable in Quantum Mechanics (Cambridge U. P. Cambridge, 1987).

[3] N. D. Mermin, *Am. J. Phys.*, **49** (1981), 940; *Phys. Today*, April (1985), 38.

[4] A. Aspect, P. Grangier, G. Roger, *Phys. Rev. Lett.*, **47** (1981), 460; *ibid.*, **49** (1982), 91.

[5] Y. H. Shih, C. O. Alley, *Phys. Rev. Lett.*, **61** (1987), 2921; P. G. Kwiat, K. Mattle, H. Weinfurter, A. Zeilinger, A. V. Sergienko, Y. H. Shih, *Phys. Rev. Lett.*, **75** (1995), 4337.

[6] D. M. Greenberger, M. A. Horne, A. Zeilinger, Bell's Theorem, Quantum Theory, and Conceptions of the Universe, edited by M. Kafatos (Kluwer Academics, Dordrecht, The Netherlands, 1989), p. 73.

[7] N. D. Mermin, *Am. J. Phys.*, **58** (1990), 731; *Phys. Today*, June (1990), 9.

[8] J. W. Pan, D. Bouwmeester, M. Daniell, H. Weinfurter, A. Zeilinger, *Nature* (to be published).

[9] R. F. Werner, *Phys. Rev.*, **A40** (1989), 4277.

[10] C. H. Bennett, S. J. Wiesner, *Phys. Rev. Lett.*, **69** (1992), 2881.

[11] C. H. Bennett, G. Brassard, C. Crepeau, R. Jozsa, A. Peres, W. K. Wootters, *Phys. Rev. Lett.*, **70** (1993), 1895.

[12] C. H. Bennett, D. P. DiVincenzo, J. Smolin, W. K. Wootters, *Phys. Rev.*, **A54** (1996), 3824.

[13] D. Bouwmeaster, J. W. Pan, K. Mattle, M. Elbl, H. Weinfurter, A. Zeilinger, *Nature*, **390** (1997), 575.

[14] E. Biham, B. Huttner, T. Mor, *Phys. Rev.*, **A54** (1996), 2651.

[15] R. Horodecki, M. Horodecki, *Phys. Rev.*, **A54** (1996), 1838.

[16] M. Horodecki, P. Horodecki, R. Horodecki, *Phys. Lett.*, **A223** (1996), 1.

[17] P. Horodecki, *Phys. Lett.*, **A323** (1997), 333.

[18] V. Vedral, M. B. Plenio, *Phys. Rev.*, **A57** (1998), 1619.
[19] J. E. Clauser, M. A. Horne, A. Shimony, R. A. Holt, *Phys. Rev. Lett.*, **23** (1969), 880.
[20] N. Gisin, *Phys. Lett.*, **A154** (1991), 201.
[21] S. Popescu, *Phys. Rev. Lett.* **72** (1994), 797.
[22] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, *Phys. Lett.*, **A200** (1995), 340.
[23] C. E. Shannon, *Bell Syst. Tech. J.*, **27** (1948), 379; **27** (1948), 623.
[24] J. von Neumann, Mathematical Foundations of Quantum Mechanics (Princeton University Press, Princeton, NJ, 1955).
[25] A. Wehrl, *Rep. Mat. Phys.*, **10** (1976), 159.
[26] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, *Phys. Lett.*, **A210** (1996), 377.
[27] K. Zyczkowski, P. Horodecki, A. Sanpera, M. Lewenstein, *Phys. Rev.*, **A58** (1998), 883.
[28] A. Peres, *Phys. Rev. Lett.*, **77** (1996), 1413.
[29] S. L. Braunstein, C. M. Caves, R. Jozsa, N. Linden, S. Popescu, R. Schack, e-print quant-ph/9811018.
[30] D. P. DiVincenzo, C. A. Fuchs, H. Mabuchi, J. A. Somlin, A. Thapliyal, and A. Uhlmann, e-print quant-ph/9803033.
[31] G. Vidal, R. Tarrach, *Phys. Rev.*, **A59** (1999), 141.
[32] V. Vedral, M. B. Plenio, M. A. Rippin, P. L. Knight, *Phys. Rev. Lett.*, **78** (1997), 2275.

THE GEOMETRICAL PICTURE OF MIXED ENTANGLED STATES*

SHI MING-JUN[1)2)] DU JIANG-FENG[1)2)] ZHU DONG-PEI[2)] RUAN TU-NAN[2)]

[1)] (*Open Research Laboratory for Quantum Communication and Quantum Computation, University of Science and Technology of China, Hefei* 230026, *China*)

[2)] (*Department of Modern Physics, University of Science and Technology of China, Hefei* 230027, *China*)

(Received 26 January 2000; revised manuscript received 20 April 2000)

ABSTRACT

The vector representation of density matrix is given in this paper. Any density matrix can be expanded in a real linear Hilbert space. The criteria for inseparability of mixed states can be expressed in the geometrical picture. Such expression is concise and perceptible. The neighborhood of the maximal mixed state is analyzed and a stronger result about the volume measure of the neighborhood is obtained.

Keywords: Entanglement, Mixed States, Hilbert-Schmidt Space

PACC: 0365, 3330, 4230

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 19875050 and 6773052).