(一) 量子力学的公理

17.11.4 量子力学的八条公理

A1. 对于惯性参考系 $\mathscr{I}$ 中的量子系统 S，在任意时刻，实验上可以检验的命题的集合与可分复 Hilbert 空间 H_S 上的正交投影算符的格子 $\mathscr{L}(\mathsf{H}_S)$ 之间存在双射。称 $\mathscr{L}(\mathsf{H}_S)$ 为 S 的基本命题的逻辑(logic of elementary propositions)。

A2. 系统 S 配备了 Hilbert 空间 H_S，S 在 t 时刻的量子态 ρ 是 H_S 上的迹为 1 的正定迹类算算符。命题 $P \in \mathscr{L}(\mathsf{H}_S)$ 为真的概率是 $\mathrm{tr}(\rho P)$。

A3. (测量公理) 在 T 时刻，系统 S 处于状态 ρ，测得命题 P 为真，则测量后瞬间，系统处于状态

$$\rho_P := \frac{P\rho P}{\mathrm{tr}(\rho P)}$$

测量公理可以从 PVM 推广为 POVM，参见第 27.3.1节。

A4. 系统 S 的每个可观测量[3] A 都由 $\mathbb{R}$ 上的一个投影算符值测度 $P^{(A)}$ 描述，任取 $\mathbb{R}$ 中的 Borel 集 E，有，$P^{(A)}(E)$ 对应命题，A 的测量结果处在 E 中。

A5. 非相对论性的有质量、无自旋粒子配备了位置、动量算符。给定了位置和动量算符的形式后，可以导出正则对易关系 (CCR) 和海森堡不确定性原理 (作为定理)，根据定理17.5，也可以认为 CCR 是更抽象和本质的。

A6. 时间演化，引入哈密顿量 H。$\sigma(H)$ 有下界。

A7. 复合系统的 Hilbert 空间是子系统的 Hilbert 空间的直积。

A8. 粒子的全同性：对全同粒子组成的系统，只有关于置换不变的命题才是有意义的。若 n 个全同粒子组成符合系统 S，则 S 的可观测量 A 满足

$$U_\sigma A U_\sigma^{-1} = A, \quad 任取 \sigma \in \mathscr{P}_n$$

其中 $\mathscr{P}_n$ 是 n 阶置换群，U_σ 是 $\mathscr{P}_n$ 的忠实表示。

(二) 线性空间

定义 5.1 (线性空间和子空间)

设 V 是非空集合, 如果

- 在 V 中有二元运算 $+$, 称为加法, $(V,+)$ 构成 Abel 群，即: 对任意 $\alpha,\beta \in V$, 存在唯一的 $\gamma \in V$ 与之对应, 称为 α 与 β 的和, 记为 $\gamma = \alpha + \beta$. 加法满足:
  - (加法结合律) $(\alpha+\beta)+\gamma = \alpha+(\beta+\gamma)$, $\quad (\forall \alpha,\beta,\gamma \in V)$;
  - (加法交换律) $\alpha+\beta = \beta+\alpha$, $\quad (\forall \alpha,\beta \in V)$;
  - (零元存在性) $\exists 0 \in V$, 使得: $\forall \alpha \in V$ 有 $\alpha + 0 = \alpha$. 称 0 为 V 的零元素;
  - (负元存在性) $\forall \alpha \in V, \exists \beta \in V$, 使得 $\alpha+\beta = 0$. 称 β 为 α 的负元;
- 在 $\mathbb{F}$ 和 V 之间有运算, 称为数乘: 对任意 $c \in \mathbb{F}$, 任意 $\alpha \in V$, 存在唯一的 $\delta \in V$ 与之对应, 称为 c 与 α 的数乘, 记为 $\delta = c\alpha = c\cdot\alpha$. 数乘满足
  - (二次数乘律) $a(b\alpha) = (ab)\alpha$, $\quad (\forall a,b \in \mathbb{F}, \forall \alpha \in V)$;
  - (单位数乘律) $1\cdot\alpha = \alpha$, $\quad (\forall \alpha \in V)$;
- 加法和数乘还满足
  - (数对元的分配律) $c(\alpha+\beta) = c\alpha + c\beta$, $\quad (\forall c \in \mathbb{F}, \forall \alpha,\beta \in V)$;
  - (元对数的分配律) $(a+b)\alpha = a\alpha + b\alpha$, $\quad (\forall a,b \in \mathbb{F}, \forall \alpha \in V)$,

则称 V 是数域 $\mathbb{F}$ 上的线性空间或向量空间, 任意元素 $\alpha \in V$ 称为向量。当 $\mathbb{F} = \mathbb{R}$ 时, 称 V 是实线性空间; 当 $\mathbb{F} = \mathbb{C}$ 时, 称 V 是复线性空间.

设 W 是 V 的非空子集, 如果 W 对 V 中的加法和数乘运算封闭，则称 W 是 V 的子线性空间。

线性代数的基本概念是向量空间（vector space）。我们最感兴趣的向量空间是所有 n 元复数组成的向量空间 $\mathbb{C}^n$。向量空间的元素称为向量，我们有时用列矩阵记号

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_n \end{bmatrix} \tag{2.1}$$

来表示向量。存在加法运算，可以把一对向量变成其他向量。$\mathbb{C}^n$ 上的向量加法运算定义为

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} z_1' \\ \vdots \\ z_n' \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} z_1 + z_1' \\ \vdots \\ z_n + z_n' \end{bmatrix} \tag{2.2}$$

其中，右边的加法运算就是通常的复数加法。进一步，向量空间中存在标量乘运算。$\mathbb{C}^n$ 上的这个运算定义为

$$z \begin{bmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_n \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} zz_1 \\ \vdots \\ zz_n \end{bmatrix} \tag{2.3}$$

其中，z 是标量，也就是复数，并且右边的乘法就是通常的复数乘法。物理学家有时把复数称为 c 数。

符号	描述
z^*	复数 z 的复共轭。$(1+\mathrm{i})^* = 1 - \mathrm{i}$
$\|\psi\rangle$	向量，也称为 ket
$\langle\psi\|$	$\|\psi\rangle$ 的对偶向量，也称为 bra
$\langle\varphi\|\psi\rangle$	向量 $\|\varphi\rangle$ 和 $\|\psi\rangle$ 的内积
$\|\varphi\rangle \otimes \|\psi\rangle$	$\|\varphi\rangle$ 和 $\|\psi\rangle$ 的张量积
$\|\varphi\rangle\|\psi\rangle$	$\|\varphi\rangle$ 和 $\|\psi\rangle$ 张量积的缩写
A^*	矩阵 A 的复共轭
A^{T}	矩阵 A 的转置
$A^\dagger$	矩阵 A 的厄米共轭或伴随，$A^\dagger = (A^{\mathrm{T}})^*$。$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}^\dagger = \begin{bmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{bmatrix}$
$\langle\varphi\|A\|\psi\rangle$	$\|\varphi\rangle$ 和 $A\|\psi\rangle$ 的内积。等价地，$A^\dagger\|\varphi\rangle$ 和 $\|\psi\rangle$ 的内积

图 2-1　一些线性代数概念在量子力学中的标准记号的总结。这些就是 Dirac 记号

对于非零向量集 $|v_1\rangle, \cdots, |v_n\rangle$，若存在一个复数集合 $a_1, \cdots, a_n$，其中至少一个 $a_i \neq 0$，使得

$$a_1|v_1\rangle + a_2|v_2\rangle + \cdots + a_n|v_n\rangle = 0 \tag{2.9}$$

则称其是线性相关的。若它不是线性相关的，则称其线性无关。可以证明，任意两个张成向量空间的无关组所含元素的个数是相同的。我们称这种集合为向量空间 V 的一组基。进一步讲，这种基总是存在的。基中的元素个数称为向量空间的维数。本书中我们仅对有限维向量空间感兴趣。在无限维向量空间中有许多有趣和困难的问题。我们不需要担心这些问题。

(三) 线性映射(算子)和线性变换

定义 5.2 (线性映射和同构)

设 V 和 W 是 $\mathbb{F}$ 上的线性空间, 如果映射 $\varphi: V \to W$ 满足

(i) (保加法) $\varphi(\alpha+\beta)=\varphi(\alpha)+\varphi(\beta)$, $\quad \forall \alpha, \beta \in V$;

(ii) (保数乘) $\varphi(k\alpha)=k\varphi(\alpha)$, $\quad \forall \alpha \in V, \forall k \in \mathbb{F}$, 则称 φ 是 V 到 W 的线性映射. 称线性映射 $\varphi: V \to V$ 为 V 上的线性变换, 称线性映射 $\varphi: V \to \mathbb{F}$ 为 V 上的线性函数.

如果 φ 为双射, 则称 φ 是同构映射, 简称为同构. 此时称 V 和 W 同构, 记为 $V \cong W$.

笔记 线性映射保持了线性空间的结构，是线性空间之间的“同态”。

线性映射 $\mathscr{A} \in \mathcal{L}(V, W)$ 满足

$$\begin{cases} \mathscr{A}(\alpha_1) = a_{11}\beta_1 + a_{21}\beta_2 + \cdots + a_{m1}\beta_m \\ \mathscr{A}(\alpha_2) = a_{12}\beta_1 + a_{22}\beta_2 + \cdots + a_{m2}\beta_m \\ \qquad \vdots \\ \mathscr{A}(\alpha_n) = a_{1n}\beta_1 + a_{2n}\beta_2 + \cdots + a_{mn}\beta_m \end{cases}$$

其中 $\dim V = n, \dim W = m$。记 $\mathscr{A}$ 的矩阵为 A，则有

$$\mathscr{A}(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n) = (\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_m) A$$

简记为 $\mathscr{A}(\alpha_j) = \beta_i a_{ij}$。

用狄拉克符号。

几何与代数的联系。

本征值和本征向量

(四) 内积空间

定义 0.4 (内积空间)

设 X 是复线性空间, 映射 $\langle\cdot,\cdot\rangle: \mathsf{X}\times\mathsf{X} \to \mathbb{C}$ 称为内积, (X, S) 称为内积空间, 如果

- (正性) $\langle u, u\rangle \geq 0$ 任取 $u \in \mathsf{X}$
- (第二分量线性) $\langle u, \alpha v + \beta w\rangle = \alpha\langle u, v\rangle + \beta\langle u, w\rangle$ 任取 $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ 和 $u, v, w \in \mathsf{X}$;
- (第一分量共轭线性) $\langle u, v\rangle = \overline{\langle v, u\rangle}$ 任取 $u, v \in \mathsf{X}$;
- (正定性) $\langle u, u\rangle = 0 \Rightarrow u = \mathbf{0}$, 任取 $u \in \mathsf{X}$.

定义 0.5 (等距映射 (Isometry))

设 $(\mathsf{X}, S_{\mathsf{X}}), (\mathsf{Y}, S_{\mathsf{Y}})$ 是内积空间. 线性映射 $L: \mathsf{X} \to \mathsf{Y}$ 称为等距映射(isometry) 如果

$$S_{\mathsf{Y}}(L(x), L(y)) = S_{\mathsf{X}}(x, y) \text{ for any } x, y \in \mathsf{X}.$$

如果等距映射 $L: \mathsf{X} \to \mathsf{Y}$ 是满射，称其为内积空间的同构。

幺正变换：Hilbert 空间之间的同构。

$$(U|v\rangle, U|w\rangle) = \langle v|U^\dagger U|w\rangle = \langle v|I|w\rangle = \langle v|w\rangle$$

内积的例子：

$$((y_1,\cdots,y_n),(z_1,\cdots,z_n)) \equiv \sum_i y_i^* z_i = [y_1^*,\cdots,y_n^*]\begin{bmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_n \end{bmatrix}$$

定理 0.1 (Riesz[Moretti2017])

设 $(\mathsf{H},\langle|\rangle)$ 是 Hilbert 空间。对任意的连续线性泛函 $f:\mathsf{H}\to\mathbb{C}$ 存在唯一的元素 $y_f\in\mathsf{H}$ 满足

$$f(x)=\langle y_f,x\rangle \quad \forall x\in\mathsf{H}.$$

映射 $\mathsf{H}'\ni f\mapsto y_f\in\mathsf{H}$ 是双射。

2.1.6 伴随和厄米算子

假设 A 是希尔伯特空间 V 上的任意一个线性算子。事实上在 V 上存在一个唯一的线性算子 $A^\dagger$，满足对所有的向量 $|v\rangle,|w\rangle\in V$ 都有

$$(|v\rangle,A|w\rangle)=(A^\dagger|v\rangle,|w\rangle) \tag{2.32}$$

这个线性算子称为 A 算子的伴随（adjoint）或厄米共轭（Hermitian conjugate）。根据定义易知 $(AB)^\dagger=B^\dagger A^\dagger$。一般地，如果 $|v\rangle$ 是一个向量，那么我们定义 $|v\rangle^\dagger\equiv\langle v|$。根据这个定义不难看出 $(A|v\rangle)^\dagger=\langle v|A^\dagger$。

2.32 的证明。证明伴随就是共轭转置。

用内积表示线性映射

有一种表示线性算子的有用方式，充分地利用了内积，称为外积（outer product）表示。假设 $|v\rangle$ 是内积空间 V 的一个向量，$|w\rangle$ 是内积空间 W 的一个向量。定义 $|w\rangle\langle v|$ 为从 V 到 W 的一个线性算子，其作用为

$$(|w\rangle\langle v|)(|v'\rangle)\equiv|w\rangle\langle v|v'\rangle=\langle v|v'\rangle|w\rangle \tag{2.20}$$

这个方程与我们的记号约定完美吻合，表达式 $|w\rangle\langle v|v'\rangle$ 可能含有以下两种含义之一：我们用它表示算子 $|w\rangle\langle v|$ 作用在 $|v'\rangle$ 上的结果，也可以解释为 $|w\rangle$ 被一个复数 $\langle v|v'\rangle$ 相乘。我们选择的定义使得这两种潜在意思是一致的，事实上我们通过后者定义了前者！

完备性关系：

标准正交基 orthonormal basis ONB

外积记号的有用性可以从标准正交向量满足的完备性关系中看清楚。令 $|i\rangle$ 为向量空间 V 的任意一组标准正交基，那么任意向量 $|v\rangle$ 可以写为 $|v\rangle=\sum v_i|i\rangle$，$v_i$ 是一组复数。注意到 $\langle i|v\rangle=v_i$，因此

$$\left(\sum_i|i\rangle\langle i|\right)|v\rangle=\sum_i|i\rangle\langle i|v\rangle=\sum_i v_i|i\rangle=|v\rangle \tag{2.21}$$

由于最后的等式对于任意的 $|v\rangle$ 成立，这等于说

$$\sum_i|i\rangle\langle i|=I \tag{2.22}$$

投影算符：做两次等于做一次。正交投影算符：投影+厄米

$$P\equiv\sum_{i=1}^{k}|i\rangle\langle i|$$

$$Px=\sum_{u\in N}(u|x)u\,,\quad x\in \mathsf{H}\,.$$

正交补：$Q\equiv I-P$。

定义 0.10 (正规变换)

设 $\mathscr{A}:V\longrightarrow V$ 是 Hilbert 空间 V 上的线性变换，如果 $\mathscr{A}$ 有伴随变换，且 $\mathscr{A}\mathscr{A}^\dagger=\mathscr{A}^\dagger\mathscr{A}$，则称 $\mathscr{A}$ 是正规变换；

设矩阵 $A\in\mathbb{F}^{n\times n}$，如果有 $AA^\dagger=A^\dagger A$，则称矩阵 A 是正规方阵.

证明：正规阵可以被幺正对角化。

习题 2.35（泡利矩阵的指数） 设 $\vec{v}$ 是任意的三维实单位向量，θ 是一个实数。证明：

$$\exp(\mathrm{i}\theta\vec{v}\cdot\vec{\sigma})=\cos(\theta)I+\mathrm{i}\sin(\theta)\vec{v}\cdot\vec{\sigma} \tag{2.58}$$

其中 $\vec{v}\cdot\vec{\sigma}\equiv\sum_{i=1}^{3}v_i\sigma_i$。这个习题会在问题 2.1 中得到推广。

(五) 奇异值分解和极分解

定理 0.2 (极分解)

设 H 是 Hilbert 空间 $A\in\mathfrak{B}(\mathsf{H})$.

- 唯一存在 $P,U\in\mathfrak{B}(\mathsf{H})$ 满足

- A 有极分解 $A=UP$
  - P 是正算符,
  - U 是 $\mathrm{Ran}(P)$ 上的等距算符,
  - U 是 $\mathrm{Ker}(P)$ 上的零算符。
- $P=|A|:=\sqrt{A^\dagger A}$, 因此 $\mathrm{Ker}(U)=\mathrm{Ker}(A)=\mathrm{Ker}(P)=[\mathrm{Ran}(P)]^\perp$.
- 若 A 是双射, 则 $U=A|A|^{-1}$, 极分解写为 $A=(A|A|^{-1})|A|$

笔记 称 $|A|:=\sqrt{A^\dagger A}$ 为有界算符 $A\in\mathfrak{B}(\mathrm{H})$ 的模。

定理 0.3 (奇异值分解)

$$A=\sum_{\lambda\in\mathrm{sing}(A)}\sum_{i=1}^{m_\lambda}\lambda|v_{\lambda,i}\rangle\langle u_{\lambda,i}|$$

证明: 做极分解可得

$$A=U|A|=\sum_{\lambda\in\mathrm{sing}(A)}\lambda UP_\lambda=\sum_{\lambda\in\mathrm{sing}(A)}\sum_{i=1}^{m_\lambda}\lambda|v_{\lambda,i}\rangle\langle u_{\lambda,i}|$$

□

笔记 矩阵 $A\in\mathbb{C}^{m\times n}(m\geqslant n)$ 的奇异值分解的步骤

- 将 A^*A 幺正对角化

$$Q^{-1}A^*AQ=\mathrm{diag}\,(\lambda_1,\lambda_2,\ldots,\lambda_r,0,\ldots,0)\,,\quad \lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\lambda_r>0$$

- 设 $Q=(q_1,q_2,\ldots,q_n)\,,\mu_i=\sqrt{\lambda_i},p_i=\mu_i^{-1}Aq_i\in\mathbb{C}^m\,(\in\mathbb{R}^m)\,,i=1,2,\ldots,r;$
- 将 $p_1,\ldots,p_r$ 扩充为 $\mathbb{C}^m\,(\mathbb{R}^m)$ 的 ONB $p_1,\ldots,p_r,p_{r+1},\ldots,p_m;$
- 令 $P=(p_1,p_2,\ldots,p_m)$, 则有 A 的奇异值分解 $A=P\begin{pmatrix}D&O\\O&O\end{pmatrix}Q^*$, 其中 $D=\mathrm{diag}\,(\mu_1,\mu_2,\ldots,\mu_r)$.

根据操作步骤可以检验奇异值分解是成立的

$$\begin{aligned}&P\begin{pmatrix}D&O\\O&O\end{pmatrix}Q^\dagger\\&=A\left(\frac{1}{\mu_1}q_1,\cdots,\frac{1}{\mu_r}q_r,q_{r+1},\ldots,q_n\right)\begin{pmatrix}\mu_1&&\\&\ddots\;\mu_r&\\&&O\end{pmatrix}\begin{pmatrix}q_1^\dagger\\\vdots\\q_n^\dagger\end{pmatrix}\\&=A\end{aligned}$$

且 P 满足 $P^\dagger P=\mathbb{I}_m$

(六) 张量积

定义 5.7 (线性映射的张量积)

$$\mathscr{A}_1 \otimes \mathscr{A}_2 : V_1 \otimes V_2 \longrightarrow W_1 \otimes W_2,$$

使得

$$(\mathscr{A}_1 \otimes \mathscr{A}_2)(\alpha_1 \otimes \alpha_2) = \mathscr{A}_1(\alpha_1) \otimes \mathscr{A}_2(\alpha_2), \quad \forall \alpha_1 \in V_1, \forall \alpha_2 \in V_2.$$

称 $\mathscr{A}_1 \otimes \mathscr{A}_2$ 为线性映射 $\mathscr{A}_1$ 和 $\mathscr{A}_2$ 的张量积。

下面罗列一些关于矩阵张量积（克罗内克积）的性质 [134, Sec.7.12]

- 设 $A = (a_{ij})_{m\times n} \in \mathbb{F}^{m\times n}$ 和矩阵 $B = (b_{ij})_{p\times q} \in \mathbb{F}^{p\times q}$，则

$$A \otimes B := \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \cdots & a_{1n}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \cdots & a_{2n}B \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1}B & a_{m2}B & \cdots & a_{mn}B \end{pmatrix} \in \mathbb{F}^{mp\times nq}$$

- 基本运算性质
  - $A \otimes (B+C) = A \otimes B + A \otimes C, (B+C) \otimes A = B \otimes A + C \otimes A;$
  - $A \otimes (kB) = (kA) \otimes B = kA \otimes B;$
  - $(A \otimes B) \otimes C = A \otimes (B \otimes C);$
  - $(A \otimes B)(C \otimes D) = (AC) \otimes (BD);$
  - 设 A, B 为可逆方阵, 则 $A \otimes B$ 也可逆, 且 $(A \otimes B)^{-1} = A^{-1} \otimes B^{-1}$.
- $|A \otimes B| = |A|^m |B|^n$
- $\mathrm{Tr}(A \otimes B) = \mathrm{Tr}(A)\,\mathrm{Tr}(B)$
- 设 $A \in \mathbb{F}^{n\times n}$ 和 $B \in \mathbb{F}^{m\times m}$ 的复特征值分别是 $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ 和 $\mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_m$，则
  - $A \otimes B$ 的复特征值是 $\lambda_i \mu_j$, $\quad 1 \leqslant i \leqslant n, 1 \leqslant j \leqslant m$
  - $A \otimes \mathbb{I}_m + \mathbb{I}_n \otimes B$ 的复特征值是 $\lambda_i + \mu_j$, $\quad 1 \leqslant i \leqslant n, 1 \leqslant j \leqslant m$

(七) 量子态的描述。

希尔伯特空间：完备的内积空间。

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

$$\mathrm{Cos}\left[\frac{\theta}{2}\right]|0\rangle + e^{i\phi}|1\rangle\,\mathrm{Sin}\left[\frac{\theta}{2}\right]$$

$$|00\rangle a_{00} + |01\rangle a_{01} + |10\rangle a_{10} + |11\rangle a_{11}$$

$$|00\rangle \to \begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix}, |01\rangle \to \begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix}, |10\rangle \to \begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix}, |11\rangle \to \begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}$$

密度算子语言为描述状态不完全已知的量子系统提供了一种方便的方法。更准确地说，假设一个量子系统以概率 p_i 处于多个状态 $|\psi_i\rangle$ 之一，其中 i 是一个指标，我们将把 $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$ 称为一

个纯态系综（ensemble of pure states）。系统的密度算子定义为

$$\rho \equiv \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \tag{2.138}$$

定理 2.6（密度矩阵系综中的酉自由度） 向量组 $|\widetilde{\psi}_i\rangle$ 和 $|\widetilde{\varphi}_j\rangle$ 生成相同的密度矩阵，当且仅当

$$|\widetilde{\psi}_i\rangle = \sum_j u_{ij} |\widetilde{\varphi}_j\rangle \tag{2.166}$$

其中 u_{ij} 是一个带指标 i 和 j 的复酉矩阵，并且我们在向量集合 $|\widetilde{\psi}_i\rangle$ 和 $|\widetilde{\varphi}_j\rangle$ 中向量较少的一个里面补充若干 0 向量，以使两个集合的向量个数相等。

A1. 对于惯性参考系 $\mathscr{I}$ 中的量子系统 S，在任意时刻，实验上可以检验的命题的集合与可分复 Hilbert 空间 H_S 上的正交投影算符的格子 $\mathscr{L}(\mathsf{H}_S)$ 之间存在双射。称 $\mathscr{L}(\mathsf{H}_S)$ 为 S 的基本命题的逻辑 (logic of elementary propositions)。

A2. 系统 S 配备了 Hilbert 空间 H_S，S 在 t 时刻的量子态 ρ 是 H_S 上的迹为 1 的正定迹类算算符。命题 $P \in \mathscr{L}(\mathsf{H}_S)$ 为真的概率是 $\mathrm{tr}(\rho P)$。

(八) 封闭量子系统的演化

$$|\psi'\rangle = U|\psi\rangle \qquad \mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\,|\psi\rangle}{\mathrm{d}\,t} = H|\psi\rangle$$

$$|\psi(t_2)\rangle = \exp\left[\frac{-\mathrm{i}H(t_2-t_1)}{\hbar}\right]|\psi(t_1)\rangle = U(t_1,t_2)|\psi(t_1)\rangle \tag{2.90}$$

$$U(t_1,t_2) \equiv \exp\left[\frac{-\mathrm{i}H(t_2-t_1)}{\hbar}\right] \tag{2.91}$$

$$\rho \equiv \sum_i p_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i| \xrightarrow{U} \sum_i p_i U|\psi_i\rangle\langle\psi_i|U^\dagger = U\rho U^\dagger \tag{2.139}$$

$$\frac{d\rho_t}{dt} = -i[H,\rho_t], \quad \rho_0 = \rho.$$

定态的演化就是乘相位因子。

因为哈密顿量是一个厄米算子，所以它有谱分解

$$H = \sum_E E|E\rangle\langle E| \tag{2.87}$$

其中它的特征值为 E 并且相应的特征向量为 $|E\rangle$，状态 $|E\rangle$ 一般被称为能量本征态（energy eigenstate），有时也被称为稳态（stationary state），E 是状态 $|E\rangle$ 的能量。最低的能量称为系统的基态能量（ground state energy），相应的能量本征态（或本征空间）称为基态（ground state）。状态 $|E\rangle$ 有时称为定态，原因是它们随时间变化的仅仅是一个数值因子，

$$|E\rangle \to \exp(-\mathrm{i}Et/\hbar)|E\rangle \tag{2.88}$$

A6. 时间演化，引入哈密顿量 H。$\sigma(H)$ 有下界。

(九) 测量公理 PVM ((orthogonal) projector valued measure)

投影测量：一个投影测量由被观测系统状态空间上的一个可观测量M 来描述，M 是一个厄米算子。这个可观测量有谱分解

$$M=\sum_m mP_m \tag{2.102}$$

其中 P_m 是到特征值为 m 的本征空间 M 上的投影。测量的可能结果对应于可观测量的特征值 m。当测量状态为 $|\psi\rangle$ 时，得到结果为 m 的概率是

$$p(m)=\langle\psi|P_m|\psi\rangle \tag{2.103}$$

给定测量结果 m，测量后量子状态立即变成

$$\frac{P_m|\psi\rangle}{\sqrt{p(m)}} \tag{2.104}$$

A3. (测量公理) 在 T 时刻，系统 S 处于状态 ρ，测得命题 P 为真，则测量后瞬间，系统处于状态

$$\rho_P:=\frac{P\rho P}{\mathrm{tr}(\rho P)}$$

物理量的期望和方差

投影测量有许多很好的性质。特别地，很容易计算投影测量的平均值。根据定义，测量的平均值（见附录 A 中关于概率论的基本定义和结论）是

$$\begin{aligned}
\mathrm{E}(M)&=\sum_m mp(m) &(2.110)\\
&=\sum_m m\langle\psi|P_m|\psi\rangle &(2.111)\\
&=\langle\psi|\left(\sum_m mP_m\right)|\psi\rangle &(2.112)\\
&=\langle\psi|M|\psi\rangle &(2.113)
\end{aligned}$$

这是一个很有用的公式，能简化很多计算。可观测量 M 的平均值一般写成 $\langle M\rangle\equiv\langle\psi|M|\psi\rangle$。从这个平均值公式可推出与观测 M 相联系的标准差的公式

$$\begin{aligned}
[\Delta(M)]^2&=\langle(M-\langle M\rangle)^2\rangle &(2.114)\\
&=\langle M^2\rangle-\langle M\rangle^2 &(2.115)
\end{aligned}$$

写混态的期望和方差的计算公式

POVM(positive operator valued measure)

Definition 13.25 Let H be a Hilbert space and (X, Σ(X)) a measurable space. A mapping $A : \Sigma(\mathsf{X}) \to \mathfrak{B}(\mathsf{H})$ is called **positive-operator valued measure** (POVM) on X if:

(a)' $A(E) \geq 0$ for any $E \in \Sigma(\mathsf{X})$;

(b)' $A(\mathsf{X}) = I$;

(c)' for any countable set $\{E_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ of disjoint measurable subsets in X:

$$\text{w-}\sum_{n=0}^{+\infty} A(E_n) = A(\cup_{n\in\mathbb{N}} E_n) .$$

测量后瞬间的态

$$\rho' = \frac{B(E)\rho B(E)^*}{tr(A(E)\rho)} , \quad A(E) = B(E)^* B(E)$$

(十) 密度算符的进一步讨论

习题 2.72（混合态的布洛赫球面） 1.2 节中介绍了单量子比特纯态的布洛赫球面描述，这种描述对混合态有一个重要的推广，可被描述如下：

1. 证明任意混合态量子比特的密度矩阵可以写成

$$\rho = \frac{I + \vec{r}\cdot\vec{\sigma}}{2} \tag{2.175}$$

其中 $\vec{r}$ 是三维实向量，满足 $\|\vec{r}\| \leqslant 1$。这个向量称为状态 ρ 的布洛赫向量。

2. 对于状态 $\rho = I/2$ 而言，它的布洛赫向量表示是什么？

3. 证明状态 ρ 为纯态当且仅当 $\|\vec{r}\| = 1$。

4. 证明对于纯态，我们给出的布洛赫向量的描述与 1.2 节中的描述一致。

$\forall A \in \mathbb{C}^{2\times2}, \quad A = \frac{1}{2}\sum_i tr(A^\dagger \sigma_i)\sigma_i \quad , i = 0,1,2,3$

$\Rightarrow \rho = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + n_i\sigma_i) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+z & x+iy \\ x-iy & 1-z \end{pmatrix}$，其中 $n_i = tr(\rho\sigma_i)$

$\lambda_\pm = \frac{1 \pm |\vec{n}|}{2}$，正定 $\Rightarrow |\vec{n}| \leq 1.$

习题 2.18 (2.73-最小系综的性质)

令 ρ 是一个密度算符。ρ 的最小系综 (minimal ensemble) 指包含等于 ρ 的秩数目的系综 $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$。令 $|\psi\rangle$ 是 ρ 的支集中的任一状态 (厄米算子 A 的支集是由 A 的非零特征值的特征向量张成的向量空间)。证明存在包含 $|\psi\rangle$ 的一个 ρ 的最小系综, 并且在任何这样的系综里, $|\psi\rangle$ 一定以概率

$$p_i = \frac{1}{\langle\psi_i|\rho^{-1}|\psi_i\rangle}$$

出现, 其中 ρ^{-1} 定义为 ρ 的逆, 而 ρ 视为仅作用在 ρ 的支集上的一个算子 (这个定义避免了 ρ 可能不可逆的问题)。

习题 2.73

$\text{rank}\,\rho = r$

$\tilde{\rho} = \rho - \alpha|\psi\rangle\langle\psi| \quad , \quad 0<\alpha<1$

$\xrightarrow{\text{归一化}} \rho_1 = \frac{\tilde{\rho}}{tr(\tilde{\rho})} = \frac{1}{1-\alpha}(\rho - \alpha|\psi\rangle\langle\psi|)$

$\tilde{\rho} \geq 0 \Rightarrow \rho - \alpha|\psi\rangle\langle\psi| \geq 0$

$\mathbb{I} - \alpha\rho^{-\frac{1}{2}}|\psi\rangle\langle\psi|\rho^{-\frac{1}{2}} \geq 0$

$\lambda_m = 1 - tr(\alpha\rho^{-\frac{1}{2}}|\psi\rangle\langle\psi|\rho^{-\frac{1}{2}}) \geq 0$

$\Rightarrow \alpha \leq \frac{1}{\langle\psi|\rho^{-1}|\psi\rangle}$

$\alpha < \frac{1}{\langle\psi|\rho^{-1}|\psi\rangle} \Rightarrow \rho_1 > 0 \Rightarrow \text{rank}\,\rho_1 = r$

$\Rightarrow \rho = (1-\alpha)\rho_1 + \alpha|\psi\rangle\langle\psi|$ 至少有 $r+1$ 项, 矛盾.

(十一)　复合系统

A7. 复合系统的 Hilbert 空间是子系统的 Hilbert 空间的直积。

为什么是张量积?

(十二)　偏迹与约化密度矩阵

Suppose V, W are finite-dimensional vector spaces over a field, with dimensions m and n, respectively. For any space A, let $L(A)$ denote the space of linear operators on A. The partial trace over W is then written as $\mathrm{Tr}_W : \mathrm{L}(V \otimes W) \to \mathrm{L}(V)$, where $\otimes$ denotes the Kronecker product.

It is defined as follows: For $T \in \mathrm{L}(V \otimes W)$, let $e_1, \ldots, e_m$, and $f_1, \ldots, f_n$, be bases for *V* and *W* respectively; then *T* has a matrix representation

$$\{a_{k\ell,ij}\} \quad 1 \le k, i \le m, \quad 1 \le \ell, j \le n$$

relative to the basis $e_k \otimes f_\ell$ of $V \otimes W$.

Now for indices *k*, *i* in the range 1, ..., *m*, consider the sum

$$b_{k,i} = \sum_{j=1}^{n} a_{kj,ij}.$$

$$\mathrm{Tr}_W : \mathrm{L}(V \otimes W) \to \mathrm{L}(V)$$

such that

$$\mathrm{Tr}_W(R \otimes S) = \mathrm{Tr}(S)\, R \quad \forall R \in \mathrm{L}(V) \quad \forall S \in \mathrm{L}(W).$$

a_{lijk}

$$\mathcal{A}(e_i \otimes f_k) = \sum_{lj} e_l \otimes f_j \; a_{ljik}$$

$$(\mathrm{tr}_2 \mathcal{A})(e_i) = \sum e_l b_{li}, \quad b_{li} = \sum_{jk} \delta_{jk} a_{ljik} = \sum_j a_{ljij}$$

in bracket:
$$\mathcal{A} = \sum_{ljik} a_{ljik} \, |e_l\rangle \otimes |f_j\rangle \langle e_i| \otimes \langle f_k|$$

$$\mathrm{tr}_2(\mathcal{A}) = \sum_{m,ljik} a_{ljik} \, |e_l\rangle \langle f_m|f_j\rangle \langle e_i| \langle f_k|f_m\rangle$$

$$= \sum_l e_l b_{li}$$

把第二个系统 trace 掉

$$\begin{bmatrix} a & b & c & d \\ e & f & g & h \\ i & j & k & l \\ m & n & o & p \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} a+f & c+h \\ i+n & k+p \end{bmatrix}$$

注意比较两种不同指标顺序的约定。

专题 2.6　为什么取偏迹?

$$\mathrm{tr}(M\rho^A) = \mathrm{tr}(\widetilde{M}\rho^{AB}) = \mathrm{tr}((M \otimes I_B)\rho^{AB})$$

(十三)　施密特分解与纯化

定理 2.7（施密特分解）　设 $|\psi\rangle$ 是复合系统 AB 的一个纯态，则存在系统 A 的标准正交基 $|i_A\rangle$ 和系统 B 的标准正交基 $|i_B\rangle$，使得

$$|\psi\rangle = \sum_i \lambda_i |i_A\rangle|i_B\rangle \tag{2.202}$$

其中 λ_i 是满足 $\sum_i \lambda_i^2 = 1$ 的非负实数，称为施密特系数。

施密特数：非零的λi 的个数 = 系数矩阵的秩
局域幺正变换不改变施密特数

习题 2.78　证明复合系统 AB 的状态 $|\psi\rangle$ 为乘积态，当且仅当其施密特数是 1。证明当且仅当 ρ^A（并且 ρ^B）是纯态时，$|\psi\rangle$ 是一个乘积态。

更进一步，对于任意的两体量子态ρ，如果其中一个约化系统的态是纯态，那么系统一定处于乘积态。(Rivas Th.3.1.1)

纯化

第二项与量子计算和量子信息相关的技术是纯化（purification）。假设给定量子系统 A 的状态 ρ^A，我们可以引入另一个系统 R，定义联合系统 AR 上的纯态 $|AR\rangle$，使得 $\rho^A = \mathrm{tr}_R(|AR\rangle\langle AR|)$。也就是说，当我们单独看系统 A 时，纯态 $|AR\rangle$ 约化为 ρ^A。这是一个纯粹的数学过程，称为纯化，它允许我们将纯态和混合态联系起来。因此，我们称系统 R 为参考系统：它是一个虚构的系统，没有直接的物理意义。

为了证明任何状态都可以进行纯化，我们解释了如何为 ρ^A 构造一个系统 R 和纯化 $|AR\rangle$。假设 ρ^A 有标准正交分解 $\rho^A = \sum_i p_i |i^A\rangle\langle i^A|$。为对 ρ^A 进行纯化，我们引入和系统 A 有相同维数且

有标准正交基 $|i^R\rangle$ 的系统 R，并且为复合系统定义纯态

$$|AR\rangle \equiv \sum_i \sqrt{p_i}|i^A\rangle|i^R\rangle \tag{2.207}$$

我们现在计算系统 A 对应于状态 $|AR\rangle$ 的约化密度算子：

$$\begin{aligned}
\operatorname{tr}_R(|AR\rangle\langle AR|) &= \sum_{ij} \sqrt{p_i p_j}|i^A\rangle\langle j^A|\operatorname{tr}(|i^R\rangle\langle j^R|) && (2.208)\\
&= \sum_{ij} \sqrt{p_i p_j}|i^A\rangle\langle j^A|\delta_{ij} && (2.209)\\
&= \sum_i p_i|i^A\rangle\langle i^A| && (2.210)\\
&= \rho^A && (2.211)
\end{aligned}$$

因此 $|AR\rangle$ 是 ρ^A 的纯化。

(十四)　EPR 佯谬与贝尔不等式的违反

本文来自 [6]。1935 年，Albert Einstein，Boris Podolsky 和 Nathan Rosen (EPR) 写了一篇著名的论文，质疑量子力学完备性，他们认为纠缠对中的一个粒子进行测量会影响远处的另一个粒子的状态的想法是错的，必须使量子力学完备化才能获得对世界的合理的“局部实在论”描述。这种观点认为，一个粒子在局部带有决定对其进行的任何测量结果的所有特性，这些属性的集合构成了粒子的物理现实。然而，直到 1964 年，CERN 的理论家约翰 · 斯图尔特 · 贝尔 (John Stewart Bell) 才发现 Bell 不等式，该不等式允许对局部实在论的预测与标准量子的预测进行实验检验，贝尔的发现将爱因斯坦和玻尔的争论从认识论转移到实验物理学领域。在接下来的几十年里，实验物理学家对贝尔不等式进行了越来越复杂的测试。但这些测试总是至少有一个“漏洞”，允许对实验结果进行局部现实实在论解释，除非有人做出补充（尽管合理）的假设。在 2015 年，三个团队通过同时堵住两个主要漏洞，独立确认我们必须坚决放弃局部实在性 [44, 52, 100]。尽管从某种意义上说，他们的发现并不令人惊讶，但它们是数十年实验努力的结晶。结果还为几个基本的量子信息方案奠定了坚实的基础，例如与设备无关的量子密码学和量子网络。

考虑一个具有两种属性的粒子，Alice 和 Bob 站在相距很远的地方，Victor 制备了一对粒子，将其中一个发送给 Alice，另一个发送给 Bob，当 Alice 收到粒子后，可以随机地选择测量粒子的其中一种属性，设两种测量的结果作为随机变量分别记为 A_0 和 A_1，这两个随机变量的取值都只能是 +1 和 −1，Alice 测量 A_0 所得的结果记为 a_0，测量 A_1 所得的结果记为 a_1，Bob 类似。在该实验中，有两个假设，其一是被测的粒子具有内在属性 a_0, a_1, b_0, b_1，这些属性独立于观测和测量存在，这一假设被称为实在性，其二是 Alice 的测量和 Bob 的测量不会相互影响，这一假设被称为局部性。分析所有可能的测量结果，可以得到 Bell 不等式

$$\langle A_0B_0\rangle + \langle A_0B_1\rangle + \langle A_1B_0\rangle - \langle A_1B_1\rangle \le 2$$

在量子力学中，将 A_0 与 A_1 分别取为 z 方向和 x 方向的 $\frac{1}{2}$ 自旋，可以得到违反贝尔不等式的结果

$$\langle A_0 \otimes B_0\rangle + \langle A_0 \otimes B_1\rangle + \langle A_1 \otimes B_0\rangle - \langle A_1 \otimes B_1\rangle = 2\sqrt{2}$$