量子计算

第一章 矩阵代数

定义 1.1 域 F 上的向量空间（或线性空间）V，定义了加法和数乘运算. 对加法成 Abel 群，即 $\forall u, v \in V$， $u+v \in V$ （封闭性），且满足以下性质：(1) $(u+v)+w=u+(v+w)$，$\forall u, v, w \in V$；(2) $\forall u \in V$，$\exists$ 零元 $0 \in V$，使得 $u+0=u$；(3) $\forall u \in V$，$\exists v \in V$，使得 $u+v=0$ （v 是 u 的逆元，记为 $-u$）；(4) $u+v=v+u$，$\forall u, v \in V$. 另外，$\forall \alpha \in F$， $u \in V$， F 对 V 的数乘 $\alpha u \in V$（封闭性）. $\forall \alpha, \beta \in F$，$u, v \in V$，满足：(1) $\alpha(u+v)=\alpha u+\alpha v$；(2) $(\alpha+\beta)u=\alpha u+\beta u$；(3) $(\alpha\beta)u=\alpha(\beta u)$；(4) $1u=u$（1 为 F 中单位元）. 向量空间的元素称为向量或矢量. 典型的域如 $\mathbb{R}$ (所有实数的集合)，$\mathbb{C}$ (所有复数的集合).

定义 1.2 向量空间V上的内积$\langle\cdot,\cdot\rangle$为满足如下关系的二元函数：(1) $\langle v,v\rangle\geq 0$ ， $\forall v\in V$ ； (2) $\langle v_1,v_2\rangle=\overline{\langle v_2,v_1\rangle}$ ， $\forall v_1,v_2\in V$ ； (3) $\langle v_1,\alpha v_2+\beta v_3\rangle=\alpha\langle v_1,v_2\rangle+\beta\langle v_1,v_3\rangle$， $\forall\alpha,\beta\in F$， $v_1,v_2,v_3\in V$.

定义 1.3 设$\alpha_i\in\mathbb{C}$为复数，$|s_i\rangle\in V\ (i=1,2,\cdots,n)$是由 Dirac 符号表示的向量空间$V$中的向量，则称向量$\alpha_1|s_1\rangle+\alpha_2|s_2\rangle+\cdots+\alpha_n|s_n\rangle$为$\{|s_i\rangle\}_{i=1}^n$的线性组合，或线性表示. 若一组向量中任何一个均不能由其他向量线性表示，则称这组向量是线性无关的. 若任意一个向量都可以由线性无关组$\{|s_i\rangle\}_{i=1}^n$唯一地线性表示，则称$\{|s_i\rangle\}_{i=1}^n$为向量空间的基（或基底）.

在给定基底后，有限维空间的向量可用分量表示为

$$|x\rangle = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T \in \mathbb{C}^n, \tag{1.1}$$

我们也称之为右矢(ket)，同时定义下面的左矢(bra)：

$$\langle x| \equiv (x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*) \in \mathbb{C}^{1\times n}, \tag{1.2}$$

其中元素x_i^*是x_i的共轭. 左矢$\langle\alpha|$诱导如下线性泛函$f:\mathbb{C}^n \to \mathbb{C}$：

$$f(|x\rangle) \equiv \langle\alpha|(|x\rangle) = \langle\alpha|x\rangle.$$

易验证线性关系：$f(c_1|x\rangle + c_2|y\rangle) = c_1 f(|x\rangle) + c_2 f(|y\rangle)$，$\forall |x\rangle, |y\rangle \in \mathbb{C}^n$，$\forall c_1, c_2 \in \mathbb{C}$. 任意线性泛函可由左矢诱导的线性函数表示(Riesz 表示定理）. 向量空间V上所有线性泛函构成的向量空间称为对偶空间.

常见的Pauli 矩阵（又称自旋矩阵）为

$$\sigma_1=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\quad \sigma_2=\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix},\quad \sigma_3=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}.$$

它们都是迹为 0 的 Hermite 矩阵. 可以验证

$$\sigma_i\sigma_j=i\sum_{k=1}^{3}\varepsilon_{ijk}\sigma_k+\delta_{ij}I,$$

这里ε_{ijk}是Levi-Civita 记号，即

$$\varepsilon_{ijk}=\begin{cases}1 & (i,j,k)=(1,2,3),\ (2,3,1),\ (3,1,2)\\ -1 & (i,j,k)=(2,1,3),\ (1,3,2),\ (3,2,1)\\ 0 & \text{其他.}\end{cases}$$

可见两个不同的Pauli 矩阵之积等于未参与（乘法运算）的Pauli 矩阵的$\pm i$倍. 易验证:

$$\sigma_i^2=I,$$

$$\{\sigma_i,\sigma_j\}=\sigma_i\sigma_j+\sigma_j\sigma_i=2\delta_{ij}I,$$

Pauli 矩阵	特征值	$\mathbb{C}^2$ 中的特征向量
$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\lambda = \pm 1$	$\lvert 0 \rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},\ \lvert 1 \rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$
$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$	$\lambda = \pm 1$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\lvert 0 \rangle \pm i \lvert 1 \rangle\right)$
$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\lambda = \pm 1$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\lvert 0 \rangle \pm \lvert 1 \rangle\right) \equiv \lvert \pm \rangle$

例 1.6 令 $H_0=1$，递归定义 2^n 阶 Hadamard 矩阵 H_n ($n\geq 1$)：

$$H_n=\begin{pmatrix} H_{n-1} & H_{n-1} \\ H_{n-1} & -H_{n-1} \end{pmatrix}.$$

证明 H_n ($n\geq 1$) 的特征值为 $\pm 2^{n/2}$，重数分别为 2^{n-1}.

定理 1.7 Hermite 矩阵的特征值为实，且互异特征值对应的特征向量正交.

证 设 $(\lambda,|\lambda\rangle)$ 为 Hermite 矩阵 A 的特征对，即 $A|\lambda\rangle=\lambda|\lambda\rangle$，其中 λ 为特征值，对应的特征向量为 $|\lambda\rangle$. 左乘 $\langle\lambda|$ 得，$\langle\lambda|A|\lambda\rangle=\lambda\langle\lambda|\lambda\rangle$. 对 $A|\lambda\rangle=\lambda|\lambda\rangle$ 取共轭得，$\langle\lambda|A=\lambda^*\langle\lambda|$；再右乘 $|\lambda\rangle$，得 $\langle\lambda|A|\lambda\rangle=\lambda^*\langle\lambda|\lambda\rangle$. 从而，$\langle\lambda|A|\lambda\rangle=\lambda\langle\lambda|\lambda\rangle=\lambda^*\langle\lambda|\lambda\rangle$，故 $\lambda=\lambda^*$，即 λ 为实数.

令 $A|\mu\rangle=\mu|\mu\rangle$，且 $\mu\neq\lambda$. 注意到 $\mu\in\mathbb{R}$，$A^\dagger=A$，对 $A|\mu\rangle=\mu|\mu\rangle$ 取共轭得，$\langle\mu|A=\mu\langle\mu|$. 由 $\langle\mu|A|\lambda\rangle=\lambda\langle\mu|\lambda\rangle$ 和 $\langle\mu|A|\lambda\rangle=\mu\langle\mu|\lambda\rangle$，得 $(\lambda-\mu)\langle\mu|\lambda\rangle=0$. 故 $\langle\mu|\lambda\rangle=0$，即两特征向量正交. □

定理 1.8 正规阵的互异特征值对应的特征向量正交.

证 设正规矩阵 A 的特征值 λ_j 对应的特征向量为 $|\lambda_j\rangle$，即 $(A-\lambda_j I)|\lambda_j\rangle=0$.

又 $[A,A^\dagger]=0$，故

$$\begin{aligned}(A^\dagger-\lambda_j^* I)(A-\lambda_j I)&=A^\dagger A-\lambda_j A^\dagger-\lambda_j^* A+\lambda_j^*\lambda_j I\\&=AA^\dagger-\lambda_j A^\dagger-\lambda_j^* A+\lambda_j\lambda_j^* I=(A-\lambda_j I)(A^\dagger-\lambda_j^* I),\end{aligned}$$

$$\langle\lambda_j|(A^\dagger-\lambda_j^* I)(A-\lambda_j I)|\lambda_j\rangle=\langle\lambda_j|(A-\lambda_j I)(A^\dagger-\lambda_j^* I)|\lambda_j\rangle=\left\|(A^\dagger-\lambda_j^* I)|\lambda_j\rangle\right\|^2=0,$$

从而推出 $\langle\lambda_j|A=\lambda_j\langle\lambda_j|$；右乘另一特征向量 $|\lambda_k\rangle$（$k\neq j$）得，

$$\langle\lambda_j|A|\lambda_k\rangle=\lambda_j\langle\lambda_j|\lambda_k\rangle.$$

再由 $A|\lambda_k\rangle=\lambda_k|\lambda_k\rangle$ 与 $|\lambda_j\rangle$ 的内积得，

$$\langle\lambda_j|A|\lambda_k\rangle=\lambda_k\langle\lambda_j|\lambda_k\rangle.$$

故 $\langle\lambda_j|A|\lambda_k\rangle=\lambda_j\langle\lambda_j|\lambda_k\rangle=\lambda_k\langle\lambda_j|\lambda_k\rangle$，即

$$(\lambda_j-\lambda_k)\langle\lambda_j|\lambda_k\rangle=0.$$

若 $\lambda_j\neq\lambda_k$，则 $\langle\lambda_k|\lambda_j\rangle=0$.

例 1.9 设 A， $B\in\mathbb{C}^{n\times n}$，证明 AB 和 BA 有相同的特征值.

定理 1.10 若 A 和 B 可对角化且 $[A,B]=0$，则 A 和 B 有共同的完备特征向量系（在此基底下同时对角化）.

证 不妨设 $n\times n$ 矩阵 $A=\begin{pmatrix}\mu_1 I_{n_1} & & \\ & \ddots & \\ & & \mu_d I_{n_d}\end{pmatrix}$，且 $\mu_i\neq\mu_j$，$\sum_{j=1}^{d}n_j=n$.

由 $AB=BA$ 知，$B=\begin{pmatrix}B_1 & & \\ & \ddots & \\ & & B_d\end{pmatrix}$，其中 B_i 为 $n_i\times n_i$ 矩阵. 令 $Q_i^{-1}B_iQ_i=\Lambda_i$（对角阵），$Q=\mathrm{diag}(Q_1,\cdots,Q_d)$，$\Lambda=\mathrm{diag}(\Lambda_1,\cdots,\Lambda_d)$，则

$$Q^{-1}AQ=A，\quad Q^{-1}BQ=\Lambda.$$

例 1.11 矩阵 $A=\begin{pmatrix}0&1&&\\1&0&&\\&&0&1\\&&1&0\end{pmatrix}$，$B=\begin{pmatrix}&&1&0\\&&0&1\\1&0&&\\0&1&&\end{pmatrix}$，$C=\begin{pmatrix}&&0&1\\&&1&0\\0&1&&\\1&0&&\end{pmatrix}$相互对易，可同时对角化，对角矩阵分别为

$$\begin{pmatrix}1&&&\\&-1&&\\&&1&\\&&&-1\end{pmatrix},\ \begin{pmatrix}1&&&\\&1&&\\&&-1&\\&&&-1\end{pmatrix},\ \begin{pmatrix}1&&&\\&-1&&\\&&-1&\\&&&1\end{pmatrix}.$$

$$K=\begin{pmatrix}1&a&b&c\\a&1&c&b\\b&c&1&a\\c&b&a&1\end{pmatrix}=I+aA+bB+cC,$$

则

$$\det(K)=(1+a+b+c)(1+a-b-c)(1-a+b-c)(1-a-b+c).$$

定理 1.12（奇异值分解）$\forall A\in\mathbb{C}^{m\times n}$，$\exists U\in U(m)$，$V\in U(n)$ 和 $m\times n$ 对角矩阵 Σ（对角元非负），使得 $A=U\Sigma V^{\dagger}$.

证 设 $A^{\dagger}A$ 的特征值为 $\sigma_1^2,\cdots,\sigma_r^2,0,\cdots,0$，其中 $\sigma_i>0\,(i=1,\cdots,r)$. 定义 $\Sigma_r=\operatorname{diag}(\sigma_1,\ldots,\sigma_r)$. 存在正交矩阵 V，使

$$V^{\dagger}A^{\dagger}AV=\operatorname{diag}\left(\sigma_1^2,\cdots,\ \sigma_r^2,0,\cdots,0\right)=\begin{pmatrix}\Sigma_r^2 & \\ & 0\end{pmatrix}.$$

对应的分块形式为

$$\begin{bmatrix}V_1^{\dagger}\\ V_2^{\dagger}\end{bmatrix}A^{\dagger}A\begin{bmatrix}V_1 & V_2\end{bmatrix}=\begin{pmatrix}\Sigma_r^2 & \\ & 0\end{pmatrix},$$

比较两边得

$$V_1^{\dagger}A^{\dagger}AV_1=\Sigma_r^2,\qquad AV_2=0.$$

由 $\left(AV_1\Sigma_r^{-1}\right)^{\dagger}\left(AV_1\Sigma_r^{-1}\right)=I_r$，可定义列正交矩阵 $U_1=AV_1\Sigma_r^{-1}$，并扩充为酉矩阵 $U=(U_1,U_2)$. 利用 $U_2^{\dagger}AV_1=U_2^{\dagger}U_1\Sigma_r=0$，可得

$$U^{\dagger}AV=\begin{pmatrix}\Sigma_r & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}\equiv\Sigma, \tag{1.6}$$

例 1.14 定义 $n\times n$ 循环矩阵

$$C=\begin{pmatrix} c_0 & c_1 & c_2 & \cdots & c_{n-1} \\ c_{n-1} & c_0 & c_1 & \cdots & c_{n-2} \\ c_{n-2} & c_{n-1} & c_0 & \cdots & c_{n-3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_1 & c_2 & c_3 & \cdots & c_0 \end{pmatrix}, \qquad P=\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}.$$

令 $f(t)=c_0+c_1t+\cdots+c_{n-1}t^{n-1}$， $\omega=e^{-i\frac{2\pi}{n}}$.

（1）证明循环矩阵 C 的特征值为 $f(\omega^k)$， $k=0,1,\cdots,n-1$.

（2） 证明 $F^\dagger CF$ 是对角矩阵，这里 F 为酉矩阵，其 (j,k) 元素为 $\frac{1}{\sqrt{n}}\omega^{(j-1)(k-1)}$， $j,k=1,2,\ldots,n$.

§4 矩阵指数

定理 1.15 令$\mathbf{n}=(n_1,n_2,n_3)\in\mathbb{R}^3$为单位向量，$\alpha\in\mathbb{R}$，则

$$\exp(i\alpha\,\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})=\cos\alpha I+i(\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\sin\alpha), \tag{1.10}$$

其中$\boldsymbol{\sigma}=(\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3)$，$\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}=n_1\sigma_1+n_2\sigma_2+n_3\sigma_3$.

证 令$A=\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$，由$A^2=I$，

$$\begin{aligned}e^{i\alpha A}&=I+i\alpha A-\frac{1}{2!}\alpha^2A^2-i\frac{1}{3!}\alpha^3A^3+\frac{1}{4!}\alpha^4A^4+i\frac{1}{5!}\alpha^5A^5\cdots\\&=(1-\frac{1}{2!}\alpha^2+\frac{1}{4!}\alpha^4-\cdots)I+i(\alpha-\frac{1}{3!}\alpha^3+\frac{1}{5!}\alpha^5-\cdots)A=\cos\alpha I+i\sin\alpha A.\end{aligned}$$

□

定义旋转算符

$$\mathbf{R}_{\mathbf{n}}(\theta)\equiv\exp(-i\tfrac{\theta}{2}\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})=\cos\tfrac{\theta}{2}I-i(\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\sin\tfrac{\theta}{2}),\quad \mathbf{n}\in\mathbb{R}^3,\quad \theta\in\mathbb{R}.$$

$$\mathbf{R}_z(0)=\mathbf{I},\quad \mathbf{R}_z(2\pi)=-\mathbf{I},\quad \mathbf{R}_z(4\pi)=\mathbf{I}.$$

$$\mathbf{R}_{\mathbf{n}}(\theta_1)\mathbf{R}_{\mathbf{n}}(\theta_2)=\mathbf{R}_{\mathbf{n}}(\theta_1+\theta_2),\quad \mathbf{R}_{\mathbf{n}}(\theta)=\mathbf{R}_{-\mathbf{n}}(4\pi-\theta)=-\mathbf{R}_{-\mathbf{n}}(2\pi-\theta).$$

此外，对单位向量$\mathbf{m},\mathbf{n}\in\mathbb{R}^3$，有

$$(\boldsymbol{\sigma}\times\mathbf{m})\cdot\mathbf{n}=\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{m}\times\mathbf{n})=\sum_{a,b,c}\varepsilon_{abc}\sigma_a m_b n_c,$$

$$(\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})(\mathbf{m}\cdot\boldsymbol{\sigma})=(\mathbf{n}\cdot\mathbf{m})I+i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{n}\times\mathbf{m}),$$

$$[\mathbf{m}\cdot\boldsymbol{\sigma},\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}]=2i(\mathbf{m}\times\mathbf{n})\cdot\boldsymbol{\sigma},$$

$$\mathbf{R}_{\mathbf{n}}(\theta)(\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})=(\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})\mathbf{R}_{\mathbf{n}}(\theta),$$

这里$\mathbf{m}\times\mathbf{n}$是普通的向量叉乘，$\mathbf{n}\times\boldsymbol{\sigma}=(n_2\sigma_3-n_3\sigma_2,n_3\sigma_1-n_1\sigma_3,n_1\sigma_2-n_2\sigma_1)$.

例 1.16 设单位向量$\mathbf{m},\mathbf{n}\in\mathbb{R}^3$， $\mathbf{n}\cdot\mathbf{m}=0$， $\mathbf{r}=\alpha\mathbf{n}+\beta\mathbf{m}$，证明：

（1） $\mathbf{R}_{\mathbf{n}}(\theta)(\mathbf{m}\cdot\boldsymbol{\sigma})\mathbf{R}_{\mathbf{n}}(-\theta)=(\mathbf{m}\cos\theta+\mathbf{n}\times\mathbf{m}\sin\theta)\cdot\boldsymbol{\sigma}$；

（2） $\mathbf{R}_{\mathbf{n}}(\theta)(\mathbf{r}\cdot\boldsymbol{\sigma})\mathbf{R}_{\mathbf{n}}^{-1}(\theta)=\mathbf{r}'\cdot\boldsymbol{\sigma}$， 这里$\mathbf{r}'=\alpha\mathbf{n}+\beta(\mathbf{m}\cos\theta+\mathbf{n}\times\mathbf{m}\sin\theta)$.

证 （1）

$\mathbf{R}_{\mathbf{n}}(\theta)(\mathbf{m}\cdot\boldsymbol{\sigma})\mathbf{R}_{\mathbf{n}}(-\theta)=\cos^2\frac{\theta}{2}(\mathbf{m}\cdot\boldsymbol{\sigma})-\frac{i}{2}\sin\theta[\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma},\mathbf{m}\cdot\boldsymbol{\sigma}]+\sin^2\frac{\theta}{2}(\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})(\mathbf{m}\cdot\boldsymbol{\sigma})(\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})$.

注意到

$$\begin{aligned}&(\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})(\mathbf{m}\cdot\boldsymbol{\sigma})(\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})=[\mathbf{n}\cdot\mathbf{m}+i(\mathbf{n}\times\mathbf{m})\cdot\boldsymbol{\sigma}](\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})\\&=\mathbf{n}\cdot\mathbf{m}(\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})+i[(\mathbf{n}\times\mathbf{m})\cdot\mathbf{n}+i(\mathbf{n}\times\mathbf{m}\times\mathbf{n})\cdot\boldsymbol{\sigma}]\\&=\mathbf{n}\cdot\mathbf{m}(\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})+\mathbf{n}\times(\mathbf{n}\times\mathbf{m})\cdot\boldsymbol{\sigma}\end{aligned}$$

最后一个等式用到矢量公式$\mathbf{a}\times(\mathbf{b}\times\mathbf{c})=(\mathbf{a}\cdot\mathbf{c})\mathbf{b}-(\mathbf{a}\cdot\mathbf{b})\mathbf{c}$和$\mathbf{n}\cdot\mathbf{m}=0$， 故

$$\begin{aligned}\mathbf{R}_{\mathbf{n}}(\theta)(\mathbf{m}\cdot\boldsymbol{\sigma})\mathbf{R}_{\mathbf{n}}(-\theta)&=\left(\cos^2\tfrac{\theta}{2}-\sin^2\tfrac{\theta}{2}\right)(\mathbf{m}\cdot\boldsymbol{\sigma})+\sin\theta\mathbf{n}\times\mathbf{m}\cdot\boldsymbol{\sigma}\\&=(\mathbf{m}\cos\theta+\mathbf{n}\times\mathbf{m}\sin\theta)\cdot\boldsymbol{\sigma}.\end{aligned}$$

（2）注意到$\mathbf{R}_{\mathbf{n}}(\theta)(\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})\mathbf{R}_{\mathbf{n}}(-\theta)=\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$， 从而

$$\begin{aligned}&\mathbf{R}_{\mathbf{n}}(\theta)(\mathbf{r}\cdot\boldsymbol{\sigma})\mathbf{R}_{\mathbf{n}}^{-1}(\theta)\\&=\alpha\mathbf{R}_{\mathbf{n}}(\theta)(\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})\mathbf{R}_{\mathbf{n}}^{-1}(\theta)+\beta\mathbf{R}_{\mathbf{n}}(\theta)(\mathbf{m}\cdot\boldsymbol{\sigma})\mathbf{R}_{\mathbf{n}}^{-1}(\theta)\\&=\alpha\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}+\beta(\mathbf{m}\cos\theta+\mathbf{n}\times\mathbf{m}\sin\theta)\cdot\boldsymbol{\sigma}=\mathbf{r}'\cdot\boldsymbol{\sigma}.\end{aligned}$$

□

例 1.17 设$|D\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$（$b^2 = 1-a^2$），$H = |0\rangle\langle 0| + |D\rangle\langle D|$. 证明

$$e^{-itH}|D\rangle = e^{-it}\left(\cos at|D\rangle - i\sin at|0\rangle\right).$$

证

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a^2 & ab \\ ab & b^2 \end{pmatrix} = I + a^2\sigma_z + ab\sigma_x \equiv I + aA,$$

这里 $A = a\sigma_z + b\sigma_x$，故 $A^2 = I$，且 $A|D\rangle = (a\sigma_z + b\sigma_x)(a|0\rangle + b|1\rangle) = |0\rangle$. 从而，

$$e^{-itH} = e^{-it(I+aA)} = e^{-it}e^{-iatA} = e^{-it}\left(\cos atI - i\sin atA\right),$$

$$e^{-itH}|D\rangle = e^{-it}\left(\cos at|D\rangle - i\sin atA|D\rangle\right) = e^{-it}\left(\cos at|D\rangle - i\sin at|0\rangle\right).$$

□

注 此例的背景是 Grover 搜索. 在 Grover 搜索中 $H = |g\rangle\langle g| + |D\rangle\langle D|$，其中 g 是搜索目标，$|D\rangle = a|g\rangle + b|g^{\perp}\rangle$，$a = 1/\sqrt{2^n}$. 在基底 $\{|g\rangle, |g^{\perp}\rangle\}$ 下，$H = I + aA$， $A|D\rangle = |g\rangle$，从而

$$e^{-itH}|D\rangle \propto \cos at|D\rangle - i\sin at|g\rangle.$$

$$X^{-1}AX=\mathrm{diag}(J_1,\cdots,J_p)=J,$$

$$J_k=J_k(\lambda_k)=\begin{pmatrix}\lambda_k & 1 & & \\ & \lambda_k & \ddots & \\ & & \ddots & 1 \\ & & & \lambda_k\end{pmatrix}\in\mathbb{C}^{m_k\times m_k},$$

$\sum_{k=1}^{p}m_k=n$. 不考虑 Jordan 块J_k的顺序，J是唯一的. 设$\lambda_1,\cdots,\lambda_s(s\le p)$是$A$的互异特征值，$n_i$是含有$\lambda_i$的最大 Jordan 块阶数. 若$f(z)$在$A$的谱上由定义，即$f^{(k)}(\lambda_i)$存在（$k=0,\cdots,n_i-1;i=1,\cdots s$），则定义

$$f(A)\equiv Xf(J)X^{-1}=X\,\mathrm{diag}(f(J_k))X^{-1},$$

$$f(J_k)\equiv\begin{pmatrix}f(\lambda_k) & f'(\lambda_k) & \cdots & \dfrac{f^{(m_k-1)}(\lambda_k)}{(m_k-1)!} \\ & f(\lambda_k) & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & f'(\lambda_k) \\ & & & f(\lambda_k)\end{pmatrix}.$$

定义 1.20 设 A，B 分别为 $m\times n$ 和 $k\times l$ 矩阵，即

$$A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}, \quad B=\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1l} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2l} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{k1} & b_{k2} & \cdots & b_{kl} \end{pmatrix},$$

A 和 B 的张量积定义为 $mk\times nl$ 矩阵

$$A\otimes B=\begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \cdots & a_{1n}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \cdots & a_{2n}B \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & a_{m2}B & \cdots & a_{mn}B \end{pmatrix}. \tag{1.13}$$

例如，若

$$A=\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}，\text{则 } A^{\otimes 2}=A\otimes A=\begin{pmatrix} aA & bA \\ cA & dA \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} a^2 & ab & ab & b^2 \\ ac & ad & bc & bd \\ ac & bc & ad & bd \\ c^2 & cd & cd & d^2 \end{pmatrix}.$$

定理 1.21 令 $A\in\mathbb{C}^{m\times m}$， $B\in\mathbb{C}^{n\times n}$， A 有特征值 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_m$ 特征向量 $|u_1\rangle,|u_2\rangle,\cdots,|u_m\rangle$， B 有特征值 $\mu_1,\mu_2,\cdots,\mu_n$， 特征向量 $|v_1\rangle,|v_2\rangle,\cdots,|v_n\rangle$， 则 $A\otimes B$ 有 mn 个特征值 $\{\lambda_j\mu_k\}$，对应的特征向量为 $\{|u_jv_k\rangle\}$.

证

$$(A\otimes B)|u_jv_k\rangle=(A|u_j\rangle)\otimes(B|v_k\rangle)=(\lambda_j|u_j\rangle)\otimes(\mu_k|v_k\rangle)=\lambda_j\mu_k|u_jv_k\rangle,$$

由此可得 mn 阶矩阵 $A\otimes B$ 的 mn 个两两正交的特征向量 $\{|u_jv_k\rangle\}$.

□

例 1.22 考虑 Hamilton 算子

$$H = \mu_x \sigma_x \otimes \sigma_x + \mu_y \sigma_y \otimes \sigma_y \text{，} \quad \mu_x,\ \mu_y \in \mathbb{R}.$$

写出矩阵形式：

特征值	特征向量
$\mu_x - \mu_y$	$\left\lvert \Phi^+ \right\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\lvert 00\rangle + \lvert 11\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,0,0,1)^T$
$\mu_y - \mu_x$	$\left\lvert \Phi^- \right\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\lvert 00\rangle - \lvert 11\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,0,0,-1)^T$
$\mu_x + \mu_y$	$\left\lvert \Psi^+ \right\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\lvert 01\rangle + \lvert 10\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(0,1,1,0)^T$
$-\mu_x - \mu_y$	$\left\lvert \Psi^- \right\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\lvert 01\rangle - \lvert 10\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}(0,1,-1,0)^T$