量子开系统理论及其应用*

孙昌璞†

（中国科学院理论物理研究所　北京 100190）

摘　要　　量子物理是当代科学发展的基石，多次引发高技术革命. 它与信息科学结合，产生了交叉学科——量子信息，为突破计算机芯片的尺度极限提供了全新的解决思路. 自 1987 年起，文章作者及其合作者对量子开系统理论、量子退相干及其相关的量子物理基本问题进行了系统的探索，契合了最近 10 年量子信息研究的快速发展. 文章首先结合上世纪 70 年代末彭桓武先生关于量子开系统（阻尼谐振子的量子化）的重要研究工作，介绍了量子开系统的基本概念及其研究的科学意义，同时简略介绍了文章作者及其合作者在量子开系统理论及其在量子信息应用方面的系列研究工作.

关键词　　量子开系统，量子退相干，量子测量，量子信息

Quantum open system theory and its applications

SUN Chang-Pu†

（*Institute for Theoretical Physics*，*Chinese Academy of Sciences*，*Beijing* 100190，*China*）

Abstract　　Quantum physics is the cornerstone of contemporary science，and has led to a revolution in high-tech development. Its combination with information science has resulted in the interdisciplinary field of quantum information. It provides a new train of thought for overcoming the limits of computer chip size. Since 1987，our investigations on quantum open system theory，quantum ecoherence，and the fundamental problems of quantum physics have kept pace with the rapid development of quantum information science in the last decade. Starting with Huan-Wu Peng's important research on open quantum systems (the quantum damped harmonic oscillator) at the end of the 1970s，we will review the basic concepts and scientific importance of this field. At the same time，we will give a brief description of our series of studies on the theory of quantum open systems and its applications in quantum information.

Keywords　　quantum open system，quantum decoherence，quantum measurement，quantum information

1　量子开系统和量子退相干问题的研究

量子力学是 20 世纪的奠基性科学理论之一，是人们理解微观世界运动规律的现代物理基础. 它的建立，导致了以激光、半导体和核能为代表的新技术革命，深刻地影响了人类的物质、精神生活，已成为社会经济发展的原动力. 然而，量子力学的基础却存在诸多的争议. 围绕着量子力学的诠释，以玻尔为代表的哥本哈根学派的“标准”诠释不断遭遇到各色各样的挑战. 其中一些严肃的学术争论，在促进量子力学自身发展的同时，使量子力学走向交叉科学领域. 它与当代信息科学、计算机科学相结合，导致了量子信息科学的建立. 量子力学这些新的发展大多基于实验检验，促使人们回过头来在实验可检验的层面上重新考察量子理论的基本问题.

量子力学基本问题的核心是量子测量和量子测量相关的量子力学诠释，而量子开系统理论是描述量子测量过程的基本理论. 大家知道，在量子力学哥本哈根诠释中，波包塌缩（wave function collapse，

*　国家自然科学基金、中国科学院知识创新工程、国家重点基础研究发展计划资助项目

2009－01－16 收到初稿，2009－01－23 收到修改稿

†　Email：suncp@itp.ac.cn

或称冯·诺依曼假设)是一个关键性的观念.根据这个假设,为了使得测量后瞬间的重复测量给出相同的结果,测量某一力学量一旦得到其本征值之一,体系的波函数便会塌缩到相应的本征态上.这是一个非幺正的不可逆过程(称为 R 过程).然而,封闭的微观体系服从薛定谔方程,仅仅经历一个可逆的幺正演化过程(简称为 U 过程).显然,被测量的量子系统不再是一个封闭的系统,人们通常认为量子力学本身不能直接地描述 R 过程.被测量子系统与测量仪器发生相互作用,是一个典型的开放系统.从这个意义上讲,量子开系统的研究对理解量子测量等基本问题十分重要.

量子开系统研究重要性还在于,任何真实物理系统总是与环境相互作用、交流信息.封闭量子系统只是理论上的一种理想化.通过控制量子系统的演化,实现各种量子信息过程,必须考虑开系统的量子退相干(quantum decoherence).下面将以量子计算为例,详细说明量子开系统研究的意义及其核心科学问题.我们先说明什么是量子开系统.量子开系统的开放性表现在它与环境交换能量和交流信息.用哈密顿量 H_S 和 H_E 分别描述量子系统 S 及其环境 E,$V(S,E)$代表 S 和 E 之间的相互作用.当$[H_S,V(S,E)]\neq 0$ 时,系统与环境交换能量,从而发生所谓的量子耗散(quantum dissipation);当$[H_S,V(S,E)]=0$ 时,系统和环境之间没有能量交换.然而,当$[H_S,V(S,E)]\neq 0$ 时 E 会记录 S 的信息,从而导致系统的退位相(dephasing).这两种情况都有相干性损失,发生所谓的量子退相干.

在量子计算的研究中,量子计算机可以抽象为一个有许多二能级系统构成的复合系统(如图 1 所示,用于核磁共振量子计算的大分子,被溶液环境包围,相当于处于一个环境中).量子计算过程就是对这个复合系统时间演化进行控制,最后通过测量进行读数,得到计算结果.显然,控制和测量意味着系统与外界的耦合作用.另一方面,任何系统都不能与外部环境完全隔离,环境必定会与系统交流信息和交换能量.因而,从这两方面讲,量子计算机系统本质上是一个开系统.当然,量子计算是利用系统的量子相干性进行信息处理的,在一定时间内必须保持体系的封闭性.这个特征时间就是所谓的退相干时间.一个开系统可以作为量子计算机的必要条件是在这个时间内能够完成足够多次的逻辑门操作.量子计算过程要求全面协调系统的开放性和封闭性,既能保持系统的相干演化,又能通过测量读数得到最后的计算结果.因此,量子开系统理论的研究对于量子信息发展举足轻重.

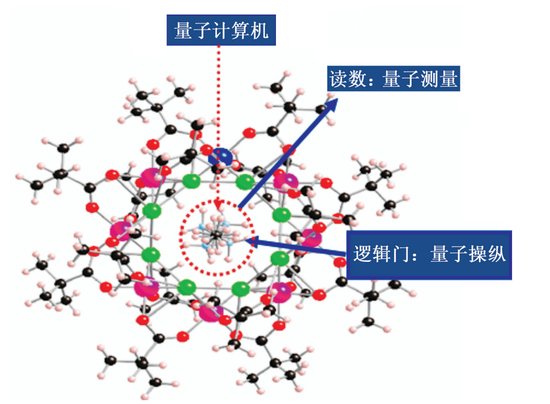

图 1 一个典型的量子开系统:核磁共振量子计算机,溶液环境包围的大分子体系

其实,早在 20 世纪 70 年代末,彭桓武先生就在国内率先开展量子开系统的研究[1].后来,在彭桓武先生亲自鼓励下,我们长时间地工作在该领域科学的前沿,并与信息科学交叉,参与国际竞争,形成了自己的特色,其中部分工作于 2008 年获得国家自然科学二等奖.

2 彭桓武关于量子耗散问题的研究

国内关于量子耗散的研究可以追溯到 20 世纪 70 年代末彭桓武先生的研究工作(见图 2),其目的是考虑阻尼力可以用量子力学描述.这个工作的起源可能是彭先生早年与 Heitler 合作的关于量子场论辐射阻尼问题的研究[2].


第 29 卷 第 8 期 物 理 学 报 Vol. 29, No. 8
1980 年 8 月 ACTA PHYSICA SINICA Aug., 1980

阻尼谐振子的量子力学处理

彭 桓 武

(中国科学院理论物理研究所)

1979 年 11 月 28 日收到

提 要

本文假设量子力学中也允许引入阻尼力的描述,给出对与速度成正比的阻尼系统用正则化变换的处理方法,以一维谐振子为例作了具体计算.结果与经典力学比较表明是合理的.

用经典力学处理多自由度系统时,常唯象地引入阻尼力以描述能量从某特定自由度向其它多个自由度的耗散.未知在量子力学中是否根本不允许这种描述.至少在用单自由度近似处理多自由度问题时,类似的描述似乎值得注意.姑且允许这种描述并设阻尼

图 2 彭桓武 1980 年在《物理学报》发表的量子开系统的文章

大家知道，处理耗散系统或阻尼力量子化通常有两种方法. 其一是把研究的系统置于一个大的热库之中，使得热库加系统形成一个可由标准量子力学方法描述的封闭量子系统. "平均掉"热库的自由度，系统和热库间适当的相互作用将自动给出具有阻尼系数 η 和布朗运动随机力 $f(t)$ 的坐标算符耗散方程：

$$M\ddot{q}(t)=-\eta\dot{q}(t)-\frac{\partial V(q)}{\partial q}+f(t)\ , \qquad (1)$$

其中 $V(q)$ 是一维位势，M 是粒子质量. 处理耗散系统量子化的另一种方法是直接给出运动方程(1)式的有效哈密顿量. 把耗散系统唯象地看成由这个时间相关的有效哈密顿量描述的时变系统，相应的海森堡运动方程就是耗散方程 (1). 针对谐振子情况，这种有效哈密顿量最初由 Caldirola 和 Kanai[3,4] 明显地给出. 彭桓武后来在《物理学报》发表文章(也在1980 年广东从化 "理论粒子物理会议"上发表了英文稿)，给出了一个更为简洁、漂亮的耗散谐振子有效哈密顿量，在不计驱动外力时，它与时间无关. 1992 年，在杨振宁先生指导下，我们开始进行量子开系统的理论研究 [5]. 我与 Brookhaven 美国国家实验室的余理华(L. H. Yu)合作，在 1993 年发现了上述两种理论的内在联系，澄清了有效哈密顿量所描述的波函数的意义，从而使有效哈密顿量耗散理论从一个唯象描述上升为一个微观理论[6,7]. 以下我们先复述彭桓武的工作，并推广到任意位势情况. 然后讨论它与 Caldirola 和 Kanai 工作的关系，并指出有效哈密顿量理论的适用条件.

假设在某种条件下，耗散方程(1)式中的布朗力 $f(t)$ 像普通外力一样，与坐标算符 $q(t)$ 可对易. 由(1)式可以得到对易子方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[\ q(t),\dot{q}(t)]=-\frac{\eta}{m}\ [\ q(t),\dot{q}(t)] \qquad (2)$$

对任意位势 $V(q)$ 仍然成立. 根据 $t=0$ 时的正则量子化条件 $[\ q(0),M\dot{q}(0)]=i\hbar$ ，(2) 式给出的对易关系随时间变化：

$$[\ q(t),\dot{q}(t)]=\frac{i\hbar}{M}e^{-\eta t/M}. \qquad (3)$$

(3)式意味着正则对易关系 $[x,p\ ]=i\hbar$，其中的正则坐标 x 和正则动量 p 可依彭氏"正则规范"定义如下：

$$x(t)=q(t)\ \mathrm{e}^{\eta t/2M}\ ,$$
$$p(t)=[\ M\dot{q}(t)+\frac{1}{2}\eta q(t)]\ \mathrm{e}^{\eta t/2M}\ . \qquad (4)$$

(4)式的两边对时间微分，再应用(1)式，可得到待定的有效哈密顿量 $H_e(t)$ 满足的方程组：

$$\frac{1}{i\hbar}[x(t),H_{\mathrm{e}}(t)]=\frac{p(t)}{M}\ ,$$
$$\frac{1}{i\hbar}[\ p(t),H_{\mathrm{e}}(t)]=$$
$$[-\frac{\partial V(q)}{\partial q}+f(t)+\frac{\eta^2}{4M}q(t)]\ e^{\eta t/2M}\ .$$

由此可解出任意位势下的耗散系统有效哈密顿量：

$$H_e(t)=\frac{P^2}{2M}+e^{\eta t/M}V(x\mathrm{e}^{-\eta t/2M})-\frac{\eta^2}{8M}x^2-f(t)x\cdot\mathrm{e}^{\eta t/2M}\ . \qquad (5)$$

当 $V(q)=kq^2/2$，(5)式正好回到彭文的结果，故我们称(5)式为广义的彭氏哈密顿量. 应注意，仅当 $V(q)=0$ 或 $\pm kq^2/2$ 时，忽略布朗运动的有效哈密顿量才是时间无关的. 与彭氏方法等价，Caldirola－Kanai 有效哈密顿量为

$$H_{\mathrm{e}}(t)=\mathrm{e}^{-\eta t/M}\frac{p^2}{2M}+\mathrm{e}^{\eta t/M}V(x)-f(t)x\cdot\mathrm{e}^{\eta t/2M}, \qquad (6)$$

它可以在不同的"正则规范"：$x(t)=q(t)$，$p(t)=M\dot{q}(t)\mathrm{e}^{\eta t/2M}$ 下得到.

需要指出的是，上述有效哈密顿量理论的适用是有条件限制的，彭先生后来也意识到这一点. 当 $f(t)$ 是随机力而非外场时，通常 $[f(t),x]\neq0$. 在这种情况下，$f(t)$ 对哈密顿的贡献不能简单地正比于 $f(t)x$. 彭先生曾经告诉我，他的文章在《物理学报》发表后，有人也指出了这个适用条件. 他认为，当年自己没有意识到这个问题，文章却发表了，个人固然要负主要责任. 但对于他这样名人的文章，审稿人也可能没有很仔细审阅，忽略稿子中的纰漏. 因此，对于名人的稿子，更要严格把关. 彭先生希望以后对待他的研究工作发表，要有人更仔细和严格地审阅. 对待这件事情的态度，充分体现了彭先生高尚的学术品格. 彭先生在生命最后岁月中发表的另一段珍贵的文字，更能体现彭先生的这种严谨的治学精神. 2007 年 1 月在上海出版的《科学》杂志(59 卷 1 期)最后一页上，刊登了彭先生的一封更正信，其内容为："贵刊 2006 年 1 月(58 卷 1 期)登载我文《具有启发性的广义相对论》后，在继续研究中，我发现该文中一等式(该期 42 页左栏下倒数第 12 行)右侧第三项的系数有错，$-N/2$ 应为 $+N(N-3)/4$. 因而此后直至文尾段前的讨论皆应作废. 彭桓武，2006 年 11 月 16 日."彭先生发出这封更正信的时间，离他去世只有 3 个多月. 刘寄星教授说："这是我所发现的有彭先生署名在正式科学刊物发表的最后的材

料，这封信足以反映彭先生一生严谨求实的科学态度.”

3 我们关于量子开系统的研究工作

自1992年起，根据杨振宁先生的建议，我从量子测量和量子耗散两个方面着手，开始量子开系统的研究. 我自己在1992年完成的量子测量和量子退相干的工作于1993年发表[5]（下一节详细介绍），而量子耗散方面的工作则是美国布鲁克海文国家实验室的余理华博士与我合作的，最早于1994年发表的[6]. 后者从微观模型出发，直接给出了彭桓武等有效哈密顿量理论的适用条件，补充和发展了彭先生工作中关于随机外力的分析.

当时，由于介观物理中有耗散阻尼的超导电路量子化工作的发展和宇宙波函数经典约化问题的需求，耗散体系量子化理论重新引起人们的重视，那时人们特别关心介观系统量子耗散对量子隧穿问题的影响，Leggett 等人的工作是当时人们关注的焦点[7]. 杨振宁先生认为，量子耗散问题应当充分理解系统+环境的波函数结构. 沿着这个方向，余理华与我合作，在量子开系统理论上取得了一个实质性的进展. 我们的贡献是把基于热库理论的微观理论与有效哈密顿描述结合起来，得到了有效哈密顿量的适用条件，预言了耗散系统的波函数局域化现象[8].

一般地讲，处理环境导致的量子耗散问题，并不预先假定环境与其中系统相互作用的具体形式. 但是 Leggett 及其合作者发现，如果系统与环境的耦合很弱，环境可以等价于多个谐振子构成的热库，而且系统与热库的耦合对于热库自由度而言是线性的. 因此，谐振子热库是一个合理的、普适的近似. 可以一般地写下量子系统的环境作用模型：

$$H = H_S + \sum_n E_n a_n^+ a_n + \sum_n V_n(x) a_n^+ + \sum_n V_n^*(x) a_n \quad , \tag{6}$$

其中 $V_n(x) = \langle \Psi_n | V(x,q) | \Psi_0 \rangle$ 是热库与系统相互作用时从基态到第一激发态的跃迁矩阵元，对热库坐标 x 来说，不必是线性的. 需要指出的是，Leggett 等人的论证仅涉及到两个能级之间的跃迁，高阶跃迁忽略不计. 据此，我们还可以把上述谐振子热库换成二能级系统构成的热库，相应的量子开系统模型可写为[9]

$$H = H_S + \sum_n E_n \sigma_z(n) + \sum_n V_n(x)\, \sigma_+(n) + V_n^*(x)\, \sigma_-(n) \, . \tag{7}$$

在这个模型中，$\{\sigma_\alpha(n) | n = 1, 2, \cdots, \alpha = Z, +, -\}$ 代表泡利矩阵.

为了深入理解量子耗散的动力学机制，我们考察 $V(x)$ 是线性的情况[10]，这时量子耗散模型可以解析求解. 用 a 代表频率为 ω 的谐振子的消灭算子，$a_j (j=1,2,\cdots,N)$ 代表频率为 ω_j 的热库谐振子的消灭算子. 在旋转波近似下，总系统的哈密顿量是

$$H = \omega a^\dagger a + \sum_j \omega_j a_j^\dagger a_j + \sum_j (\zeta_j a_j a^\dagger + h.c.) \, . \tag{8}$$

在 Wigner－Weisskopff（WW）近似下，可以明显地求解出 $a(t)$ 和 $a_j(t)$ 的 Heisenberg 方程，得到产生消灭算子随时间演化的具体方式：

$$\alpha(t) = u(t)\alpha(0) + \sum\nolimits_j v_j(t) a_j(0) \ ,$$
$$a_j(t) = \mathrm{e}^{-i\omega_j t} a_j(0) + u_j(t) a(0) + \sum_{s \neq j} v_{js} a_s(0) \quad , \tag{9}$$

其中时间相关的系数

$$u(t) = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\gamma t - i\omega_c t} \quad ,$$
$$u_j(t) = -\zeta_j \mathrm{e}^{-i\omega_j t} \frac{1 - \mathrm{e}^{-i(\omega_c - \omega_j)t - \frac{1}{2}\gamma t}}{\omega_c - \omega_j - i\dfrac{\gamma}{2}} \quad , \tag{10}$$

式中 $\omega_c = \omega + \triangle\omega$ 代表重整化频率. 其他系数 $u_j(t)$ 和 $v_{js}(t)$ 比较复杂，这里不一一写出，可以参阅我们的论文[10]. 基于上述讨论可以知道，耗散方程中的布朗力 $f(t)$ 在一级近似下与坐标算符 $q(t)$ 可对易，对任意位势 $V(q)$ 仍可应用彭氏方法.

我们现在转换到薛定谔表象去分析耗散系统波函数的部分因子化结构. 让总系统开始处于因子化初态 $|\Psi(0)\rangle = |\varphi\rangle \prod_{j=1}^N |\varphi_j\rangle$，演化矩阵 $U(t)$ 可把 $|\Psi(0)\rangle$ 变为 t 时刻的波函数 $|\Psi(t)\rangle$. 通过多模相干态

$$|\lambda, \{\lambda_j\}\rangle = \exp\{\lambda a^\dagger(0) + \sum_j (\lambda_j a_j^\dagger(0) - h.c.)\}|0\rangle \quad , \tag{11}$$

$|\Psi(t)\rangle$ 可明显地表达为 $\Psi(\lambda, \{\lambda_j\}, t) = \langle \lambda, \{\lambda_j\} | \Psi(t)\rangle = \langle \Psi(0) | U^+(t) | \lambda, \{\lambda_j\}\rangle^*$，或者

$$\psi = \langle \Psi(0) | e^{[\lambda a^\dagger(t) + \sum_j \lambda_j a_j^\dagger(t)] - h.c.} |0\rangle$$
$$= \varphi[u(t)^* \lambda + \sum_j \lambda_j u_j(t)^*] \prod_{j=1}^N \varphi_j[\beta_j(t)] \quad , \tag{12}$$

其中 $\beta_j(t) = e^{i\omega_j t}\lambda_j + u_j(t)^* \lambda + \sum_{s(\neq j)} v_{s,j}(t)^* \lambda_s$. 显然，$\sum_j \lambda_j u_j(t)$ 与环境状态有关，代表布朗运动对系统波函数 $\varphi(u(t)\lambda)$ 的影响. 若它可以忽略不计（例如，系统初始时刻的波包宽度远大于布朗运动的特征宽度），且不考虑耦合的二阶项，则波函数

$$\Psi(\lambda,\{\lambda_j\},t) \approx \varphi(u(t)^*\lambda)\prod_{j=1}^{N}\varphi_j(e^{i\omega_j t}\lambda_j + v_j(t)^*\lambda) \tag{13}$$

是部分因子化的.不难验证，忽略布朗运动，系统部分的波函数 $\varphi(u(t)^*\lambda)$ 满足 Caldirora－Kanai 或彭桓武有效哈密顿量支配的薛定谔方程.

现在可以用我们建立的量子耗散因子化理论解释宏观物体波包定域化现象.如果布朗运动可以忽略，具有耗散的“自由粒子”运动可以用哈密顿量

$$H(t)=\frac{p^2}{2M}e^{-\eta t/M}\equiv\frac{p^2}{2M(t)}$$

描述，其中 η 为耗散系数.显然，它描述了一个变质量粒子的自由运动，即 $M(t)=Me^{\eta t/M}$.如果 $t=0$ 时，体系的初态是一个宽度为 d 的高斯波包，即

$$\psi(x,0)=\frac{1}{(2\pi d^2)^{\frac{1}{4}}}e^{ik_0x-\frac{x^2}{4d^2}}\quad, \tag{14}$$

则 $V(x)=0$ 的薛定谔方程

$$i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)=-\frac{e^{-\eta t/M}}{2M}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) \tag{15}$$

会给出 t 时刻的波函数

$$\Psi(x,t)=\frac{e^{ik_0x-iE_{k_0}t_\eta}}{(2\pi)^{\frac{1}{4}}\sqrt{d+it_\eta/(2Md)}}\cdot e^{-\frac{1}{4}(x-k_0t_\eta/M)^2\frac{1-it_\eta/(2Md^2)}{d^2+(t_\eta/(2Md))^2}}\quad, \tag{16}$$

其中 $t_\eta=M(1-e^{-\eta t/M})/\eta$ 称为耗散变形时间.当 $\eta\to0$ 时，$t_\eta\to t$.(16)式代表中心速度为 $(k_0/M)\exp(-\eta t/M)$、宽度为 $B(t)=\sqrt{d^2+(t_\eta/2Md)^2}$ 时的扩散波包.当 $t\to\infty$ 时，$t_\eta\to M/\eta$，波包宽度确实不再是无穷大，而是一个有限值：

$$B_{\lim}=\sqrt{d^2+\frac{1}{(2\eta d)^2}}\quad. \tag{17}$$

上述计算说明，环境的存在诱导出的量子耗散确实可以导致波包的空间局域化.这个发现为解决爱因斯坦当年关于宏观物体波包扩散问题提供了一种可能的物理方案.如图3所示，$P(x,t)=|\Psi(x,t)|^2$ 描述了耗散过程诱导的波包空间局域化，我们比较有耗散(图3(a))和无耗散(图3(b))情况下的波包扩散，发现耗散导致波包的空间局域化是十分明显的.从物理上讲，作为一个时间相关的波包，宏观物体波函数不是能量本征函数，而是很多平面波的叠加.在演化的过程中，每个波矢为 k 的平面波，会伴随着产生 $\varepsilon(k)=\hbar^2k^2/(2M)$ 的相位，这种色散关系保证了波包的相干扩散.环境的存在会破坏相干的位相关系，导致波包的空间局域化.

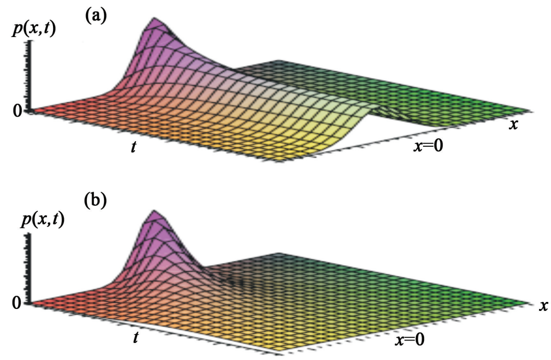

图3　量子耗散导致波包的空间局域化 (a)有耗散；(b)无耗散

4　量子退相干及其因子化理论

以上讨论了量子开系统的第一种开放形式：与环境交换能量.现在讨论具有交流信息特征的第二种开放形式：与环境交换信息.我自1992年开始的量子测量理论研究，主要关心第二种开放行为[4].我们在这方面的研究有多年的积累，使得后来能够很快地走向与信息科学交叉的领域，在量子信息的物理基础方面开展一系列的研究工作.

其实，彭先生很早就提倡和推进交叉学科的发展.这些做法，主要来自他在领导我国原子能事业、开展核应用研究工作中的深切体会.因为那些与大科学工程相关的基础研究，需要极其广泛的知识和多学科的交叉.彭先生认为，交叉学科内在地具备普遍性与特殊性的统一，是较容易取得突破的领域(吴岳良《在彭桓武院士科技思想座谈会暨“彭桓武星”命名仪式上的讲话》).我们正是在彭先生这种思想的启发和具体鼓励下开展量子信息物理研究的.

我们还是用 H_S 和 H_E 分别代表量子系统 S 及其环境 E 的哈密顿量，$V(S,E)$ 代表 S 和 E 的耦合.$[H_S,V(S,E)]=0$ 意味着系统和环境之间没有能量交换，由于 $[H_E,V(S,E)]\neq0$ 仍然会形成 E 和 S 的纠缠态，使得 E 和 S 的交换信息，其具体表现是导致量子系统的另一种退相干——退位相(dephasing).设 $|n\rangle$ 是 H_S 和 $V(S,E)$ 的共同本征函数，且 $H_S|n\rangle=E_n|n\rangle$，$V(S,E)|n\rangle=V_n(E)|n\rangle$ $(n=1,2,\cdots,N)$，其中 $V(S,E)$ 本征值 $V_n(E)$ 是依赖于环境的变量.用 $|E\rangle$ 代表环境的初态，则总系统 $(S+E)$ 的因子化初态 $|\Psi(0)\rangle=(\sum C_n|n\rangle)\otimes|E\rangle$ 将演化成一个纠缠态：$|\Psi(t)\rangle=\sum C_n|n\rangle\otimes|E_n(t)\rangle$，其中不同的环境态

$$|E_n(t)\rangle=e^{-i[E_n+H_E+V_n(E)]t}|E\rangle\equiv e^{-iE_nt-iH_nt}|E\rangle \tag{18}$$

与系统状态$|n\rangle$相关联，使得系统的约化密度矩阵

$$\rho_S = Tr_E(|\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|) = \sum |C_n|^2 |n\rangle\langle n| + \sum_{m\neq n} D_{mn}(t)|m\rangle\langle n| \quad (19)$$

的非对角项伴随着出现所谓的退相干因子[4,11]：

$$D_{mn}(t) = \langle E|e^{iH_m t}e^{-iH_n t}|E\rangle \quad , \quad (20)$$

我们的研究发现，当环境E具有某种因子化结构使得$H_n = \sum_{j=1}^{N} H_n(j)$，那么$D_{mn}(t)$的模具有如下因子化形式：

$$D = |D_{mn}(t)| = \prod_{j=1}^{N} |\langle E|e^{iH_m(j)t}e^{-iH_n(j)t}|E\rangle| \quad , \quad (21)$$

是N个小于1的正数的乘积. 在热力学极限($N\to\infty$)情况下，$D\to 0$，从而导致量子系统的退相干消失. 图4表现了N变大时退相干出现的趋势.

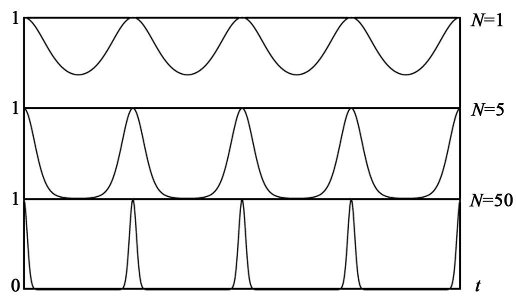

图4 大N极限下的量子退相干($N=1,5,50$)

上述因子化结构的发现能够给出薛定谔猫佯谬的可能解，帮助理解通常为什么不存在宏观物体的相干叠加. 一个诸如猫之类的宏观物体，必定由许许多多的微观粒子组成，它的少数的宏观的集体自由度(如质心自由度)代表了猫的生死；然而每一个粒子的微观自由度(如相对坐标)会与集体自由度耦合起来. 由于集体自由度通常具有慢变的时间尺度，它可以与快变的微观自由度绝热地分离，从而使得集体自由度发生退位相. 这时，可以用因子化的波函数描述实际的薛定谔猫[12,13].

$$|\mathrm{cat}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\text{死猫}\rangle\otimes\prod_{j=1}^{N}|D_j\rangle + |\text{活猫}\rangle\otimes\prod_{j=1}^{N}|L_j\rangle\right) \quad , \quad (22)$$

其中$|D_j\rangle$和$|L_j\rangle$($j=1,2,\cdots,N$)分别代表对应于猫的死和活的内部状态. 因此，当只关心猫的死活而非其内部状态如何，我们只须平均掉内部运动的效应，其约化密度矩阵取与(18)式相似的形式. 在热力学极限下，薛定谔猫的约化密度矩阵变为

$$\rho_{\mathrm{cat}} = \frac{1}{2}|\text{死猫}\rangle\langle\text{死猫}| + \frac{1}{2}|\text{活猫}\rangle\langle\text{活猫}| , \quad (23)$$

于是猫的死活只是一个概率事件，而与具体的量子测量无关. 从这个意义上讲，薛定谔猫佯谬出现，只是由于量子力学发展早期人们认识的局限性，人们当时没有意识到内部自由度的耦合作用. 而后来发展的量子退相干理论，对此给出了基本合理的解释. 我们以上讨论了暗含一个内部环境的观念，即内部相对自由度构成了集体自由度的内部环境，使得集体自由度发生量子退相干.

5 量子临界性增强退相干的量子混沌机制

以上关于环境诱导量子退相干的分析的核心，在于讨论何种情况下退相干因子变为零. 从退相干因子表达式可以看出，在不同态$|m\rangle$和$|n\rangle$上的量子系统，环境会产生不同的扰动(H_m和H_n)，虽然这些扰动的差别可能是很微小的($|H_m - H_n| \ll \varepsilon$)，但在足够大的环境中，足够长的时间演化会使得$|E_n\rangle$和$|E_m\rangle$变得正交. 这种对外部围绕的动力学敏感性描述正是量子混沌学研究的内容. 在量子混沌的研究中[14]，退相干因子的模被称为Loschmidt回音.

量子混沌现象可以和经典混沌相类比. 经典混沌可以简单地描述为所谓的"蝴蝶效应"：一个非线性系统初值条件的微小变化，会对未来系统的演化轨迹产生极大的影响. 一种通俗的说法是，南美丛林中的蝴蝶扇动一下翅膀，会在北美引起一场风暴. 但对量子系统而言，直接套用经典混沌动力学敏感性的描述是不合适的. 因为量子力学过程是幺正演化的，初态和末态通过幺正变换联系起来. 两个初态差别可以由它们的内积标志，而幺正演化不改变这个内积. 因而，对于量子混沌，要把"蝴蝶展翅"准确地描述为体系哈密顿量的微小差别. 这样，同样的初态经历了两个有微小差别的驱动，长时间以后会达到完全不同的末态(两个正交态)，就是说，这个量子系统是动力学敏感的. 可以用Loschmidt回音描述这种敏感性.

我们在这方面的一个有意义发现是[15](图5(a)，(b))，环境量子临界性会增强与之耦合的量子比特的退相干，而外部量子比特的退相干因子恰好是环境内在的Loschmidt回音. 也就是说，可以发生量子相变的临界系统，在量子相变点附近，动力学

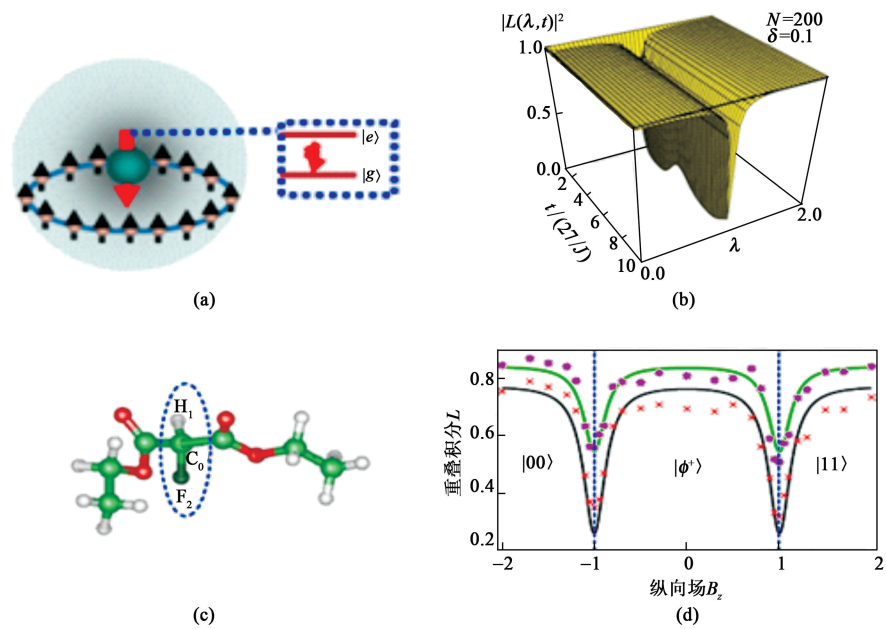

图 5 量子相变增强量子退相干的理论预言及其实验验证 (a) 在临界点 $\lambda=1$ 时，横场伊辛环境模型的量子临界性会增强，与之耦和的量子比特会出现退相干；(b) Loschmidt 回音(退相干因子的模平方)随时间 t 和相变参量 λ 的变化(图(a)和(b)取自 Phys. Rev. Lett.,2006,96:140604)；(c) 实验中使用的 Diethylfluoromalonate 的化学结构. 标记出的部分代表探测比特；(d) NMR 实验中显示的 Loschmidt 回音(重叠积分的模平方)随相变参量 λ 的变化(λ 由纵向电场 B_z 决定)；((c)图和(d)图取自 Phys. Rev. Lett.,2008,100:100501)

是敏感的. 这个效应用来探测量子系统的微小变化，反映量子测量放大作用的典型特征. 我们研究的具体环境模型是一维的横场 Ising 自旋链，它具有典型的量子临界行为. 我们具体写下横场 Ising 自旋链哈密顿量方程：

$$H_E=-J\sum_j(\sigma_j^z\sigma_{j+1}^z+\lambda\sigma_j^x)\quad. \qquad (24)$$

在零温情况下，当对于外部横场耦合较强时，体系呈现出自旋横场极化的有序相. 而 Ising 耦合很强时，体系趋向一种自旋一致的磁畴序. 这两种序竞争，在 $N\to\infty$ 热力学极限，在临界点 $g=1$ 上出现动力学不稳定性. 我们研究自旋链量子临界行为对量子态演化的影响，涉及到量子自旋链传递量子态[16—19]的一个基本的问题：强关联系统的特点是存在能隙，而能级交叉与量子相变的行为有关. 在操纵自旋链的耦合参数进行量子态传输时，外参数改变有可能扫过能级交叉点或量子相变临界点，从而会对量子态传输产生致命的影响.

为了探测量子相变临界点上的动力学不稳定，我们让一个外部的量子比特和整个自旋链(周期边界条件的自旋链可以看成一个自旋环，如图 5(a)所示)均匀耦合，即整个自旋链哈密顿量为

$$H_I=-J\sum_j\lambda\sigma^z\sigma_j^x\quad. \qquad (25)$$

这时处于不同量子态 $|1\rangle$ 和 $|0\rangle$ 的量子比特对临界环境产生不同的扰动，从而使得二者的相干叠加态发生量子退相干. 我们发现，在量子临界点，Ising 系统确实具有动力学不稳定性，外界扰动的微小差别可以使得 Ising 自旋系统长时间演化到两个差别很大的状态上，发生所谓的量子混沌现象. 与之对应，和 Ising 系统耦合的量子比特会发生量子退相干增强的现象，即用 Loschmidt 回声描述的动力学约化密度矩阵的非对角项迅速消逝(图 5(b)). 需要指出的是，量子相变和对称性自发破缺有关，这启示我们量子测量、量子退相干可能与对称性自发破缺有深刻的联系. 2008 年，德国 Suter 的研究小组利用核磁共振实验[19]检验了我们预言的退相干增强现象(见图 5(c)，(d)). 2009 年，这个工作还进一步启发了加拿大 Laflamme 小组直接观察量子相变临界现象的新实验[20].

我们关于量子相变增强量子退相干工作，由于联系了量子测量、量子混沌和凝聚态物理等不同物理领域，引起不同领域科学家的重视，并引发一系列后续的工作[21]. 事实上，2006 年 5 月文章发表至今已有 100 余次的引用. 在 2006 年初西班牙召开的量子退相干会议上，有系列报告专门介绍了这个工作. 在这个工作的基础上，意大利的研究小组和香港中文大学研究小组以及我们自己，考虑到 Loschmidt 回声傅里叶变换的领头项就是系统演化的保真度(fidelity)等，由此人们开展了一系列由保真度描述

量子相变和经典相变的工作,在这方向的研究工作的发展还在进行中.

总之,量子开系统理论是一个基础性的、并有着应用前景的科学研究课题. 它不仅与量子力学的基本问题有关,而且还与量子物理的实际应用中的量子退相干问题密切联系.

致谢 本文是在戴元本、朱重远和刘寄星三位先生的帮助下完成的,在此表示感谢,同时也感谢过去20年的诸多合作者.

参考文献

[1] 彭桓武. 物理学报,1980,29:1084[Peng H W. Acta Physica Sinica,1980,29:1084 (in Chinese)]

[2] Heitler W,Peng H W. Phys. Rev., 1942, 62 : 81; Dublin Institute for Advanced Studies, Dublin Ireland, Received 22 May 1942; Heitler W, Peng H W. Proc. Camb. Phil. Soc., 1942, 38 : 296 (参阅戴元本在2008年"量子力学在中国"会议上的学术报告)

[3] Kanai E. Prog. Theor. Phys., 1948, 3:440

[4] Caldirola P, Cimento N. Naovo Cimento,1941,18:393

[5] Sun C P. Phys. Rev. A, 1993,48 (2):898

[6] Yu L H, Sun C P. Phys. Rev. A, 1994,49 (1): 592

[7] Caldeira A O,Leggett A J. Ann. Phys. (N. Y.), 1983, 149: 374

[8] Sun C P,Yu L H. Phys. Rev. A, 1995,51 (3):1845

[9] Sun C P, Zhan H, Liu X F. Phys. Rev. A, 1998,58 (3):3900

[10] Sun C P, Gao Y B, Dong H F *et al*. Phys. Rev. E,1998,57 (4):3900

[11] Sun C P, Yi X X, Liu X J. Fortschritte Phys. －Prog. Phys. 1995, 43 (7): 585

[12] Sun C P, Liu X F, Zhou D L *et al*. Phys. Rev. A,2001,64(1): 6301

[13] Sun C P, Zhou D L, Yu S X *et al*. Eur. Phys. J. D 2001, 13 (1):145

[14] Peres A. Quantum Theory: Concepts and Methods. Kluwer Academic Publishers ISBN 0792336321. 2002

[15] Quan H T, Song Z, Liu X F *et al*. Phys. Rev. Lett., 2006,96 (14):140604

[16] Li Y, Shi T, Chen B *et al*. Phys. Rev. A, 2005, 71 (2):022301

[17] Qian X F, Li Y, Song Z *et al*. Physical Review A,2005, 72 (6) :062329

[18] Shi T, Li Y, Song Z *et al*. Phys. Rev. A, 2005,71 (3): 032309

[19] Song Z,Sun C P. Low Temp. Phys., 2005, 31 (8—9): 686

[20] Zhang J, Peng X, Rajendran N *et al*. Phys. Rev. Lett., 2008, 100: 100501

[21] Zhang J F, Cucchiett F M, Chandrashekar C M *et al*. Phys. Rev. A,2009, 79: 012305