Example 3 — 量子电路的数学推导

1. 门的代数表示

- 单比特 Hadamard 门 `H`：

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1 \\ 1 & -1\end{pmatrix},$$

作用为

$$H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), \qquad H|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle).$$

- 两比特 CNOT（control = 第一个比特，target = 第二个比特），对计算基的作用为

注意这里的加法是在2阶循环群下的，即 1+1 = 0。

$$\mathrm{CNOT}\,|a, b\rangle = |a,\, a \oplus b\rangle, \qquad a, b \in \{0, 1\},$$

在基序

$$\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$$

下的矩阵表示为

$$\mathrm{CNOT} = \begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0\end{pmatrix}.$$

也可写成投影形式：

$$\mathrm{CNOT} = |0\rangle\langle 0| \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes X,$$

其中

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

整个电路的算符（先在第 1 比特施加 H，再施加 CNOT）：

$$U = \mathrm{CNOT} \cdot (H \otimes I).$$

---

2. 逐步代数作用（两个关键输入态）

情形 A：输入

$$|00\rangle$$

先施加

$$H \otimes I$$

------->

$$(H \otimes I)\,|00\rangle = (H|0\rangle) \otimes |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |10\rangle).$$

再施加 CNOT（

$$|00\rangle \mapsto |00\rangle,\ |10\rangle \mapsto |11\rangle$$

）---------->

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

这是标准的 Bell 态（记作

$$|\Phi^+\rangle$$

），为最大纠缠态。

情形 B：输入

$$|11\rangle$$

先施加

$$H\otimes I$$

$$(H\otimes I)\,|11\rangle=(H|1\rangle)\otimes|1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle-|1\rangle)\otimes|1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle-|11\rangle).$$

再施加 CNOT（

$$|01\rangle\mapsto|01\rangle,\ |11\rangle\mapsto|10\rangle$$

）：

$$U|11\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle-|10\rangle).$$

该态同样为最大纠缠的成员（Bell 态家族的一员）。

---

3. 为什么产生纠缠（Schmidt 分解与还原密度矩阵）

- 对

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

  ，其 Schmidt 分解即为：

  $$|\Phi^+\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\,|0\rangle_A\otimes|0\rangle_B+\frac{1}{\sqrt{2}}\,|1\rangle_A\otimes|1\rangle_B.$$

兩個非零的 Schmidt 系數均為 $1/\sqrt2$，因此為最大纠缠。

- 还原密度矩阵（对 B 做部分迹）：

  $$\rho=|\Phi^+\rangle\langle\Phi^+|,\qquad \rho_A=\mathrm{Tr}_B(\rho)=\frac{1}{2}|0\rangle\langle 0|+\frac{1}{2}|1\rangle\langle 1|=\frac{1}{2}I_2.$$

  $$\rho_A$$

为完全混合态，说明子系统 A 的态没有纯态信息，因此系统为最大纠缠。

---

4. 直观机制（控制-翻转如何把局部叠加转为纠缠）

若控制比特处于叠加

$$\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

，目标比特为

$$|b\rangle$$

，则：

$$\mathrm{CNOT}\big[(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) \otimes |b\rangle\big] = \alpha|0, b\rangle + \beta|1, b \oplus 1\rangle.$$

该线性组合通常不能写成簡單的張量積，因此產生纠缠。

在本例，H 把控制比特变为等幅叠加，CNOT 根据控制位条件把两个分量映射到不同目标基，从而生成纠缠态。

---

5. 张量网络视角（门→张量，连线→指标收缩）

- 每个量子门可以视为局部张量：
  - 单比特门 H：秩-2 张量 $H^{i'}_{i}$（输入索引 i，输出索引 i'）。
  - CNOT：秩-4 张量 $U^{i'j'}_{ij}$（输入索引 i,j，输出索引 i',j'），其分量为

$$U^{i'j'}_{ij} = \delta_{i',i}\,\delta_{j',\,i\oplus j}.$$

- 电路按时间顺序把这些张量连接（输出索引与下一门的输入索引相连），这些连线对应对相应指标求和（收缩），最终将初始态张量与电路张量收缩得到输出向量。
- 产生纠缠即对应于输出张量无法分解为两个独立外露腿的张量积。

---

6. 结论要点

- 代数上直接计算得到：

$$\mathrm{CNOT}(H\otimes I)|00\rangle=\frac{|00\rangle+|11\rangle}{\sqrt{2}},\qquad \mathrm{CNOT}(H\otimes I)|11\rangle=\frac{|01\rangle-|10\rangle}{\sqrt{2}}.$$

- Hadamard 在控制比特上产生叠加；CNOT 将该叠加的不同分量条件性地映射到目标，从而生成纠缠。
- 从张量网络视角，门是局部张量、连线是收缩，电路就是张量网络的具体实例；纠缠对应输出张量不可分解。