第 49 卷 第 5 期 2000 年 5 月
1000-3290/2000/49(05)/0825-05

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol. 49, No. 5, May, 2000

量子纯态的纠缠度*

石名俊[1)2)] 杜江峰[1)2)] 朱栋培[1)]

[1)](中国科学技术大学近代物理系,合肥 230027)

[2)](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)

(1999 年 8 月 9 日收到;1999 年 9 月 30 日收到修改稿)

纠缠态在量子计算和量子通讯中起着重要作用. 考虑了量子纯态在时间反演变换下的行为以及相应的密度矩阵在 Hilbert-Schmidt 空间中的表示,并由此对纠缠度给出较为直观的几何解释.

PACC:0365;3330;4230

1 引 言

1935 年,Einstein,Podolsky 和 Rosen 提出了著名的 EPR 佯谬[1]. 针对这一令人惊异的现象,Schrödinger 指出,描述 EPR 粒子对的态是一种"纠缠态"(entangled state),其中存在纠缠现象(entanglement). EPR 佯谬和纠缠现象涉及量子力学的实在性、定域性、隐变量理论以及测量在量子力学中所起的作用等等一系列根本问题[2].

80 年代,人们提出了量子计算机的理论模型[3],这以后,有关量子计算和量子通讯的理论和实验的研究迅速发展起来[4],而纠缠态在其中起着不可缺少的重要作用[5,6].

纠缠态存在于多粒子系统中,它描述了子系统间的不可分离的特性. 一个典型的例子是由两个自旋 1/2 粒子组成的系统,其自旋单态和自旋三重态均不能简单地表示为两个粒子各自量子态的直积,从而显示出非经典的量子关联. 纠缠现象不但存在于纯态中,而且存在于混合态中. 在量子计算和量子通讯中,后一情形更具有实际意义.

对纠缠程度的定量描述用纠缠度来定义[7],我们在下文给出详细的介绍. 目前关于纠缠度的研究大都基于数学上的讨论[8],本文针对纯态情形给出了纠缠度的较为直观的物理或几何上的解释.

本文介绍了有关纠缠态及纠缠度的一些基本概念和研究进展以及与 Bell 不等式的联系;引入时间反演变换,并考察了纠缠态在这一变换下显出的某些特性;考虑了纠缠态在 Hilbert-Schmidt 空间中的描述,从几何角度出发对纠缠度作了新的定义;讨论了对上述方法作进一步推广的可能性.

2 纠缠态和纠缠度

本文考虑两个自旋 1/2 粒子 A 和 B 组成的系统 Σ. 描述每个子系统 A 或 B 的空间分别为二维 Hilbert 空间 H_A,H_B 它们的基为

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

描述整个系统的四维 Hilbert 空间 $H = H_A \otimes H_B = C^2 \otimes C^2$ 的基为 $|00\rangle$,$|01\rangle$,$|10\rangle$,$|11\rangle$. 这里将 $|i\rangle_A \otimes |j\rangle_B$ $(i,j=0,1)$ 简单地记作 $|ij\rangle$.

2.1 纯态情形

纯态对应于空间 H 中的一个向量. 如果 A,B 两个粒子之间不曾有过相互作用,则它们之间没有量子关联,系统的状态可以表示为下面的直积态

$$|O\rangle = |\psi\rangle_A \otimes |\varphi\rangle_B, \tag{2}$$

$|O\rangle \in H$,$|\psi\rangle_A \in H_A$,$|\varphi\rangle_B \in H_B$. 我们说这样的量子态中没有纠缠现象,它们满足 Bell 不等式,两个子系统之间的关联是经典关联[2].

如果 A,B 两个粒子在某个时刻有过相互作用,那么,在这一时刻以后,即使它们相距任意远的距离,也会表现出一种非经典的量子关联,即 EPR

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

关联.这时,不能用形如(2)式的直积态来描述整个系统[2].一般地,可以在空间 H 中将这样的量子态展开为

$$|Y\rangle = c_0|00\rangle + c_1|01\rangle + c_2|10\rangle + c_3|11\rangle, \tag{3}$$

其中 $c_i(i=0,1,2,3)$ 为复数并满足归一化条件.我们把那些不能表示为子系统态的直积的系统的量子态称为纠缠态.作为一个简单的例子,A,B 两粒子组成的总自旋为零的自旋单态

$$|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle) \tag{3}$$

和总自旋为 1 的自旋三重态

$$|\Psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle), \tag{4}$$

$$|\Phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle), \tag{5}$$

$$|\Phi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle), \tag{6}$$

便是典型的纠缠态.人们也把上述四个态称为 Bell 态.下面我们将会看到,Bell 态是纠缠程度最高的纯态.

为了定量地描述纠缠现象,需要引入纠缠度的概念[7].对于任意一个量子态 $|\Psi\rangle\in H$,可以有相应的密度矩阵

$$\rho(\Psi) = |\Psi\rangle\langle\Psi|. \tag{7}$$

分别对子系统 B,A 求迹,我们分别得到关于 A,B 的约化密度矩阵

$$\rho_A = \mathrm{Tr}_B(|\Psi\rangle\langle\Psi|),\quad \rho_B = \mathrm{Tr}_A(|\Psi\rangle\langle\Psi|),$$

于是,系统的纠缠度被定义为

$$E(\Psi) = S(\rho_A) = S(\rho_B), \tag{8}$$

其中 $S(\rho) = -\mathrm{Tr}(\rho\log_2\rho)$ 为 von Neumann 熵函数[9].容易验证,任意直积态的纠缠度为零,四个 Bell 态的纠缠度为 1,其他形式的纯态的纠缠度介于 0 和 1 之间.

实际上,对于形如(3)式的量子态,

$$E(Y) = -\frac{1+\sqrt{1-\varepsilon}}{2}\log_2\frac{1+\sqrt{1-\varepsilon}}{2} - \frac{1-\sqrt{1-\varepsilon}}{2}\log_2\frac{1-\sqrt{1-\varepsilon}}{2}, \tag{9}$$

其中 $\varepsilon = 4|c_0c_3 - c_1c_2|^2$,并且 $0\leqslant\varepsilon\leqslant 1$.

2.2 混合态情形

系统处于混合态时,其状态不能简单地用一个态矢 $|\rangle$ 来表示,而只能用密度算子 ρ 描述.若系统处于态 $|\Psi_i\rangle$ 的概率为 $p_i(i=1,2,\cdots,N)$,有

$$\rho = \sum_{i=1}^{N} p_i|\Psi_i\rangle\langle\Psi_i|, \tag{10}$$

其中对于所有的 ρ,$p_i\geqslant 0$,$|\Psi_i\rangle\in H$,且 $\sum_{i=1}^{N} p_i = 1$.选择空间 H 的某一组基,容易得到 ρ 的矩阵表示,即密度矩阵.一个给定的组分 $\{p_i,|\Psi_i\rangle\}$ 对应唯一的密度矩阵 ρ,而对于一个给定的密度矩阵 ρ,我们有多种不同的构造方式,即多种不同的 $\{p_i,|\Psi_i\rangle\}$ 选择.当且仅当 ρ 可以写成两个子系统在若干个状态下的密度矩阵的直积的凸和,即

$$\begin{aligned}\rho &= \sum_{j=1} q_j\rho_A^j \otimes \rho_B^j \\ &= \sum_{j=1} q_j(|\psi^j\rangle_{AA}\langle\psi^j|)\otimes(|\varphi^j\rangle_{BB}\langle\varphi^j|),\end{aligned} \tag{11}$$

其中 $q_j\geqslant 0$ 且 $\sum_j q_j = 1$,系统处于非纠缠态,其纠缠度为零.对于一般形式的混和态,其纠缠度可以定义为[7]

$$E(\rho) = \min\sum_i p_iE(\Psi_i). \tag{12}$$

这里,在所有可能的构造方式 $\{p_i,|\Psi_i\rangle\}$ 中求最小,$E(\Psi_i)$ 由(8)式得出.显然,求混合态的纠缠度要比求纯态的纠缠度困难得多.

通过广义量子操作,可以使混合态的纠缠度提高,这在量子计算和量子通讯中有着重要意义[7].

2.3 Bell 不等式

如果要求子系统 A 和 B 都具有 Einstein 所说的定域实在,即满足直觉上易于接收的定域性,那么,Bell[10]指出,这一要求预示了在测量两个子系统自旋关联的实验中存在一个不等式关系,即 Bell 不等式.有关 Bell 不等式的较为形象的描述见诸文献[11].Bell 不等式对测量结果施加的限制条件与量子力学的统计预言是相违背的.于是 Bell 不等式通常被视作定域性的判据,也是用作区分经典行为与量子行为的有效方法.

在纯态情形,哪些态是定域的,哪些态是非定域的,这一问题已经由 Clauser,Horne,Shimony 和 Holt[12]解决,即仅有的违反 Bell 不等式的纯态是直积态,它们也显然是定域的[13].于是,对于纯态情形,系统的 EPR 关联、对 Bell 不等式的违反、不可分离性或非定域性三者之间是相互一致的[14].而在混合态的情形下,定域性与对 Bell 不等式的违反二者

间的关系不是很清楚[15]. Werner[15]构造了一族满足局部稳变量模型的不可分离的混合态. Popescu[16]指出,某些 Werner 态是非定域的,其'隐藏'的非定域性可以通过广义量子操作显现出来. 可见,对于混合态,定域性、不可分离性、Bell 不等式之间关系如何仍然是一个悬而未决的问题[17].

3　时间反演

我们知道,对单个自旋 1/2 粒子作时间反演变换的变换算子为[9]

$$\Theta = -\mathrm{i}\sigma_y K, \tag{13}$$

其中 K 为求复共轭的运算.

对两个自旋 1/2 的粒子 A, B 组成的系统,我们定义其时间反演算子

$$\begin{aligned} T &= \Theta_A \times \Theta_B \\ &= (-\mathrm{i}\sigma_y^A K^A) \otimes (-\mathrm{i}\sigma_y^B K^B) \\ &= -(\sigma_y^A \otimes \sigma_y^B) K \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} K. \end{aligned} \tag{14}$$

这里 K^A, K^B 分别对子系统的波函数 $|\psi\rangle_A \in H_A$, $|\psi\rangle_B \in H_B$ 的复共轭运算,而 K 则是对整个系统的波函数的复共轭运算,即对于任意 $|\Psi\rangle \in H$, $K|\Psi\rangle = |\Psi\rangle^*$.

给定任意的直积态(2)式,总可以将它写作

$$\begin{aligned} |O\rangle &= |\psi\rangle_A \otimes |\varphi\rangle_B \\ &= (a_0|0\rangle + a_1|1\rangle) \otimes (b_0|0\rangle + b_1|1\rangle) \\ &= a_0 b_0|00\rangle + a_0 b_1|01\rangle \\ &\quad + a_1 b_0|10\rangle + a_1 b_1|11\rangle \\ &= (a_0 b_0 \quad a_0 b_1 \quad a_1 b_0 \quad a_1 b_1)^{\mathrm{T}}. \end{aligned} \tag{15}$$

其中 a_0, a_1 和 b_0, b_1 分别满足归一化条件 $|a_0|^2 + |a_1|^2 = 1$, $|b_0|^2 + |b_1|^2 = 1$.

对 $|O\rangle$ 作时间反演变换,有

$$T|O\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 b_0 \\ a_0 b_1 \\ a_1 b_0 \\ a_1 b_1 \end{pmatrix}^* = \begin{pmatrix} a_1^* b_1^* \\ -a_1^* b_0^* \\ -a_0^* b_1^* \\ a_0^* b_0^* \end{pmatrix}. \tag{16}$$

显然, $\langle O|T|O\rangle = 0$. 这表明直积态经时间反演变换后得到的末态与变换前的初态是彼此正交的.

另一方面,对四个 Bell 态作时间反演变换,有

$$T|\Psi^{\pm}\rangle = \mp|\Psi^{\pm}\rangle, \quad T|\Phi^{\pm}\rangle = \pm|\Phi^{\pm}\rangle. \tag{17}$$

除了相因子的差别,Bell 态经时间反演变换后是不变的.

考虑到 Bell 态和直积态是纠缠程度高低的两个极端,对于一般形式的纯态,可以考察空间 H 中的态矢量在时间反演变换前后的改变,并由此给出纠缠程度的定量度量.

对一般形式的量子态(8)式作时间反演变换,有

$$|\widetilde{Y}\rangle = T|Y\rangle = (c_3^* \quad -c_2^* \quad -c_1^* \quad c_0^*)^{\mathrm{T}}. \tag{18}$$

于是,有

$$|\langle Y|\widetilde{Y}\rangle|^2 = 4|c_0 c_3 - c_1 c_2|^2. \tag{19}$$

将(19)式与(9)式比较,有

$$\varepsilon = |\langle Y|\widetilde{Y}\rangle|^2. \tag{20}$$

由此容易得到纯态 $|Y\rangle$ 的纠缠度.

4　Hilbert-Schmidt 空间

对于由两个自旋 1/2 粒子组成的系统,不论是纯态还是混合态,其密度矩阵可以在 Hilbert-Schmidt 空间(H-S 空间)中表示为[18]

$$\rho = \frac{1}{4}\Big(I \otimes I + \boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{\sigma} \otimes I + I \otimes \boldsymbol{s} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \sum_{m,n=1}^{3} t_{mn} \sigma_m \otimes \sigma_n\Big), \tag{21}$$

其中 I 为 2×2 为单位阵, $\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{\sigma} \in R^3$, $t_{mn} = \mathrm{Tr}[\rho(\sigma_m \otimes \sigma_n)]$. 把 9 个系数 t_{mn} 写成一个矩阵,即 $T = (t_{mn})$, $m, n = 1, 2, 3$.

这样, ρ 可被视作 16 维 H-S 空间 L 中的一个向量. 该空间由下面 16 个基向量张成

$$\begin{aligned} &\{e_i, i = 1, 2, \cdots, 16\} \\ &= \Big\{\frac{1}{2} I \otimes I, \frac{1}{2}\sigma_i \otimes I, \frac{1}{2} I \otimes \sigma_i, \frac{1}{2}\sigma_m \otimes \sigma_n. \\ &\quad i, m, n = 1, 2, 3\Big\}, \end{aligned} \tag{22}$$

基之间的正交性由 $\mathrm{Tr}(e_i e_j) = \delta_{ij}$ 确定. ρ 的行为可以由 $\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{s}$, T 来描述.

我们可以把空间 L 分成四个子空间:由 $\frac{1}{2} I \otimes I$ 张成的平庸的一维子空间 L_1,由 $\Big\{\frac{1}{2}\sigma_i \otimes I, i = 1, 2,$

$3\}$ 张成的三维子空间 L_2，由 $\left\{\frac{1}{2} I\otimes\sigma_i, i=1,2,3\right\}$ 张成的三维子空间 L_3，由 $\left\{\frac{1}{2}\sigma_m\otimes\sigma_n, m, n=1,2,3\right\}$ 张成的九维子空间 L_4.

我们定义 ρ 在子空间 L_1, L_2, L_3, L_4 中的模长分别为

$$d_1=\frac{1}{2},\ d_2=\frac{1}{2}|\boldsymbol{r}|,\ d_3=\frac{1}{2}|\boldsymbol{s}|,$$

$$d_4=\frac{1}{2}\left(\sum_{m,n=1}^{3} t_{mn}^2\right)^{1/2}. \tag{23}$$

于是 ρ 在空间 L 中的模长为

$$D=\left(d_1^2+d_2^2+d_3^2+d_4^2\right)^{1/2}. \tag{24}$$

对于任意给定的纯态(3)式，可以在 H-S 空间 L 中写出形如(21)式的密度矩阵 $\rho(Y)$. 于是我们发现，对于空间 H 中的任意纯态，其密度矩阵在空间 L 中分布在一个半径为 1 的超球面上，即 $D=1$. 更进一步地，有

$$d_1^2=\frac{1}{4}, d_2^2=d_3^2=\frac{1}{4}(1-\varepsilon), d_4^2=\frac{1}{4}(1+2\varepsilon). \tag{25}$$

其中 ε 与(9)式中的一致. 对于直积态，$\varepsilon=0$，$d_1=d_2=d_3=d_4=1/2$，对于四个 Bell 态，$\varepsilon=1$，$d_1=1/2$，$d_2=d_3=0$，$d_4=\sqrt{3}/2$.

现在可以看出，在纯态情形，随着纠缠度的增大，ρ 在子空间 L_2, L_3 中的模长减小，同时在子空间 L_4 中的模长增大. 且模长的变化与纠缠度有着确定的联系. 于是，纠缠度与空间 L 的一些几何性质联系在一起.

5 讨 论

我们已经把纯态的纠缠性与时间反演及 H-S 空间联系起来，并对之作了较为直观的解释. 对于混合态，其密度矩阵在 H-S 空间中的模长小于 1，在四个子空间中的分布也显出较为复杂的现象. 对(21)式作时间反演变换，其结果为

$$\tilde{\rho}=\frac{1}{4}\left(I\otimes I-\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\sigma}\otimes I-I\otimes\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{\sigma}+\sum_{m,n=1}^{3} t_{mn}\sigma_m\otimes\sigma_n\right). \tag{26}$$

结合以上的讨论，(26)式表明，子空间 L_2, L_3 与系统的非纠缠性有关，而子空间 L_4 则表明了系统的纠缠性. 我们希望对于混合态的纠缠度也给出直观的几何解释.

[1] A. Einstein, B. Podolsky, N. Rosen, *Phys. Rev.*, **47** (1935), 777.

[2] B. d'Espagnat, Conceptual Foundation of Quantum Mechanics (W. A. Benjamin, Inc. 1976); D. Bohm, Quantum Theory (Prentice-Hall, Englewood, Cliffs, NJ, 1951); R. Penrose, The Emperor's New Mind (Oxford Univ. Press, 1989).

[3] R. P. Feynmann, *Int. J. Theoret. Phys.*, **21** (1982), 467; D. Deustch, *Proc. R. Soc. Lond.*, **A400** (1985), 97.

[4] D. Deustch, R. Jozsa, *Proc. R. Soc. Lond.*, **A439** (1992), 553; S. Lloyd, *Science*, **261** (1993), 1569; A. Ekert, R. Jozsa, *Rev. Mod. Phys.*, **68** (1996), 733.

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

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

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

[8] V. Vedral, M. B. Plenio, *Phys. Rev.*, **A57** (1998), 1619.

[9] J. J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics, San Fu Tuan, ed. (Benjiamin/Cummings, Menlo Park, CA, 1985).

[10] J. S. Bell, *Physics*, **1** (1964), 195.

[11] E. P. Wigner, *Am. J. Phys.*, **38** (1970), 1005.

[12] J. F. Clauser, M. A. Horne, A. Shimony, R. A. Holt, *Phys. Rev. Lett.*, **23** (1969), 880.

[13] N. Gisin, *Phys. Lett.*, **A154** (1991), 201; N. Gisin, A. Peres, *Phys. Lett.*, **A162** (1992), 15.

[14] R. Horodecki, *Phys. Lett.*, **A210** (1996), 223.

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

[16] S. Popescu, *Phys. Rev. Lett.*, **74** (1995), 2619.

[17] N. Gisin, *Phys. Lett.*, **A210** (1996), 151.

[18] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, *Phys. Lett.*, **A210** (1996), 377.

ENTANGEMENT OF QUANTUM PURE STATES

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

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

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

(Received 9 August 1999; revised manuscript received 30 September 1999)

ABSTRACT

Entangled state and entanglement have important action in quantum computation and quantum communication. In this paper, we consider the quantum pure state, show its properties when time reversal transformation is used, and study the representation of corresponding density matrix in Hilbert-Schmidt space. Finally we give a geometrical interpretation for entanglement.

PACC: 0365; 3330; 4230

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 19875050 and No. 6773052).