量子态的可分性与纠缠度量

费少明

（首都师范大学数学科学学院　100048）

1. 引言

量子纠缠是量子物理区别于经典物理的特征之一，量子纠缠态在量子信息处理中起到关键的作用，是许多量子信息处理过程中必不可少的资源[1]。例如在量子隐形传态中，利用一对分别处于甲地与乙地的纠缠粒子，可以把一个未知量子态从甲地传到乙地。对量子纠缠理论及其应用的研究，已经把数学、物理、计算、信息等许多领域紧密地结合了起来。

量子态的纠缠度的大小，与量子信息处理的成功实现有密切关系。没有纠缠（纠缠度为零）的态称为可分态。任给一个量子混合态，目前还没有一个一般的可操作的方法，充分必要地判断它是否有纠缠。对未知的量子混合态，怎样从实验上通过测量一些可观察量的平均值来判断纠缠，所知更少。对于纠缠度的度量，目前也只对两体情形有比较好的定义，且计算极为困难，只有对两量子比特的情形或者某些特殊的量子态有解析的计算公式。本文主要介绍量子纠缠理论中的一些基本概念和已有结果，包括量子态可分的定义，可分的判据，量子纠缠态的纠缠度的度量、计算及上下界估计。

2. 从量子力学谈起

可分与纠缠是对量子态而言的，它们的定义是由对量子态的测量结果给出的，下面我们先介绍量子力学中的量子态与量子测量。

2.1　量子态

一个物理系统，所处的状态由量子态描述。量子态可以分为纯态和混合态，纯态为 d- 维希尔伯特空间 H 中的一个列矢量，记为 $|\psi\rangle$，它对应的矩阵形式为 $|\psi\rangle\langle\psi|$，其中行矢量 $\langle\psi|$ 为 $|\psi\rangle$ 的共轭转置，$\langle\psi|=(|\psi\rangle)^\dagger$，†表示转置加共轭。矢量的长度归一化为 1：$\langle\psi|\psi\rangle=1$。

例如，一个量子比特的状态由二维（$d=2$）复矢量描述，记 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 为二维复矢量空间 H 的基矢，比如，$|1\rangle=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$，$|0\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，则量子比特的一般状态可以表为 $|\psi\rangle=a|0\rangle+b|1\rangle=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$，其中 $a,b\in\mathbb{C}$ 为复系数，满足态矢量 $|\psi\rangle$ 长度为一的归一化条件：$|a|^2+|b|^2=1$。

多体系统的量子纯态则为张量空间 $H\otimes H\otimes\ldots\otimes H$ 上的矢量。设 $|i\rangle$，$i=1,\ldots,d$，为 H 的基矢量，则有

$$|\psi\rangle=\sum_{i,j,\ldots,k=1}^{N} a_{ij\ldots k}\,|ij\ldots k\rangle, \tag{1}$$

其中 $a_{ij\ldots k}\in\mathbb{C}$ 满足归一化条件，$\sum a_{ij\ldots k}a^*_{ij\ldots k}=1$，$|ij\ldots k\rangle\equiv|i\rangle\otimes|j\rangle\otimes\ldots|k\rangle$ 为张量空间 $H\otimes H\otimes\ldots\otimes H$ 的基矢量。

例如，两个量子比特的状态 $|\psi\rangle$ 由 $2\otimes2$ 张量空间 $H\otimes H$ 上的矢量描述，一般可以表为

$$|\psi\rangle=a_{11}|00\rangle+a_{12}|01\rangle+a_{21}|10\rangle+a_{22}|11\rangle, \tag{2}$$

其中 $a_{ij}\in\mathbb{C}$，$\sum_{ij}|a_{ij}|^2=1$。

纯态是混合态的特殊情形，当考虑多体系统中的一个子系统时，该子系统的状态一般是个混合态，由密度矩阵描述。密度矩阵 ρ 是一个厄米（共轭转置等于它自己）的、半正定（特征值大于等于零）的、迹为一的矩阵。这样的矩阵总可以有纯态分解：

$$\rho=\sum p_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i|,\ 0<p_i\le1,\ \sum p_i=1, \tag{3}$$

其中 $|\psi_i\rangle$ 是归一化的纯态矢量。但是对于给定的密度

矩阵 ρ，式 (3) 右边的展开形式不是唯一的。当 ρ 的秩为一时，ρ 就是一个纯态所对应的密度矩阵。

2.2　量子测量

如果我们想知道处于某个状态的体系的有关信息，就需要对该量子态进行测量。测量只能对可观察的量进行，比如自旋、电荷、位置、动量等，每一个可观察量对应一个自共轭算子。对于离散有限维体系，可观察量即厄米矩阵，一个厄米矩阵 O 有实的本征值 λ_i，对应的本征矢量 $|v_i\rangle$ 构成一组完备的正交基矢，任何一个态矢量 $|\psi\rangle$ 都可由 $|v_i\rangle$ 展开。对态 $|\psi\rangle$ 测量 O，得到　的概率 p_i 为 $|\psi\rangle$ 在基 $|v_i\rangle$ 下展开的相应展开系数的绝对值平方，$p_i = Tr(|v_i\rangle\langle v_i|\psi\rangle\langle\psi|)$。多次测量后得到 O 的平均值 $\bar{O} = \sum_i p_i\lambda_i = \langle\psi|O|\psi\rangle = Tr(|\psi\rangle\langle\psi|O) = Tr(\rho O)$，$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ 为对应于纯态 $|\psi\rangle$ 的密度矩阵。这里投影算子 $\{|v_i\rangle\langle v_i|\}$ 构成 O 的一组测量算子，满足 $\sum_i |v_i\rangle\langle v_i| = I$，其中 I 为单位算子。

一般而言，一个测量 M 由一组正算子 $\{M_i\}$ 给出，$M_i \geq 0, \sum_i M_i = I$。对一个量子态 ρ 作测量 M，得到第 i 个测量结果的概率为 $p_i = Tr(M_i\rho)$。因此对一个量子态做测量，人们将得到一组概率分布 $\{p_i\}$。

如果对一个量子态做两个不同的测量 M^1：$M_i^1 \geq 0$，$\sum_i M_i^1 = I$ 和 M^2：$M_j^2 \geq 0$，$\sum_j M_j^2 = I$，就会有量子测不准关系的问题，比如这两个量不能被同时精确测量，对一个量测得越精确，对另一个量的测量误差就会越大。只有当存在测量 M^{12}：$^{12}_{ij} \geq$ ，$\sum_{i,j} M_{ij}^{12} = I$，使得 $M_i^1 = \sum_j M_{ij}^{12}$，$M_j^2 = \sum_i M_{ij}^{12}$ 成立时，测量 M^1 和 M^2 才是可以被同时精确（联合）测量的。这种量子测不准关系可以用来判断一个量子态的可分与纠缠。

3. 量子态的可分与纠缠

量子态的分类，是通过对量子态测量，由量子测量结果来刻画的。量子态的可分与纠缠，是针对两体或多体系统来说的。如果对 $A(B)$ 系统作量子测量，不影响对 $B(A)$ 系统测量得到的测量结果的概率分布，则我们说系统 A 和 B 之间没有纠缠，它们处于可分态。反之，它们处于纠缠态。

3.1　定义

对多体纯态 (1)，如果 $|\psi\rangle$ 可以表为各个子空间上的单位矢量的直积形式：

$$|\psi\rangle = \left(\sum_{i=1}^{d} a_i |i\rangle\right) \otimes \left(\sum_{j=1}^{d} b_j |j\rangle\right) \otimes \ldots \otimes \left(\sum_{k=1}^{d} c_k |k\rangle\right), \quad (4)$$

则称 $|\psi\rangle$ 是可分的，也称完全可分，这时所有子系统间没有任何纠缠，对任一单体的测量不影响对其他子系统测量得到的测量结果的概率分布。显然，对量子态 (4) 每一个子系统作基矢量对应的投影测量 $\{|i\rangle\langle i|\}$，得到的概率分布总是 $\{|a_i|^2\}, \{|b_i|^2\}, \ldots, \{|c_i|^2\}$，和测量的先后次序没有关系，互不影响。

一个两比特的可分纯态，可以写成以下形式：$(a_1|1\rangle + b_1|0\rangle) \otimes (a_2|1\rangle + b_2|0\rangle)$，例如

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |01\rangle) = |0\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle). \quad (5)$$

处于该态的两个量子比特间没有量子纠缠，对第二个比特测量，测得 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 的概率分别为二分之一。但是不管测得 $|0\rangle$ 还是 $|1\rangle$，对第一个量子比特测量，测得 $|0\rangle$ 的概率始终为一。

写不成直积形式的态称为纠缠态，例如

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)\ . \quad (6)$$

处于态 (6) 的两个量子比特称为 EPR (Einstein, Podolsky and Rosen) 对。如果（投影）测量量子态 (6) 中的第一个或者第二个比特，则得到 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 的概率都是二分之一。但若先测了第一个比特，假设得到了 $|0\rangle$，则测量后的两比特态为 $|00\rangle$，这时候再测量第二个比特，只可能测得 $|0\rangle$。所以 EPR 对中的两个比特，不论空间上相隔多远，对第一比特的测量，会“瞬间”改变第二比特的状态，从而对第二比特的测量结果依赖于之前对第一比特的测量结果，就算两次测量的时间间隔很短，短到光也不能在该时间间隔

内从第一比特所处的位置传到另一比特处。这两个没有相互作用的比特之间，存在着一种量子的关联，见示意图图 1[2]。

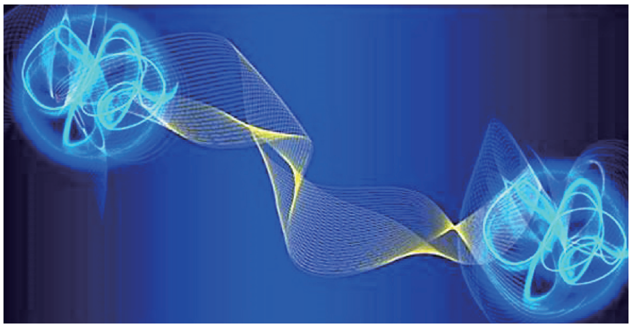

图 1　两个没有相互作用、相隔很远的粒子之间，可以存在量子关联，对一个粒子的测量，会“瞬间”影响对另一个粒子的测量结果

如果把 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 分别看成是一双手套中的左手套和右手套，甲和乙的口袋中分别装了其中一只，本来他们每个人的手套都有可能是左手套或右手套，但是一旦甲“看”到他的是左手套，那么乙手里的必然成了右手套，即使他们相隔很远。这样一种在量子力学框架里看来似有“超距作用”的现象，应该在量子引力的框架里有更合理的解释。

这种两量子比特纠缠态，实验上有多种产生方法，例如让激光经过参量下转换片。原子中电子从高能级跃迁到低能级时，发出的一对光子，由于角动量守恒，会处于最大纠缠态 $(|01\rangle-|10\rangle)/\sqrt{2}$，见图 2[3]。

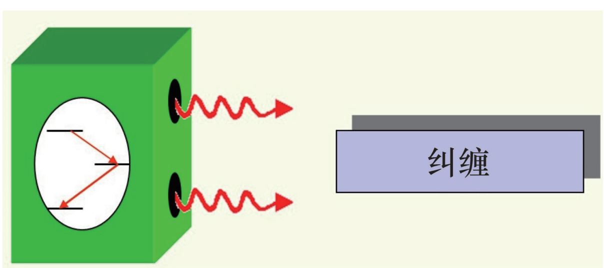

图 2　原子中的电子从高能级跃迁到低能级时，发出一对处于最大纠缠态的光子

关于混合态的可分性，可以同样由测量定义。如果混合态 ρ 存在一种分解 (3)，其中每一个 $|\psi_i\rangle$ 都是可分的，则称 ρ 是可分的，否则称 ρ 为纠缠态。等价地 ρ 可分也可以定义为

$$\rho=\sum_i p_i\rho_i^1\otimes\cdots\otimes\rho_i^n=\sum_i p_i|\psi_i^1\rangle\langle\psi_i^1|\otimes\cdots\otimes|\psi_i^n\rangle\langle\psi_i^n|, \tag{7}$$

其中 $\rho_i^j=|\psi_i^j\rangle\langle\psi_i^j|$ 是对应第 j 个子系统的密度矩阵。

3.2　量子态的可分性判据

如何判别一个量子态可分或纠缠，是相当困难的事情，目前只对一些特殊的量子态，有充分必要的、可操作的判据。一般情形，多为关于可分的必要判据。下面简单介绍几个比较重要的判据。

a). 正映照判据　把任意正（本征值都大于或等于零）的矩阵 N 映照成正的矩阵的映照 Λ 称为正映照，即 $N\ge 0\rightarrow\Lambda(N)\ge 0$。设两粒子 A，B 处于混合态 $\rho_{AB}\in H_A\otimes H_B$，如果只对 B 粒子空间作正映照 Λ，而对 A 粒子空间作恒等变换 I，则 $(I\otimes\Lambda)\rho_{AB}$ 有可能不是正的。但是从可分性定义 (7) 容易发现，如果 ρ_{AB} 是可分态的，则 $(I\otimes\Lambda)\rho_{AB}$ 一定是正的。一个量子混合态 ρ_{AB} 可分的充分必要条件是它对所有的正映照 Λ，$(I\otimes\Lambda)\rho_{AB}$ 都是正的。

不过要找全所有的正映照是十分困难的事情。一个正映照的例子是矩阵的转置 T，从这个正映照，我们有下面关于态可分的必要判据，即 PPT (positive partial tranglenspose) 判据，又称部分转置（半）正定判据，或 Peres-Horodecki 判据：若 ρ_{AB} 可分，则它的部分转置矩阵 $\rho^{T_A}\ge 0$，其中 T_A 表示对 A 系统做转置。部分转置矩阵为半正定的态称为 PPT 态，可分态必定是 PPT 态，但是 PPT 态不一定可分。当 $H_A\otimes H_B$ 的维数为 2×2 或 2×3（第一个空间维数是 2, 第二个空间维数是 2 或 3）时，PPT 判据是充分必要的 [4]。

b). 矩阵重排 (realignment) 判据　矩阵重排判据与 PPT 判据有很强的互补性，设 $A=(a_{ij})$ 是 $m\times n$ 矩阵，定义 $Vec(A)$ 是由矩阵元 a_{ij} 排成的列矢量，$Vec(A)=(a_{11},\cdots,a_{m1},a_{12},\cdots,a_{m2},\cdots,a_{1n},\cdots,a_{mn})^T$。设 $Z=(Z_{ij})$ 是 $m\times m$ 分块矩阵，每一块 Z_{ij} 都是 $n\times n$ 矩阵，重排矩阵 $\tilde{Z}$ 是个 $m^2\times n^2$ 矩阵，定义为：$\tilde{Z}\equiv\left(Vec(Z_{11})\cdots Vec(Z_{m1})\cdots Vec(Z_{1m})\cdots Vec(Z_{mm})\right)^T$。重排判据说，如果 $m\times n$ 的量子态 ρ_{AB} 可分，则 ρ_{AB} 的重排矩阵 $\widetilde{\rho_{AB}}$ 的模（奇异值和）满足 $\|\rho_{AB}\|\le 1$ [4]。

关于可分的判据还有很多，例如控制判据，推广

的重排判据，值域判据，低秩密度矩阵的充要可分判据，由 PPT 态的正则形式得到的判据，从密度矩阵的 Bloch 表示得到的判据，从量子力学测不准关系得到的判据，协变矩阵判据，关联矩阵判据，通过实验测量判断 2×2 和 2×3 混合态可分的充要判据，纠缠见证，等等，可分性判据也可以通过一组特殊的测量（比如互不偏基）得到。

4. 量子纠缠的度量

可分态的纠缠度为零，对于非可分态，则需要一个合适的量来度量其纠缠度的大小。纠缠度量有很多种，它们都必须满足：对可分态，其纠缠度为零；在局部幺正变换（即坐标变换）下，纠缠度不变；在一般局部操作下，纠缠度不增加。下面介绍几种主要的纠缠度量。

4.1 形成纠缠度

形成纠缠度（entanglement of formation），也叫纠缠形成，是对两体系统定义的。对于两体纯态 $|\psi\rangle=\sum_{ij}a_{ij}|ij\rangle\in H\otimes H$，其纠缠形成为 $E(|\psi\rangle)=E(|\psi\rangle)=-\mathrm{Tr}(\rho_1\log_2\rho_1)$，其中 $\rho_1=Tr_2|\psi\rangle\langle\psi|$ 为约化密度矩阵。对于混合态 $\rho=\sum_i p_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$，其纠缠形成为

$$E(\rho)=\inf\sum_i p_iE(|\psi_i\rangle), \qquad (8)$$

其中 inf 表示对所有可能的 ρ 的纯态分解取极小。由于对给定的密度矩阵，其纯态分解 (3) 有无穷多种，计算 $E(\rho)$ 非常困难。当 H 的维数是 2 时，即两量子比特情形，有 $E(|\psi\rangle)=h(\frac{1+\sqrt{1-C^2}}{2})$，其中 C 称为并发度 (concurrence)。两比特量子纯态 (2) 的并发度为 $C(|\psi\rangle)=2|a_{11}a_{22}-a_{12}a_{21}|$。并发度本身也是一种纠缠度量，混合态的并发度可以和 (8) 类似定义，

$$C(\rho)=\inf\sum_i p_iC(|\psi_i\rangle). \qquad (9)$$

计算可得 $C(\rho)=Max\{0,\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3-\lambda_4\}$，其中 $\lambda_1\geq\lambda_2\geq\lambda_3\geq\lambda_4$ 为矩阵 $\sqrt{\rho\tilde{\rho}}$ 的本征值，$\tilde{\rho}=(\sigma_y\otimes\sigma_y)\rho^*(\sigma_y\otimes\sigma_y)$，$\sigma_y$ 是泡利矩阵。利用纠缠形成与并发度间的单调关系，可得两量子比特混合态的纠缠形成 $E(\rho)=h(C(\rho))$。

除了两比特情形，一些特殊态，如 Werner 态、Istropic 态及部分特殊高维量子态的纠缠形成，也可以解析计算 [4]。一般高维情形，$E(\rho)$ 尚无一般的公式，文章 [5] 给出了 $E(\rho)$ 的下界估算。

4.2 并发度

对一般两体纯态 $|\psi\rangle$，其并发度定义为

$$C(|\psi\rangle)=\sqrt{2(1-\mathrm{Tr}\rho_1^2)}. \qquad (10)$$

混合态的并发度同样地由 (9) 定义，除了对一些特殊量子态，并发度 $C(\rho)$ 也没有一般的解析计算公式。从部分转置及重排这两个可分性判据，可以得到 $C(\rho)$ 的一个解析下界估计，另外从测不准关系判据、协方差矩阵判据、关联矩阵判据也可以得到并发度的下界 [4]。

4.3 相对熵纠缠度

相对熵纠缠度定义为纠缠态 ρ 与其“最近”的可分态 σ 间的“距离”，

$$E_R(\rho)=\inf_{\sigma\in S}\mathrm{Tr}[\rho(\log\rho-\log\sigma)].$$

它的几何意义很明确，对任意多体态都适用，但由于可分态这个集合的“边界”不清楚，这个“距离”很难计算。

4.4 负度

负度 (negativity) 是根据纠缠态的密度矩阵在部分转置后有负的本征值这一事实定义的，两体纯态 $\rho_{AB}=|\psi\rangle_{AB}\langle\psi|$ 的负度为 $N(\rho_{AB})=(\|\rho_{AB}^{T_A}\|-1)/2$。如果 ρ_{AB} 可分，则其部分转置矩阵 $\rho_{AB}^{T_A}\geq0$，模 $\|\rho_{AB}^{T_A}\|$ 为一，$N(\rho_{AB})=0$。对于一般混合态 ρ_{AB}，其负度定义为 $N(\rho_{AB})=\min\sum p_kN(|\psi_k\rangle_{AB}\langle\psi_k|)$，其中极小取遍所有的分解 $\rho_{AB}=\sum_k p_k|\psi_k\rangle_{AB}\langle\psi_k|$。对于混合态，$\rho_{AB}$ 只有一些下界估计。

5. 结束语

量子纠缠态在量子计算、量子信息处理等方面起到关键作用，量子纠缠理论的研究有着重要的意义。本文简单介绍了量子纠缠理论中量子态的可分性、纠缠度量及其估算。纠缠度量为研究纠缠在多体系统之间的分配提供了工具，比如多体之间的并发度会满足诸如单配性关系[6]。量子纠缠理论及其在量子计算和量子信息处理中的应用，还有很多问题有待进一步解决。

本文作者感谢基金项目 NSFC 11275131 和 11675 113 的资助。

参考文献

[1] M.A. Nielsen and I.L. Chuang, Quantum Computation and Quantum Information. Cambridge: Cambridge University Press, (2000)

[2] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki and K. Horodecki, Rev. Mod. Phys. 81, 865-942 (2009)

[3] http://www.express.co.uk/news/science/614042/Quantum-entanglement-experiment-Germany-Nature

[4] 图片改自 2001 年 R. Werner 教授波恩大学报告 PPT

[5] K. Chen, S. Albeverio and S.M. Fei, Phys. Rev. Lett. 95, 210501(2005)

[6] X.N. Zhu and S.M. Fei, Phys. Rev. A 90, 024304(2014)；Phys. Rev. A 92, 062345(2015)