面的叙述中算子对应数学上的矩阵，我们只考虑线性算子[1]；矢量对应数学上的向量；本征值和本征态对应数学上的特征值和特征向量，转置共轭和共轭转置是等价的。文中出现的[ ]均在附录中做了解释。

假设 1：状态空间（State Space）

任何一个量子系统对应数学上一个 Hilbert 空间，一般用$\mathcal{H}$来表示。目前只考虑有限维的 Hilbert 空间，$\mathcal{H} \in C^N$。C表示是复数，N是空间的维度。该量子系统下的量子态都可以用对应的 Hilbert 空间下的单位矢量（Unit Vector）来表示，通常采用 Dirac 符号来表示 Hilbert 空间下的矢量，即$|\psi\rangle$。

简单地说，Hilbert 空间就是带内积的复数空间。设量子态$|a\rangle$和$|b\rangle$属于$\mathcal{H} \in C^N$，其内积可以定义为：

$$(|a\rangle)^\dagger |b\rangle \equiv \langle a| \cdot |b\rangle \equiv \langle a|b\rangle$$

这里$\langle a|$是$|a\rangle$的共轭转置（Conjugate Transpose），定义为

$$\langle a| \equiv (|a\rangle)^\dagger$$

【注意】:内积是一个标量，即是一个数，可能是实数也可能是复数，可以验证$\langle a|b\rangle^\dagger = \langle b|a\rangle$。通常，$|\cdot\rangle$称为右矢，而$\langle\cdot|$称为左矢。

再提一个数学概念：**正交（Orthogonal）。**两个量子态$|a\rangle$和$|b\rangle$正交，当且仅当$\langle a|b\rangle = 0$。**物理上，两个量子态正交的表示这两个量子态可以精确地区分。**

关于假设 1，有一个很重要的定理，即**态叠加原理（Superposition Principle），**态叠加原理告诉我们，如果两个相互正交的量子态$|a\rangle$和$|b\rangle$是一个量子系统的可能状态，那么其线性组合$\alpha|a\rangle + \beta|b\rangle$也是该量子系统的可能状态，这里$\alpha$和$\beta$是复数，满足$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$，而$|\alpha|^2 = \alpha^*\alpha = \alpha\alpha^*$。该定理是量子计算并行处理的基础之一：经典计算机中比特非 0 即 1，而量子计算机中量子比特（Qubit）可以是 0 和 1 的任意组合。

Example 1:

一个光子的偏振状态可以由一个 2 维的 Hilbert 空间中的单位矢量来表示，定义两个光子的偏振态：

$$|0\rangle \equiv \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} \in C^2, \quad |1\rangle \equiv \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} \in C^2$$

易验证$|0\rangle$和$|1\rangle$是两个相互正交的量子态：

$$\langle 0|1\rangle = [1 \;\; 0]\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} = 0$$

根据态叠加原理，如果$|0\rangle$是光子的一个可能状态，而$|1\rangle$也是光子的一个可能状态，那么如下量子态也是光子的一种可能偏振状态

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \begin{bmatrix}\alpha\\\beta\end{bmatrix}$$

假设 1 中提到的量子态是一个单位矢量，数学上就是要求其自身的内积为 1，于是量子态$|\psi\rangle$满足

$$\langle\psi|\psi\rangle = [\alpha^* \;\; \beta^*]\begin{bmatrix}\alpha\\\beta\end{bmatrix} = |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

这就是所谓的**归一化条件**。

假设 2：演化（Evolution）

一个封闭（Closed）的量子系统下的量子态演化由酉算子[2]（Unitary Operator）来描述，封闭的系统是指不与外部发生作用的孤立系统，当然这是一种理想条件。酉算子一般用U来表示。假设一个N维 Hilbert 空间下的量子态初始时刻为$|\psi(0)\rangle \in C^N$，经历时间t后演变为$|\psi(t)\rangle \in C^N$，则其演化过程可以表示成一个$N \times N$的酉算子$U(t) \in C^{N\times N}$，括号内的t表示该算子可能是关于时间的函数。演化过程的数学表达为

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$$

这里酉算子$U(t)$定义为

$$U(t) \equiv e^{-\frac{jHt}{\hbar}}$$

这里j是虚数单位，$\hbar$是普朗克约化常数，具体数值无需了解，几乎用不到。H是系统的哈密顿量（Hamiltonian），它是一个 Hermitian 算子，具体表达式由实验测定，一般情况下我们也无需了解，都假定是已知参数即可。

【重要】上面的$e^{-\frac{jHt}{\hbar}}$实际上是一个矩阵函数[6]，其定义很简单：假设$f(x)$为某一函数，则对于矩阵$A \in C^{N\times N}$，$f(A) \in C^{N\times N}$称为对应的矩阵函数。例如

$$f(x) = e^x, f(A) = e^A$$

通常量子力学中只考虑A是方阵的情况。

假设 2 的另一种诠释：**薛定谔方程（Schrödinger Equation）**

对于一个量子态$|\psi(t)\rangle$，其演化过程可以由薛定谔方程描述

$$j\hbar\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H|\psi(t)\rangle$$

这两种解释是等价的，原因如下：

将$U(t) \equiv e^{-\frac{jHt}{\hbar}}$代入到$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$中得

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle = e^{-\frac{jHt}{\hbar}}|\psi(0)\rangle$$

上式两端分别对时间t求导即得薛定谔方程，因此是等价的。

Example 2:

可验证如下算子是一个酉算子：

$$H \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{bmatrix}$$

这个酉算子叫做 Hadamard 变换，一般记作H（注意：这里H是酉算子，并不是系统的哈密顿量，由于历史原因，Hadamard 变换就是约定俗成地使用H来表示的），显然这个酉算子是与时间无关的。易验证

$$H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix} = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \equiv |+\rangle$$

$$H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\ 1\end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ -1\end{bmatrix} = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \equiv |-\rangle$$

上面提到这些$|0\rangle, |1\rangle, |+\rangle, |-\rangle$就是经典的 BB84 协议中的$0°, 90°, 45°, 135°$偏振态。

【补充】

关于假设 1，我们知道任何一个空间都可以联系一组**完备的正交归一化基矢（Complete**

Orthonormal Bases)，即空间内的任何一个向量都可以唯一地表示成基矢的线性组合。例如，三维实空间R^3（即欧几里得空间）的一组完备的正交归一化基矢可以为$\{(1,0,0),(0,1,0),(0,0,1)\}$，可以验证$(1,0,0),(0,1,0),(0,0,1)$是相互正交且归一化的。更重要的是，同一个空间可能存在许多不同的基矢，例如$\left\{\left(\frac{1}{\sqrt{2}},0,\frac{1}{\sqrt{2}}\right),\left(0,\frac{1}{\sqrt{2}},0\right),\left(\frac{1}{\sqrt{2}},0,-\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\right\}$也是$R^3$的一组完备的正交归一化基矢。同样，在 Hilbert 空间下也存在这样的基矢。可以验证前述的$\{|0\rangle,|1\rangle\}$和$\{|+\rangle,|-\rangle\}$都是C^2的一组完备正交归一基。通常，$\{|0\rangle,|1\rangle\}$被称为直线基，而$\{|+\rangle,|-\rangle\}$对角基。

Example 3：

可以验证矢量$\frac{|0\rangle+j|1\rangle}{\sqrt{2}}=\begin{bmatrix}1\\ j\end{bmatrix}$和$\frac{|0\rangle-j|1\rangle}{\sqrt{2}}=\begin{bmatrix}1\\ -j\end{bmatrix}$也是$C^2$的一组完备正交归一基。

【注意】这几个特殊的量子态在理解测量假设时很关键，最好熟记它。

假设 3：投影测量（Projective Measurement）

任何一个力学可观测量（Observable）对应着数学上一个 Hermitian 算子[3]，记之为M，后面都称为测量算子。设λ_i表示M的本征值（Eigenvalue），$|\psi_i\rangle$为对应的本征态（Eigenstate），则根据谱分解定理[5]，算子M可以表示为

$$M=\sum_i \lambda_i P_i$$

这里P_i是属于λ_i的本征空间（Eigen space），如果本征值没有简并（Degeneration）[4]，即每一个本征值λ_i只对应一个本征态$|\psi_i\rangle$，那么P_i可表示为$P_i=|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$，有简并的情况详见附录。

【重要】关于 Hermitian 算子有几个非常重要的性质（可以自己证明）：

1. 其本征值必然为实数；
2. 属于不同本征值的本征态必然正交；
3. 本征空间P_i是一个投影算子（即满足$P_i={P_i}^2$且$P_i={P_i}^\dagger$）；
4. 全部本征态构成一组完备的正交基失，所有P_i之和满足

$$\sum_i P_i=I$$

此关系称为**完备性关系（Complete Relationship）**，而投影测量又称为完备性测量。

测量假设具体指出了，如果用测量算子M来测量某一量子态$|\psi\rangle$时，则测量后量子态只可能为M的本征态之一，当我们得到测量结果λ_i时（不必深究λ_i的具体物理意义是什么，可以理解为它只是一个标签，表明不同的测量结果），我们就说测量后的系统状态是$|\psi_i\rangle$，且这一事件的概率为

$$p(i)\equiv\langle\psi|{P_i}^\dagger P_i|\psi\rangle=\langle\psi|P_i|\psi\rangle$$

最后一步用到了投影算子的特性：${P_i}={P_i}^2$且$P_i={P_i}^\dagger$。

测量得到结果λ_i后，量子态$|\psi_i\rangle$可以表示为

$$|\psi_i\rangle=\frac{P_i|\psi\rangle}{\sqrt{p(i)}}=\frac{P_i|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_i|\psi\rangle}}$$

如上的表述是因为归一化的要求，易验证$\langle\psi_i|\psi_i\rangle=1$。

Example 4：

易验证如下算子是 Hermitian 算子，且其本征值是$\{\lambda_1=+1,\lambda_2=-1\}$，对应的本征态分别为为$\{|\psi_1\rangle=|0\rangle,|\psi_2\rangle=|1\rangle\}$：

$$\sigma_z \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^{2} \lambda_i P_i = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|$$

这个算子是著名的 Pauli 算子之一，，其余两个定义为

$$\sigma_x \equiv \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y \equiv \begin{bmatrix} 0 & -j \\ j & 0 \end{bmatrix}$$

这三个算子在量子信息中极其重要，必须要熟记！可以当作一个小练习：σ_x和σ_y的本征值都为$\{+1,-1\}$，其对应的本征态为$\{|+\rangle,|-\rangle\}$和$\left\{\begin{bmatrix}1\\ j\end{bmatrix},\begin{bmatrix}1\\ -j\end{bmatrix}\right\}$。

另设一个 2 维量子态（显然这是一个叠加态）

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

其中$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$。

根据测量假设，现在就可知道如果用σ_z来测量这个量子态，我们只能得到它的本征态$|0\rangle$或$|1\rangle$，且测量得到$|0\rangle$的概率为

$$p(0) = \langle\psi|P_0|\psi\rangle = (\alpha^*\langle 0| + \beta^*\langle 1|)|0\rangle\langle 0|(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) = \alpha^*\alpha = |\alpha|^2$$

上述运算用到了$|0\rangle$和$|1\rangle$的正交性。

而测量得到$|1\rangle$的概率为

$$p(1) = \langle\psi|P_1|\psi\rangle = (\alpha^*\langle 0| + \beta^*\langle 1|)|1\rangle\langle 1|(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) = \beta^*\beta = |\beta|^2$$

可以看出$p(0) + p(1) = |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$，也就是说无论量子态$|\psi\rangle$的具体表示是什么，用$\sigma_z$来测量这个量子态时，我们一定会得到$|0\rangle$或$|1\rangle$，这就是投影测量为什么又叫完备性测量的原因，即一定会得到测量结果，这也是数学上概率归一化的要求。

【疑问】另外有一个可能困惑的地方是：叠加态$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$是如何在测量后变为$|0\rangle$或$|1\rangle$的？关于这个问题，涉及到一个所谓的**量子塌缩（Quantum Collapse**）的概念，目前可以理解为叠加态在测量后立即塌缩到$|0\rangle$或$|1\rangle$，当然任何物理过程都是需要时间的，因此这个问题是量子力学的基础问题之一，所以搞不懂这个问题很正常了。量子力学精确地指出了会以多大的概率坍缩到某一个态上，但并没有说明是如何塌缩的。

【练习】下面两个问题如果能搞懂了，说明第一个量子密钥分发协议 BB84 协议就已经完全懂了。

1. 作为理解，可以试着求解一下如果制备一个$|0\rangle$态，用σ_z来测量这个量子态时得到$|0\rangle$态的概率是多少？得到$|1\rangle$态的概率又是多少？如果换成σ_x又会得到什么样的量子态？其概率分别是多少？
2. 同上问，如果制备的态换为$|+\rangle$，用σ_z或σ_x来测量时的情况是什么？

【补充】

关于测量假设，由于投影算子的全部本征态可以构成一组正交完备基$\{|\psi_i\rangle\}_{i=1}^{N}$，$N$表示空间维数（一组完备基的向量个数与空间维度相同）。那么对于任意一个量子态$|\psi\rangle$，我们总可以将这个态矢唯一地表示为该正交完备基的线性组合

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i|\psi_i\rangle$$

其中c_i是复数。这样一来，用该测量算子来测这个态矢时，得到某一本征态$|\psi_i\rangle$的概率即为其系数c_i的模方$|c_i|^2$。

【相位因子】下面我们会看到**全局相位因子$e^{j\varphi}$（Global Phase Factor，φ是实数）**对测量没有影响：

设一个量子态为$|\psi\rangle$，另设一个量子态为$|\psi'\rangle = e^{j\varphi}|\psi\rangle$，则在用某一测量算子测量这两个态时，得到某一个本征态$|\psi_i\rangle$的概率分别为

$$p(i) \equiv \langle\psi|{P_i}^\dagger P_i|\psi\rangle = \langle\psi|P_i|\psi\rangle$$
$$p'(i) \equiv \langle\psi'|{P_i}^\dagger P_i|\psi'\rangle = \langle\psi'|P_i|\psi'\rangle = e^{-j\varphi}e^{j\varphi}\langle\psi|P_i|\psi\rangle = \langle\psi|P_i|\psi\rangle = p(i)$$

上式利用了$(|\psi'\rangle)^\dagger = \left(e^{j\varphi}|\psi\rangle\right)^\dagger = e^{-j\varphi}\langle\psi|$。

这一现象是量子力学中特有的，然而**相对相位（Relative Phase）**则有明显的物理意义，具体来说，假设一个量子态为

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + e^{j\varphi}b|1\rangle$$

这里$e^{j\varphi}$即为相对相位，而φ, a和b均为实数，且满足$a^2 + b^2 = 1, \varphi \in [0,2\pi]$。

关于测量假设，我们还可以推出两个非常重要的定理——
一个是**海森堡不确定性原理（Heisenberg Uncertainty Principle），又称为测不准原理。**该定理指明了，任何两个非对易的力学量无法同时精确地测量。这里有一个新的数学概念：**对易（Communicate）[7]。**物理上非对易的力学量很多比如位置矢量r和动量p。这一定理与宏观直觉相违背：无论测量设备多么精确，我们都无法准确的测量一个量子态的位置和动量；而宏观世界中，我们总可以准确地测量一个物体的位置和动量。
另一个是**不可克隆定理（No-Cloning Theorem），**不可克隆定理指出了未知量子态是不可能被精确复制的。这一定理与宏观直觉相违背：宏观世界中，理论上我们总可以对一个经典比特进行精确地复制，例如经典计算机中的复制粘贴操作；但在量子世界中，我们无法对一个未知量子比特进行精确地复制。**这个定理是所有量子密钥分发协议的基石之一！**
（关于这两个定理的证明也不是很复杂，如果想要知道具体推导可以以后再叙述。）

假设 4：复合系统（Composite System）

假设描述量子系统A的 Hilbert 空间为$\mathcal{H}_A \in C^N$，而描述量子系统B的 Hilbert 空间为$\mathcal{H}_B \in C^M$。另设$|a\rangle$是系统A的一个状态而$|b\rangle$是系统B的一个状态，则此复合系统AB的量子态可以表为矢量直积（Tensor）形式

$$|a\rangle\otimes|b\rangle = |a\rangle|b\rangle = |a,b\rangle = |ab\rangle$$

【注意】上述最后一步并非a和b的乘积，仅是一种紧凑的表示形式（这就是狄拉克符号的强大之处之一）。例如

$$|0\rangle\otimes|1\rangle = |0\rangle|1\rangle = |01\rangle$$
$$|+\rangle\otimes|1\rangle = |+\rangle|1\rangle = |+1\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}|1\rangle = \frac{|0\rangle|1\rangle + |1\rangle|1\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|01\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}$$

上述第二个例子用到了直积的运算性质之一（线性），关于直积的运算性质稍后再讲，先给出具体的运算定义：
设

$$|a\rangle = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{bmatrix} \in C^N, |b\rangle = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_M \end{bmatrix} \in C^M$$

则

$$|a\rangle\otimes|b\rangle=\begin{bmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\\a_N\end{bmatrix}\otimes\begin{bmatrix}b_1\\b_2\\\vdots\\b_M\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}a_1\begin{bmatrix}b_1\\b_2\\\vdots\\b_M\end{bmatrix}\\a_2\begin{bmatrix}b_1\\b_2\\\vdots\\b_M\end{bmatrix}\\\vdots\\a_N\begin{bmatrix}b_1\\b_2\\\vdots\\b_M\end{bmatrix}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}a_1b_1\\a_1b_2\\\vdots\\a_1b_M\\a_2b_1\\a_2b_2\\\vdots\\a_2b_M\\a_Nb_1\\a_Nb_2\\\vdots\\a_Nb_M\end{bmatrix}\in C^{N\times M}$$

如上的直积运算是两个态间的直积，类似的还有两个矩阵间的直积运算：
设$A\in C^{m\times n},B\in C^{k\times l}$，其矩阵具体表示如下

$$A=\begin{bmatrix}a_{11}&\cdots&a_{1n}\\\vdots&\ddots&\vdots\\a_{m1}&\cdots&a_{mn}\end{bmatrix},B=\begin{bmatrix}b_{11}&\cdots&v_{1l}\\\vdots&\ddots&\vdots\\b_{k1}&\cdots&b_{kl}\end{bmatrix}$$

则

$$A\otimes B=\begin{bmatrix}a_{11}B&\cdots&a_{1n}B\\\vdots&\ddots&\vdots\\a_{m1}B&\cdots&a_{mn}B\end{bmatrix}\in C^{mk\times nl}$$

可见 Hilbert 空间是一个非常大的空间！

【重要】关于直积运算的性质，这几个性质非常重要，可以帮助更好地理解基本假设。

1. 复合系统运算的一个基础法则：
设$A\in C^{n\times n},B\in C^{m\times m},|a\rangle\in C^n,|b\rangle\in C^m$，则

$$(A\otimes B)\cdot(|a\rangle\otimes|b\rangle)=(A\cdot|a\rangle)\otimes(B\cdot|b\rangle)$$

上式描述的是A和B的直积再点乘$|a\rangle$和$|b\rangle$的直积等于 A 和$|a\rangle$的点乘再直积 B 和$|b\rangle$的点乘。
在不混淆的情况下，上式表示为

$$(A\otimes B)(|a\rangle\otimes|b\rangle)=(A|a\rangle)\otimes(B|b\rangle)$$

2. 满足线性：

$$A\otimes(bB+cC)=bA\otimes B+cA\otimes C$$
$$(aA+bB)\otimes C=aA\otimes C+bB\otimes C$$

3. 共轭转置的特性:

$$(A\otimes B)^\dagger=A^\dagger\otimes B^\dagger$$

【注意】不同于$(AB)^\dagger=B^\dagger A^\dagger$

4. 其它特性：
如果A和B都是酉算子，那么$A\otimes B$也是酉的；
如果A和B都是 Hermitian 的，那么$A\otimes B$也是 Hermitian 的。

复合系统假设给出了一种奇特的量子态——纠缠态（Entanglement State）：

$$|\phi^+\rangle\equiv\frac{|00\rangle+|11\rangle}{\sqrt{2}}$$

这是著名的**EPR 态**之一，又称为 **Bell 态**，另外三个是

$$|\phi^-\rangle\equiv\frac{|00\rangle-|11\rangle}{\sqrt{2}},|\psi^+\rangle\equiv\frac{|01\rangle+|10\rangle}{\sqrt{2}},|\psi^-\rangle\equiv\frac{|01\rangle-|10\rangle}{\sqrt{2}}$$

这几个量子态在理解量子隐形传态，量子超密编码时非常的重要，最好熟记。

可以验证这四个纠缠态构成C^4空间下的一组完备的正交归一化基矢。

暂时写这些吧。关于一般测量假设比较抽象，以后再解释吧。另外，关于量子力学基本假设的叙述还有一套更漂亮的叙述方式，但需要用到密度算子的概念。利用密度算子来解释量子力学基本假设的叙述还是以后再说吧，数学上主要用到了 Hermitian 算子的性质及矩阵的迹（Trace）。关于量子纠缠的概念，只有充分了解测量和复合系统假设才可以，所以暂时也不做叙述了。另外，关于量子态的描述还有纯态（Pure State）和混态（Mixed State）的概念，这些概念在密度算子中描述会更简单。

最后补充一些量子力学的其他内容：量子态$|\psi\rangle$具体代表的是物理上的什么东西？

关于$|\psi\rangle$的物理解释首先要追溯到德布罗意提出的**波粒二相性（wave particle duality）**，他认为任何物体都具有波动性和粒子性，其关系如下：

$$E = \hbar\omega, \boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$$

这里E是能量，ω是角频率。$\boldsymbol{p}$是动量，$\boldsymbol{k}$叫做**波矢**，是一个矢量，$\boldsymbol{k} = \frac{2\pi}{\lambda}\boldsymbol{n}$，$\lambda$是波长，$\boldsymbol{n}$是波的传播方向上的单位矢量。提出波粒二相性后，不久就观测到了电子的波动性，随后又陆续观测到了其它微观粒子的波动性。受德布罗意的启发，薛定谔决定寻找描述物质的波动性的方程，即薛定谔方程，实际上薛定谔方程是一个波动方程，所以$|\psi\rangle$是一个波函数，通常它是位矢$\boldsymbol{r}$和时间t的函数，所以更一般的波函数表示是$|\psi(\boldsymbol{r}, t)\rangle$。具体地，它可以用来描述电子的自旋态, 光子的偏振态, 原子的轨道角动量等等, 不同的量子系统有不同的空间维度，也有不同的系统哈密顿量。

然而关于波函数$|\psi(\boldsymbol{r}, t)\rangle$本身到底代表的是什么，历史上有过激烈的争辩：薛定谔提出薛定谔方程后，他认为波函数代表的是许多粒子组成波的形状，比如大量水分子组成水波一样，他认为电子的波函数也是由空间中大量的电子组成的波的形状在空间中传播。然而，电子的双缝干涉实验否定了这个解释，这个实验说明了即使是单个的电子也会出现波动性。随后又有人提出，电子的波函数表示的是电子在空间中是以一个波包的形式传播的，（简单地说就是一个电子就是空间中的一个波形），然而这种解释会导致电子会在传播过程中越来越“胖”，而实验观察到的电子总是在一个很狭小的空间内。直到后来玻姆提出了概率波的假说，即测量假设的早期解释：他认为波函数并不是代表实物粒子在空间中的某种波动，而是一种概率：$\langle\psi(\boldsymbol{r}, t)|\psi(\boldsymbol{r}, t)\rangle$表示粒子在$t$时刻出现在位置$\boldsymbol{r}$的概率，所以波函数又叫**概率波（Probability Wave）**。玻姆的概率波假说很快就得到了实验上的精确验证，然而却导致了物理学家的进一步困惑——为什么宏观世界上我们感觉不到波动性的存在？原因是宏观物体的波动性太小了，以致于无法察觉。更重要的是，玻姆的概率波假说迫使人们去重新看待物质的属性——即是波又是粒子。波是指它可以是概率的，可以产生干涉效应（干涉是波动的根本特征）；粒子是指它具有一定的质量和能量、电荷等属性。量子力学表明：世界是概率的。

即使这样，也让许多著名的物理学家感到震惊，包括薛定谔方程的提出者薛定谔，爱因斯坦也极力反对概率波的解释。薛定谔提出了著名的假想实验——**薛定谔的猫**，来试图说明量子力学不合理的地方, 根据态叠加原理和概率波解释, 薛定谔的猫是一个生死叠加的状态，只有测量时，它才会坍缩到确定的状态。而爱因斯坦则提出了著名的 **EPR 谬论**，以表明量子力学的不完备性。EPR 谬论指出，纠缠作用是一种超光速的作用，爱因斯坦称之为“鬼魅的超距作用”。然而目前为止，所有的实验都表明量子力学都是正确的，著名的隐形传态就是利用了爱因斯坦的 EPR 谬论。正是因为量子力学的基本假设过于违背宏观直觉，历史上不断的有学者质疑量子力学的“真伪”性。正如增谨言在《量子力学》教程里写道：“我们相信它是正确的，是因为目前为止，在所有的实验中量子力学的预言都是出奇的正确。”

Appendix：

1. 线性算子的定义，满足如下性质的算子即为线性算子：

$$A(\alpha|a\rangle+\beta|b\rangle)=\mathrm{a}A|a\rangle+\beta A|b\rangle$$

2. 数学上满足如下关系的即为酉算子：

$$UU^{\dagger}=U^{\dagger}U=I$$

其中$U^{\dagger}$表示U的共轭转置，I是单位算子。

酉算子的一般性质：两个酉算子的乘积仍为酉算子。

3. 数学上满足如下关系的即为 Hermitian 算子：

$$M^{\dagger}=M$$

Hermitian 算子的一般性质：两个 Hermitian 算子之和仍为 Hermitian 算子。

4. 特征值和特征方程和简并：

数学上满足如下矩阵方程的λ和$|\psi\rangle$就是矩阵A的特征值和特征向量：

$$A|\psi\rangle=\lambda|\psi\rangle$$

其求解方法可以是

$$(A-\lambda I)|\psi\rangle=0$$

$$\det(A-\lambda I)=0$$

上面最后一式称为特征方程，$\det(\cdot)$表示行列式，对于一般的$N\times N$维矩阵A，特征方程是一个N阶多项式，方程存在N个根。物理上的简并是指数学上的特征值有重根，具体而言一个特征值对应多个特征向量。举个例子：如下的算子的本征态是简并的

$$M=\begin{bmatrix}0&1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&0&1\\0&0&1&0\end{bmatrix}$$

M有两个不同的本征值$+1$和-1，属于$+1$的本征态为$|u_1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\1\\0\\0\end{bmatrix}$和$|u_2\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0\\0\\1\\1\end{bmatrix}$，属于$-1$的本征态为$|v_1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\-1\\0\\0\end{bmatrix}$和$|v_2\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0\\0\\1\\-1\end{bmatrix}$，它们都是 2 重简并的。如果记$P_+$和$P_-$是分别属于$+1$和$-1$的本征空间，则

$$P_+=|u_1\rangle\langle u_1|+|u_2\rangle\langle u_2|$$

$$P_-=|v_1\rangle\langle v_1|+|v_2\rangle\langle v_2|$$

易验证，M是一个 Hermitian 算子，所以P_+和P_-都是投影算子且$P_++P_-=I$，另外这四个本征态$|u_1\rangle,|u_2\rangle,|v_1\rangle,|v_2\rangle$构成$C^4$空间下的一组完备正交归一基。

5. 正规算子和谱分解定理

一个算子A是正规算子（Normal Operator）当且仅当其满足：

$$AA^{\dagger}=A^{\dagger}A$$

易验证酉算子和 Hermitian 算子都是正规算子。

谱分解定理（Spectral Decomposition Theorem）：设算子 A 属于本征值λ_i（数学上称为特征值）的本征态（特征向量）$|\psi_i\rangle$，下角标表示可能存在许多不同的本征值，那么算子 A 可以表示为

$$A=\sum_i\lambda_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$$

谱分解的证明在一般的矩阵论教材也都会讲到。

6. 矩阵函数（Matrix Function）

一般的矩阵函数$\boldsymbol{f(A)}$定义及求解在矩阵论教材里都会有，不过量子信息学里更感兴趣的是$\boldsymbol{A}$是 Hermitian 算子的矩阵函数。根据谱分解定理，$\boldsymbol{A}$可以表示为

$$\boldsymbol{A} = \sum_{\boldsymbol{i}} \boldsymbol{\lambda_i} |\boldsymbol{\psi_i}\rangle\langle\boldsymbol{\psi_i}|$$

则

$$\boldsymbol{f(A)} \equiv \sum_{\boldsymbol{i}} \boldsymbol{f(\lambda_i)} |\boldsymbol{\psi_i}\rangle\langle\boldsymbol{\psi_i}|$$

例如

$$\boldsymbol{f(x)} = \boldsymbol{e^x}$$

则

$$\boldsymbol{f(A)} \equiv \sum_{\boldsymbol{i}} \mathbf{e}^{\boldsymbol{\lambda_i}} |\boldsymbol{\psi_i}\rangle\langle\boldsymbol{\psi_i}|$$

Example：

试证明$\boldsymbol{U(t)} \equiv \boldsymbol{e}^{-\frac{\boldsymbol{jHt}}{\hbar}}$是一个酉算子，其中$\boldsymbol{H}$是一个 Hermitian 算子。

7. 对易与反对易（Commutation & Anti-Commutation）

设两个同型的 Hermitian 算子$\boldsymbol{A}$和$\boldsymbol{B}$，它们是对易的当且仅当如下等式成立：

$$\boldsymbol{AB} = \boldsymbol{BA}$$

记$[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}] \equiv \boldsymbol{AB} - \boldsymbol{BA}$，则$\boldsymbol{A}$和$\boldsymbol{B}$对易当且仅当$[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}] = \mathbf{0}$。

记$\{\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\} \equiv \boldsymbol{AB} + \boldsymbol{BA}$，则$\boldsymbol{A}$和$\boldsymbol{B}$反对易当且仅当$\{\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\} = \mathbf{0}$。

Example：

可以证明两个同型的 Hermitian 算子$\boldsymbol{A}$和$\boldsymbol{B}$，当且仅当$\boldsymbol{A}$和$\boldsymbol{B}$有相同的本征态时，它们对易。

可以证明两个同型的 Hermitian 算子$\boldsymbol{A}$和$\boldsymbol{B}$，当且仅当$[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}] = \mathbf{0}$时，有

$$\boldsymbol{e^A e^B} = \boldsymbol{e^{A+B}} = \boldsymbol{e^{B+A}}$$