

文章编号: 1007-4627(2005)04-0354-04

## 量子力学中的密度矩阵与具有相同 密度矩阵的系综的可区分性\*

龙桂鲁

(兰州重离子加速器国家实验室原子核理论中心, 甘肃 兰州 730000)

(量子信息与测量教育部重点实验室, 清华大学物理系, 北京 100084)

**摘要:** 讨论了密度矩阵的不同定义。建议使用完全密度矩阵、压缩密度矩阵和约化密度矩阵分别描写一个封闭量子体系的、一个系综中平均分子的和在一个复合体系中的一个子系统的密度矩阵。强调这与现在人们认为的具有相同压缩密度矩阵的系综是完全等价的结论完全不同, 具有相同压缩密度矩阵但是成分不同的系综可以通过系综整体测量来区别。作为一个应用, 现在认为现有的核磁共振量子计算中没有纠缠的结论是没有根据的。

**关键词:** 密度矩阵; 压缩密度矩阵; 完全密度矩阵; 约化密度矩阵; 具有相同压缩密度矩阵的系综的不可区分性

**中图分类号:** O413.1      **文献标识码:** A

### 1 引言

密度矩阵是 1927 年由 Von Neumann 和 Landau 独立提出的<sup>[1, 2]</sup>。密度矩阵的方法在量子力学中有重要的应用。与量子力学中的波函数同样重要, 密度矩阵在各个物理分支中有着广泛的应用。例如, 原子核物理、原子分子物理、光学、凝聚态物理等。近年来, 随着量子计算机和量子信息研究的开展<sup>[3-5]</sup>, 密度矩阵形式得到了广泛的应用。然而, 对于密度矩阵的定义和理解始终存在着一些差别和争论。我们注意这个问题是从核磁共振量子计算中是否具有量子纠缠开始的<sup>[6]</sup>。我们从密度矩阵的意义出发, 认为核磁共振的量子性质体现在每个分子中而不是在系综内, 即使所有的系综的态是纯的, 不同分子之间也没有纠缠<sup>[7]</sup>。我们进一步发现, 问题的关键在于密度矩阵相同的系综在物理上是否完全等价, 一般人们都认为是等价的, 但是也不乏一些知名的物理学家认为它们不等价<sup>[8, 9]</sup>。我们认为它们是不等价的<sup>[10]</sup>。最近我们将这一问题进行了详细的研究, 将其中涉及到的问题进行了详细的讨论, 澄清了不同的定义<sup>[11]</sup>。此外, 过去认为的超光

速通讯的不可行性是由于密度矩阵相同的系综的不可区分性引起的。我们的研究认为超光速的不可行性与系综的不可区分性是没有联系的<sup>[12]</sup>。本文给出了我们最近这些工作的一些主要要点。

### 2 3 种不同的密度矩阵

Von Neumann 定义的密度矩阵和 Landau 定义的密度矩阵是不同的。Von Neumann 定义的密度矩阵是对系综定义的。本文定义的系综是这样的: 一个量子系综是由  $N$  个分子组成的, 其中处在态  $|\Psi\rangle$  的分子数是  $N_i$  个。这里分子是广义的, 任何一个量子体系都可以成为一个分子, 如一个原子核、一个原子和一个电子等, 都可以广义地称为分子。值得指出的是系综中的分子之间没有相互作用, 而且不同分子之间的波函数之间没有相位的一致性。即使两个分子处在同样的一个微观量子态上, 这两个分子之间的相因子却是任意的。对于这样的一个系综, 可以使用下面的密度矩阵描写

收稿日期: 2005 - 09 - 19

\* 基金项目: 兰州重离子加速器国家实验室原子核理论研究中心基金资助项目; 国家自然科学基金资助项目(10325521)

作者简介: 龙桂鲁(1962-), 男(汉族), 广西玉林人, 教授, 从事原子核物理与量子信息与量子计算研究;

E-mail: gllong@mail.tsinghua.edu.cn

$$\rho_c = \sum_{i=1}^k \frac{N_i}{N} |\Psi_i\rangle\langle\Psi_i|, \quad (1)$$

并且称这样的密度矩阵为压缩密度矩阵。这样的一个密度矩阵实际上是描写了系综中一个分子的平均状态。在统计的意义上, 压缩密度矩阵的描写是完全的。

Landau 引入的密度矩阵是从另外一个角度引入的。对于一个复合体系, 例如一个由粒子 A 和 B 组成的体系, 体系的波函数是  $|\Psi_{AB}\rangle$ 。如果我们只考虑其中一个粒子的状态, 如 A 粒子的状态, 那么就需要对粒子 B 的状态进行平均, 这时粒子 A 的状态由下面的密度矩阵表示

$$\rho_r = \text{Tr}_B |\Psi_{AB}\rangle\langle\Psi_{AB}|, \quad (2)$$

这里 Tr 是求迹运算。我们称这样的密度矩阵为约化密度, 用下标 r 来表示。

上面两种情况中, 密度矩阵是对体系的一个不完全的描写。而对于一个独立的量子体系, 也可以用密度矩阵来描写。例如, 对于粒子 A 和 B 组成的符合体系, 对于整个体系的描写可以用波函数  $|\Psi_{AB}\rangle$  来描写, 也可以用一个密度矩阵

$$\rho_i(AB) = |\Psi_{AB}\rangle\langle\Psi_{AB}| \quad (3)$$

来描写。这时密度矩阵和波函数两者的描写是完全等价的。我们称这样的密度矩阵为完全密度矩阵。

### 3 抽样测量与整体系综测量

对于一个系综, 可以对它进行抽样测量。对一个系综的力学量  $\Omega$  的抽样测量是这样定义的: 我们随机地从系综中选取  $m$  个粒子, 对每个选取的粒子测量  $\Omega$ 。抽样测量的结果就是这  $m$  个测量的平均。抽样测量可以用压缩密度矩阵表示出来

$$\langle\Omega\rangle = \text{Tr}(\rho_c\Omega). \quad (4)$$

显然对于具有相同压缩密度矩阵的系综, 所有的抽样测量结果都是完全相同的。

与抽样测量相对, 可以对系综进行整体测量。对一个系综的整体测量是将系综中的每一个粒子都进行测量, 然后将结果相加得到。在系综整体测量中, 我们把系综作为一个整体进行测量。对系综进行  $\Omega$  力学量的整体测量, 相应的算符为

$$\Omega_E = \sum_{i=1}^N \Omega(i), \quad (5)$$

其中求和是对系综里的所有分子进行,  $\Omega(i)$  是系综中分子  $i$  的力学量。我们可以推导出系综整体测量的平均值与抽样测量之间的关系是

$$\langle\Omega_E\rangle = N\langle\Omega\rangle = N\text{Tr}(\rho_c\Omega). \quad (6)$$

我们可以用一个简单的例子来说明上面的关系。假设有一个系综是由 4 个自旋为  $1/2$  的粒子组成的, 其中两个粒子的自旋为  $+z$ , 另外两个粒子的自旋为  $-z$ 。这个系综的压缩密度矩阵为

$$\rho_c = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}. \quad (7)$$

如果我们作  $\sigma_x$  抽样测量, 测量的结果为

$$\langle\sigma_x\rangle = \text{Tr}(\rho_c\sigma_x) = 0, \quad (8)$$

即如果我们随机地选取一定数量的粒子进行测量, 测量的平均结果为 0。如果对系综进行整体测量, 即将 4 个粒子的自旋测量都作  $\sigma_x$  测量, 则我们可能得到 4, 2, 0, -2, -4 5 种结果。但是对同样系综的多次整体测量的平均值是 0。

## 4 具有相同压缩密度矩阵的系综的可区分性

现在人们通常都认为具有相同压缩密度矩阵的系综在物理上是不可区分的。Peres 有一个假设, 他认为密度矩阵描述确定了一个量子系综的所有物理性质<sup>[13]</sup>。Preskill 也认为这样的系综是不可区分的<sup>[14]</sup>, 但 DeEspañat 认为是可以区分的。Penrose 认为密度矩阵的描写是不完备的, 只是为了操作的目的而设置的<sup>[9]</sup>。这里面除了定义上的不同引起的误会外, 还有一部分物理上的争议。而这些争议在最近的量子计算中已经导致了比较大的争议, 即核磁共振量子计算是否具有纠缠, 算不算真正的量子计算。而对这一问题的争论的关键在于具有相同压缩密度矩阵的系综在物理上是否完全等价。我们认为具有相同压缩密度矩阵的系综在物理上是不等价的。

首先, 我们承认如果只考虑抽样测量, 任何实验都无法区分成分不同, 但是压缩密度矩阵相同的系综。这些是没有争议的。此外, 对于纯粹的一个

量子力学体系, 这时候体系是用一个完全密度矩阵描写的, 完全密度矩阵与波函数完全等价。因此对于纯粹的量子力学体系, 完全密度矩阵一样, 体系在物理上是完全等价的。除去完全密度矩阵, 我们考虑那些非平庸的系综。如果考虑整体系综测量, 则完全可以使用物理的方法将它们区分开来。对于压缩密度矩阵一样, 但是具有不同粒子数的系综, 利用系综测量的平均值就可以将它们区分开来。假设系综 A 具有粒子数  $N_A$ , 系综 B 具有粒子数  $N_B$ , 那么任何一个力学量的系综测量的平均值就可以将两者区分开来,

$$\begin{aligned} \langle \Omega_{EA} \rangle &= N_A \text{Tr}(\rho_c \Omega), \\ \langle \Omega_{EB} \rangle &= N_B \text{Tr}(\rho_c \Omega), \end{aligned} \quad (9)$$

由于粒子数不同, 因而就可以将它们区分开来。

具有相同的压缩密度矩阵, 但是具有不同组分的系综可以通过系综整体测量相区分。一个系综的组分或者成分指该系综是系综中存在的微观量子态以及每个量子态上的粒子的数量, 即  $|\Psi_i\rangle$  和  $N_i$ 。不同组分的系综完全有可能具有相同的压缩密度矩阵。如果我们对一个系综作力学量  $\Omega$  的整个系综测量, 则系综测量的涨落为

$$\Delta \Omega_E = \sqrt{N \text{Tr}(\rho_c \Omega^2) - \sum_{i=1}^K N_i \langle \Psi_i | \Omega | \Psi_i \rangle^2}, \quad (10)$$

这里的求和是对系综中的量子态进行的。因此组分不同, 涨落的结果也不同。这样就可以将它们区分开来。上式实际上是 deEspagnat 的一个二能级结果的一般推广。

### 5 核磁共振量子计算的量子性质

核磁共振量子计算是目前演示量子算法最多,

也是最早演示量子算法的物理方法。但是最近人们认为核磁共振量子计算中没有量子纠缠, 因此认为核磁共振量子计算不是真正的量子计算。文献[6]的主要工作是将核磁共振体系的压缩密度矩阵

$$\rho = \left(\frac{1}{d} - \epsilon\right) I_d + \epsilon \rho_{\text{eff}} \quad (11)$$

重新写成

$$\rho = \sum_i C_i (\rho_1 \otimes \rho_2 \cdots \rho_n), \quad (12)$$

这里,  $\epsilon$  是一个很小的数, 而  $\rho_{\text{eff}}$  是有效(压缩)密度矩阵,  $n$  是量子比特的数目。当  $\epsilon$  很小时, 式(12)展开系数  $C_i$  都是非负数。因此它没有纠缠。如果我们承认具有相同的压缩密度矩阵的系综是完全等价的, 那么就可以推断目前核磁共振量子计算中不存在纠缠, 因此就不是真正的量子计算。

从前面的几节中可以看到, 具有相同压缩密度矩阵的系综是不等价的, 它们可以通过系综整体测量来区分。因此文献[6]的结论是不成立的。

### 6 结论

密度矩阵在量子力学中至少有 3 种不同的意义, 在应用上应该注意这些差别。我们建议用 3 种不同的名称: 完全密度矩阵、压缩密度矩阵和约化密度矩阵来表示。我们定义了抽样测量和系综整体测量。利用抽样测量是无法区分具有相同的压缩密度矩阵的不同系综。而具有相同的压缩密度矩阵但是具有不同成分的系综, 我们可以通过系综整体测量来区别。这澄清了目前的一个流行的观点, 即认为它们在物理上是完全等价的观点。将这一结论用于核磁共振量子计算的性质问题, 可以看到认为核磁共振量子计算中没有纠缠的观点是不对的。

### 参 考 文 献:

[1] Von Neumann J. Goettingr Nachr, 1927, 245: 273.  
 [2] Landau L. Z Phys, 1927, 45: 430.  
 [3] 杨晓冬, 魏达秀, 罗军等. 原子核物理评论, 2002, 19(2): 275.  
 [4] 魏达秀, 杨晓冬, 罗军等. 原子核物理评论, 2002, 19(2): 278.  
 [5] 龙桂鲁, 李岩松, 肖丽等. 原子核物理评论, 2004, 21(3): 114.  
 [6] Braunstein S L, Caves C M, Josza R, et al. Phys Rev Lett, 1999, 83: 1 054.  
 [7] Long G L, Yan H Y, Li Y S, et al. Commun Theor Phys, 2002, 38: 306.  
 [8] D'Espagnat B. Veiled Reality: An Analysis of Present-day Quantum Mechanical Concepts. New York: Addison-Wesley,

- 1995, 98—106.
- [9] Penrose R, Shimony A, Cartwright N, *et al.* *The Large, the Small and the Human Mind*. Cambridge Press, 1997, 81.
- [10] Long G L, Zhou Y F, Jin J Q, *et al.* Los Alamos Eprint Archive, quant-ph/0408079.
- [11] Long G L, Zhou Y F, Jin J Q, *et al.* Los Alamos Eprint Archive, quant-ph/0508207.
- [12] Wang Chuan, Long Guilu, Sun Y. Los Alamos Eprint Archive, quant-ph/0506047 to appear in *Commun Theor Phys*.
- [13] Preskill J. *Lecture Notes for Physics 229*, California Institute of Technology, 1998.
- [14] Ashe Peres. *Quantum Theory: Concepts and Methods*. Kluwer Academic, 1998, 75.

## Density Matrix in Quantum Mechanics and the Distinction of Ensembles Having the Same Density Matrix\*

LONG Gui-lu

(Center of Nuclear Theory, National Laboratory of Heavy Ion Accelerator of Lanzhou, Lanzhou 730000, China)

(Key Laboratory for Quantum Information and Measurements and Department of Physics,

Tsinghua University, Beijing 100084, China)

**Abstract:** Density matrix is one important tool in quantum mechanics, and it has very broad applications. However there are different definitions about the density matrix, and they describe quite different systems. There has been some misunderstanding about the density matrix in the community, and these misunderstandings hinder the right application of the density matrix. In this article, we discuss the different definitions of density matrix. We suggest to use the full density matrix, compressed density matrix and the reduced density matrix to describe the state of a complete quantum system, the state of an averaged particle in an ensemble and the state of part of a composite system. We stress that contrary to the wide accepted understanding that ensembles with the same compressed density matrix are physically indistinguishable, they are distinguishable through the so-called ensemble measurement. As an application, we suggest that the present conclusion that the present-day nuclear magnetic resonance quantum computation does not have quantum entanglement is groundless.

**Key words:** density matrix; compressed density matrix; full density matrix; reduced matrix; distinction of ensembles with the same compressed density matrix

---

\* **Foundation item:** Center of Nuclear Theory, National Laboratory of Heavy Ion Accelerator of Lanzhou; National Natural Science Foundation of China(10325521)