第41卷 第4期　　物 理 学 报　　Vol. 41, No. 4
1992年4月　　ACTA PHYSICA SINICA　　Apr., 1992

量子混合态的统计角

朱栋培　王仁川[1)]　王桂星
中国科学技术大学近代物理系，合肥，230026

1991年4月17日收到

本文把关于量子纯态之间的统计角概念推广到量子混合态，并提出了单个混合态的发散角这一概念，导出了纯态判据．用到测量上，响应函数不过是量子系统与仪器之间的统计角余弦的平方，而测量过程中的熵增加则显现为混合态发散角的扩大．

PACC: 0365

一、引　言

量子世界里充满着新奇．这种新奇性与量子事件的或然性紧密相关，而这或然性(几率)又不直接进入基本运动规律．在量子力学里，我们用几率振幅(波函数)来描写状态的变化．这种间接的表述方式又更使量子世界扑朔迷离．为了使量子行为更易被理解和接受，人们期望能象相对论那样，从一条简单的原理导出量子论[1]．1981年，Wootters[2]在这个方向上迈出了有启发性的一步．他从与量子力学完全独立的一个领域——概率论出发，通过引入可区分性这一概念而导出了量子论的一些标准特性．

与几率紧密相联系的是涨落．如果两个事件的几率之差大于它们的涨落之和，则称这两个几率是可区分的．在此基础上，Wootters 定义了两个几率 p_1 和 p_2 之间的统计距离，这里称之为统计角，并用 θ 表示

$$\theta(p_1,p_2)=\lim_{n\to\infty}\frac{1}{\sqrt{n}}[n\text{ 次试验中，}p_1\text{ 和 }p_2\text{ 之间彼此可区分的中间几率的最大个数}].\tag{1}$$

对于只有两种输出的几率过程而言，这角可以算出为

$$\theta(p_1,p_2)=\cos^{-1}(\sqrt{p_1}\sqrt{p_2}+\sqrt{1-p_1}\sqrt{1-p_2}),\tag{2}$$

或用统计角余弦表示

$$\cos\theta(p_1,p_2)=\sqrt{p_1}\sqrt{p_2}+\sqrt{1-p_1}\sqrt{1-p_2}.\tag{3}$$

这个结果很容易推广到有 N 种输出的几率事件．

$$\theta(p^{(1)},p^{(2)})=\cos^{-1}\left(\sum_{i=1}^{N}\sqrt{p_i^{(1)}}\sqrt{p_i^{(2)}}\right).\tag{4}$$

N 可以达到无穷．

---

1) 中国科学技术大学天体物理中心．

把上面的思想应用到量子事件上，那么可以定义两个量子纯态之间的统计角，它是两个纯态间可区分的中间态的最大数．对于一个量子态，用一定的仪器 A 作测量，则会给出一组几率分布，于是可以定义两个纯态 $\psi^{(1)}$，$\psi^{(2)}$ 对于仪器 A 给出的两套分布之间的统计角．由量子力学基本解释，处在状态 $\psi^{(\alpha)}$ 中的系统在用仪器测量力学性质 A 时，进入 A 的本征态 ϕ_i 中的几率为 $|\langle\psi^{(\alpha)}|\phi_i\rangle|^2$，于是可以求得对应于仪器 A，两态 $\psi^{(1)}$ 和 $\psi^{(2)}$ 之间的统计角为

$$\theta_A(\psi^{(1)},\psi^{(2)}) = \cos^{-1}\left[\sum_{i=1}^{N}|\langle\psi^{(1)}|\phi_i\rangle||\langle\psi^{(2)}|\phi_i\rangle|\right]. \tag{5}$$

而两态 $\psi^{(1)}$ 和 $\psi^{(2)}$ 之间的统计角则定义为这些角里的最大值，那么有

$$\theta(\psi^{(1)},\psi^{(2)}) = \cos^{-1}|\langle\psi^{(1)}|\psi^{(2)}\rangle|, \tag{6}$$

或

$$\cos\theta(\psi^{(1)},\psi^{(2)}) = |\langle\psi^{(1)}|\psi^{(2)}\rangle|. \tag{7}$$

这个角正是 Hilbert 空间中两个归一的态矢 $\psi^{(1)}$ 和 $\psi^{(2)}$ 之间的夹角，它是 Hilbert 空间中唯一的幺正变换下不变的度规．几率空间的可区分性与 Hilbert 空间的几何紧密相联系．

Wootters 的工作很富于启发性，但他只局限于讨论纯态．在量子论里，还有大量的实际的态是混合态．本文将统计角的概念推广到混合态上．由于混合态不能用 Hilbert 空间中的一根态矢表示，故可计算一个混合态本身的统计角，这就是第三节中引入的态发散角概念，由此导出一个纯态判据（发散角为零）．接着利用这个统计角概念来讨论测量过程，发现熵增加的过程也就是发散角扩大的几何过程．我们导出测量结果或响应函数与统计角的关系，从而把光子极化测量的模式推广到一切测量过程，赋予测量以直观的几何意义．

二、混合态之间的统计角

在量子论里，混合态可以用密度矩阵完全描述[3]．设一量子系统，在不同的备样中，处于两个不同的混合态，分别用密度矩阵 $\rho^{(1)}$ 和 $\rho^{(2)}$ 描述．如何区分它们？和对纯态的处理一样，先对固定的分析工具定义两者的统计角，然后取不同仪器下的最大者作为区别它们的量度．

设有分析仪器 A，其本征态为 $\phi_1,\phi_2,\cdots,\phi_N$，（$N$ 可达无穷），则用 A 对 $\rho^{(1)},\rho^{(2)}$ 两态测量时得它们处于态 ϕ_i 中的几率分别为

$$\begin{aligned} p_{Ai}^{(1)} &= \mathrm{Tr}(\rho^{(1)}\rho_{\phi_i}), \\ p_{Ai}^{(2)} &= \mathrm{Tr}(\rho^{(2)}\rho_{\phi_i}), \end{aligned} \tag{8}$$

其中

$$\rho_{\phi_i} = |\phi_i\rangle\langle\phi_i| \quad i = 1,2,\cdots N$$

为纯态 $|\phi_i\rangle$ 的投影算子或密度矩阵．这样，根据前面关于两概率事件之间统计角的公式有

$$\cos\theta_A(\rho^{(1)},\rho^{(2)}) = \sum_{i=1}^{N} \sqrt{p_{Ai}^{(1)}}\sqrt{p_{Ai}^{(2)}}$$
$$= \sum_i \sqrt{\mathrm{Tr}(\rho^{(1)}\rho_{\phi_i})}\sqrt{\mathrm{Tr}(\rho^{(2)}\rho_{\phi_i})}. \tag{9}$$

为求 θ 的最大值，只需求 $\cos\theta$ 的最小值. 不妨取一表象，其中 $\rho^{(1)}$ 已对角化，并取 ϕ_i 即为 $\rho^{(1)}$ 的本征态. 此时上式变为

$$\cos\theta_A(\rho^{(1)},\rho^{(2)}) = \sum_i \sqrt{\rho_i^{(1)}\rho_{ii}^{(2)}}$$
$$\geqslant \sqrt{\sum_i \rho_i^{(1)}\rho_{ii}^{(2)}} = \sqrt{\mathrm{Tr}(\rho^{(1)}\rho^{(2)})}. \tag{10}$$

上式中等号在两态中有一个为纯态时成立，而最后一式为最小值，且与表象无关，因此可以定义两个混合态 $\rho^{(1)}$, $\rho^{(2)}$ 之间的统计角如下：

$$\theta(\rho^{(1)},\rho^{(2)}) = \cos^{-1}\sqrt{\mathrm{Tr}(\rho^{(1)}\rho^{(2)})}. \tag{11}$$

如果 $\rho^{(1)}$, $\rho^{(2)}$ 分别为量子纯态时，则它们为投影算子

$$\rho^{(1)} = |\psi^{(1)}\rangle\langle\psi^{(1)}|,$$
$$\rho^{(2)} = |\psi^{(2)}\rangle\langle\psi^{(2)}|,$$

那么 (11) 式就给出纯态之间的统计角.

(11) 式也是在幺正变换下不变的. 特别是在时间演化中，$\rho^{(1)}$, $\rho^{(2)}$ 分别遵循方程

$$i\hbar\partial_t\rho^{(1)} = -[\rho^{(1)},H],$$
$$i\hbar\partial_t\rho^{(2)} = -[\rho^{(2)},H],$$

则可证

$$i\hbar\partial_t\mathrm{Tr}(\rho^{(1)}\rho^{(2)}) = -\mathrm{Tr}([\rho^{(1)}\rho^{(2)},H]) = 0, \tag{12}$$

即 $\rho^{(1)}$ 和 $\rho^{(2)}$ 之间的统计角是个时间不变量.

三、量子态的发散角

如果前一节中的 $\rho^{(1)}$, $\rho^{(2)}$ 为同一个态 ρ，则得到态“自己与自己”的角距

$$\theta(\rho) = \cos^{-1}\sqrt{\mathrm{Tr}\rho^2}. \tag{13}$$

对于纯态而言，由于 $\mathrm{Tr}\rho^2 = 1$，故 $\theta = 0$. 这相当于纯态对应于 Hilbert 空间的一根态矢. 对于混合态，由于 $\mathrm{Tr}\rho^2 < 1$，故有 $\theta(\rho) > 0$. 这与混合态不对应于 Hilbert 空间中的一根态矢是一致的. 因此，上面的 $\theta(\rho)$ 表征了混合态偏离纯态的程度，我们称它为量子态的发散角. 由此得出一个发散角的不等式

$$\theta(\rho) \geqslant 0, \tag{14}$$

其中等号在纯态时成立. 这是一个纯态-混合态判据，富有直观的几何意义. $\theta(\rho) > 0$ 意味着态为混合态，由一簇态矢混合而成，$\theta(\rho)$ 则表征了这簇态矢的张角.

如果系统有 N 个独立态，则最大混合态为各态有相同几率

$$p_1 = p_2 = \cdots = p_N = 1/N,$$

于是可算得此态的发散角

$$\theta_{\max}=\cos^{-1}\sqrt{\sum_{i=1}^{N}(1/N)^2}=\cos^{-1}(1/\sqrt{N}),\tag{15}$$

或反过来

$$N=1/\cos^2\theta_{\max}.$$

这关系给N自由度量子混合态的最大发散角以一个限制．例如两态系统（如自旋 1/2 的粒子），$N=2$，其最大发散角为 $\theta_{\max}=45°$.

既然一个混合态有一定的发散角，那么两个混合态之间的角距离就会有一定的限制．事实上，由 Cauchy-Schwarz 不等式，

$$\begin{aligned}\cos^2\theta(\rho^{(1)},\rho^{(2)})&=\mathrm{Tr}(\rho^{(1)}\rho^{(2)})\\&=\left|\sum_{nm}\rho^{(1)}_{mn}\rho^{(2)}_{nm}\right|\\&\leqslant\sqrt{\sum_{mn}|\rho^{(1)}_{mn}|^2}\sqrt{\sum_{ke}|\rho^{(2)}_{ke}|^2}\\&=\cos\theta(\rho^{(1)})\cos\theta(\rho^{(2)}),\end{aligned}\tag{16}$$

所以

$$\cos\theta(\rho^{(1)},\rho^{(2)})\leqslant\sqrt{\cos\theta(\rho^{(1)})}\sqrt{\cos\theta(\rho^{(2)})},$$

或

$$\theta(\rho^{(1)},\rho^{(2)})\geqslant\cos^{-1}(\sqrt{\cos\theta(\rho^{(1)})}\sqrt{\cos\theta(\rho^{(2)})}).\tag{17}$$

显然，等式只在 $\rho^{(1)}=\rho^{(2)}$ 下成立.

从 (16) 式还可以得出一个更方便的下限，即

$$\begin{aligned}\cos 2\theta(\rho^{(1)},\rho^{(2)})&\leqslant 2\cos\theta(\rho^{(1)})\cos\theta(\rho^{(2)})-1\\&\leqslant\cos[\theta(\rho^{(1)})+\theta(\rho^{(2)})],\end{aligned}$$

或者

$$\theta(\rho^{(1)},\rho^{(2)})\geqslant\frac{1}{2}[\theta(\rho^{(1)})+\theta(\rho^{(2)})].\tag{18}$$

四、统计角与测量

1. 测量为统计角发散过程

量子理论中的测量过程一般是个不可逆过程，它会把一个纯态转化为一个混合态．可以用一些量例如熵来定量表述这一点：在测量过程中熵增加.

统计角也可以被用来表征测量这一不可逆特性，在测量过程中状态的发散角扩大.

设原来有一个纯态 $|\phi\rangle$，其发散角为零，用仪器 A（正交的本征态为 $|\phi_i\rangle, i=1,2,\cdots,N$）对其作测量，结果得到系统处于 $|\phi_i\rangle$ 态中的几率为 $|\langle\phi_i|\phi\rangle|^2$，于是测量后相应的状态用密度矩阵 ρ 描述

$$\rho=\sum_i|\langle\phi_i|\phi\rangle|^2|\phi_i\rangle\langle\phi_i|.\tag{19}$$

这一状态的发散角为

$$\theta = \cos^{-1}\sqrt{\mathrm{Tr}\rho^2}$$
$$= \cos^{-1}\sqrt{\sum_i |\langle \phi_i|\phi\rangle|^4} \geqslant 0. \tag{20}$$

等式当且仅当 $|\phi\rangle$ 为仪器的一个本征态时才成立。可见，测量一般使态的统计角发散。

如果要测量的态为一个混合态，相应的密度矩阵为 ρ，不妨设仪器 A 的本征态 $|\phi_i\rangle$ 已互相正交且完备，那么可以把 ρ 在 A 表象下写出，其矩阵元为

$$\rho_{ij} = \langle \phi_i|\rho|\phi_j\rangle, \tag{21}$$

则此态的发散角为

$$\theta(\rho) = \cos^{-1}\sqrt{\mathrm{Tr}\rho^2} = \cos^{-1}\sqrt{\sum_{ij}\rho_{ij}\rho_{ji}}$$
$$= \cos^{-1}\sqrt{\sum_{ij}|\rho_{ij}|^2}. \tag{22}$$

现在进行测量，测得系统处于 $|\phi_i\rangle$ 中的几率为 $\mathrm{Tr}(\rho|\phi_i\rangle\langle\phi_i|) = \rho_{ii}$，于是测量后的态为

$$\rho_A = \sum_i \rho_{ii}|\phi_i\rangle\langle\phi_i|. \tag{23}$$

这个状态的发散角为

$$\theta(\rho_A) = \cos^{-1}\sqrt{\mathrm{Tr}\rho_A^2} = \cos^{-1}\sqrt{\sum_i \rho_{ii}^2}$$
$$= \cos^{-1}\left(\sum_{ij}|\rho_{ij}|^2 - \sum_{i\neq j}|\rho_{ij}|^2\right)$$
$$\geqslant \cos^{-1}\sqrt{\sum_{ij}|\rho_{ij}|^2} = \theta(\rho), \tag{24}$$

亦即测量的结果使一个混合态的发散角也变大了。

总起来可以看到，测量过程是一个使发散角增大的过程或简称发散的过程。

2. 统计角作为广义极化角

如果仪器不是完全理想的装置，那么测一定态有一定的效率，此时仪器的性质可以用一个效率矩阵 ε 描写，如

$$\varepsilon = \sum_i |\phi_i\rangle R^i\langle\phi_i|, \tag{25}$$

其中 R^i 即为仪器对态 $|\phi_i\rangle$ 的测量效率。用这样的仪器去测量处于混合态 ρ 的量子系统，则总的输出可以用响应 W 表出[3]

$$W = \mathrm{Tr}(\rho\varepsilon). \tag{26}$$

从前面关于两个混合态之间的统计角的定义，可以引伸出一个新概念——状态和仪器之间的统计角

$$\theta(\rho,\varepsilon) = \cos^{-1}\sqrt{\mathrm{Tr}(\rho\varepsilon)} = \cos^{-1}\sqrt{W}. \tag{27}$$

为了看清这个统计角的意义，改写 (27) 式为

$$W = \cos^2\theta(\rho, \varepsilon). \tag{28}$$

这表明测量的输出为统计角余弦的平方．这是光子极化测量结果形式的推广．因此可以看到，状态和仪器的统计角实际上是状态相对于仪器的极化角，是光子偏振角的推广．

五、磁场中的自旋 1/2 粒子

如果系统与一热浴处于热平衡状态，那么描述该系统状态的密度矩阵为

$$\rho = z^{-1}\exp(-H/kT), \tag{29}$$

其中 H 为系统的哈密顿算子，而配分函数 $Z(T)$ 为

$$Z(T) = \mathrm{Tr}\exp(-H/kT)_{\circ} \tag{30}$$

根据前面关于统计角或发散角的定义，可以算出此态的发散角为

$$\theta(\rho) = \cos^{-1}\sqrt{\mathrm{Tr}\rho^2} = \cos^{-1}\sqrt{Z(T/2)/Z^2(T)}, \tag{31}$$

或改写为另一形式

$$Z\left(\frac{T}{2}\right) = (Z(T)\cos\theta(\rho))^2. \tag{32}$$

现在来看一群自旋 1/2 的带电粒子在外磁场 $\boldsymbol{B}$ 中处于平衡状态，此时哈密顿量为

$$H = -\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B} = -\frac{\hbar}{2}\gamma\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}, \tag{33}$$

其中 γ 为旋磁比，$\boldsymbol{\sigma}$ 为 Pauli 矩阵．如果取定外磁场方向为 z 方向，则有

$$\rho = Z^{-1}\begin{pmatrix}\exp(\hbar\omega_0/2kT) & 0\\ 0 & \exp(-\hbar\omega_0/2kT)\end{pmatrix} \quad \omega_0 = \gamma B. \tag{34}$$

$$Z(T) = 2\mathrm{ch}(\hbar\omega_0/2kT).$$

非零的自旋投影平均值为

$$\langle\bar{S}_z\rangle = \mathrm{Tr}(\rho S_z) = \frac{\hbar}{2}\,\mathrm{th}(\hbar\omega_0/2kT), \tag{35}$$

于是可以算出此系统的发散角为

$$\begin{aligned}\theta(\rho) &= \cos^{-1}\left[\frac{1}{2}(1 + \mathrm{th}^2(\hbar\omega_0/2kT))\right]^{\frac{1}{2}}\\ &= \cos^{-1}\left[\frac{1}{2}\left(1 + \left(\frac{2}{\hbar}\langle\bar{S}_z\rangle\right)^2\right)\right]^{\frac{1}{2}},\end{aligned} \tag{36}$$

或反过来

$$\langle\bar{S}_z\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}\sqrt{\cos 2\theta(\rho)}. \tag{37}$$

自旋平均值用状态发散角表达了出来．

六、小 结

可区分性是一个有用的概念，而分析可区分性的恰当工具是几率振幅而不是几率本

身，这点对理解量子力学的特性提供了启示。Wootters 的工作表明，Hilbert 空间两态的角距，亦即两态的统计角是可区分性的量度。当把这思想推广到混合态时，导致了态自身的发散角这一概念，它度量混合态偏离纯态的程度。而两个混合态之间的统计角显然就描述了这两态的差别或可区分的程度。利用这一思想，通常关于光子极化测量的概念就可以推广到一切测量，而测量过程中的熵增加在这里就显现为一种几何过程——统计角发散。我们看到，统计角这一概念在统一理解量子力学的若干特征方面是极富启发意义的。

[1] 惠勒演讲集，物理学和质朴性，安徽科学技术出版社，合肥，(1982).
[2] W. K. Wootters, *Phys. Rev.*, D23(1981), 357.
[3] P. Roman, Advanced Quantum Theory, Addison-Wesley Pub. Co. Inc., Reading,(1965).

STATISTICAL ANGLE OF QUANTUM MIXED STATES

ZHU DONG-PEI　　WANG REN-CHUAN　　WANG GUI-XING

Department of Modern Physics, University of Science and Technology of China, Hefei, 230026

(Received 17 April 1991)

ABSTRACT

The statistical angle between quantum pure states has been generalized to quantum mixed states. For the case of a single mixed state, it leads to a concept of divergence angle. A criterion for pure state is obtained. In the quantum measurement the information function is the squared cosine of statistical angle between the quantum system and the instrument. The entropy increase during the measurement process appears to be the expanding of the divergence angle.

PACC: 0365