

量子信息导论：模块 1——数学基础（精简重构版）

【了解】希腊字母读音表

大写	小写	英文名	读音（汉语拼音）
Ψ	ψ	psi	sai（赛）
Φ	ϕ, φ	phi	fai（fei）
Θ	θ	theta	sita（西塔）
Λ	λ	lambda	lamuda（兰姆达）
Σ	σ	sigma	xigema（西格玛）
Ω	ω	omega	omiga（欧米伽）
Δ	δ	delta	delta（德尔塔）
Γ	γ	gamma	gama（伽玛）
Π	π	pi	pai（派）
-	α	alpha	aerfǎ（阿尔法）
-	β	beta	beita（贝塔）
-	γ	gamma	gama（伽玛）
-	ϵ, ε	epsilon	yipuxilóng（伊普西龙）
-	η	eta	yita（伊塔）
-	κ	kappa	kapa（卡帕）
-	μ	mu	miù（谬）
-	ν	nu	niǔ（纽）
-	ρ	rho	ròu（肉）
-	τ	tau	tao（涛）
-	χ	chi	kǎi（凯）

常见符号

- $|\psi\rangle$: 量子态 (ket), 读作“ket-sai”或“态-赛”
- $\langle\phi|$: 对偶态 (bra), 读作“bra-fei”或“对偶-fei”
- $\langle\phi|\psi\rangle$: 内积, 读作“bra-fei-ket-sai”
- λ : 本征值 (eigenvalue), 读作“兰姆达”
- σ : Pauli 矩阵, 读作“西格玛”
- \dagger : 厄米共轭 (Hermitian conjugate), 读作“dagger”或“匕首”

【了解】学习目标

本模块专注于量子信息的数学语言。完成学习后，你应能：

- 熟练进行复数运算（模、共轭、指数形式）
- 掌握向量/矩阵的基本运算和 Dirac 记号
- 理解线性组合、线性无关、基与维数
- 理解内积、正交归一基、完备关系

- 理解基变换与酉矩阵的关系
- 熟悉矩阵常用操作（转置、迹、行列式、逆）
- 计算厄米/酉矩阵的本征值与本征向量
- 使用张量积描述复合量子系统
- 判断算符是否对易或反对易并理解其物理意义
- 计算基本测量概率并理解 Born 规则
- 使用密度算子描述混态并进行偏迹

Contents

1 【背】复数 (Complex Numbers)	4
1.1 【背】定义与基本运算	4
2 【背】向量空间与 Dirac 记号	5
2.1 【背】向量与矩阵	5
2.2 【背】线性空间的基本概念	8
2.3 【背】厄米共轭 (Hermitian Conjugate)	8
2.4 【背】内积 (Inner Product)	9
2.5 【背】外积 (Outer Product) 与投影	11
2.6 【背】正交归一基 (Orthonormal Basis)	11
2.7 【背】基变换与酉矩阵	13
2.8 【了解】离散谱与连续谱 (Dirac δ 归一化)	16
3 【背】线性算符 (Linear Operators)	17
3.1 【了解】基本概念	17
3.2 【背】测量不确定度 (标准偏差)	18
3.3 【背】厄米算符 (Hermitian Operators)	20
3.4 【背】酉算符 (Unitary / 么正 Operators)	20
3.5 【背】算符的矩阵表示 (Matrix Elements)	21
3.6 【背】算符的基变换	24
3.7 【背】期望值与演化的矩阵形式	25
3.8 【背】厄米算符的矩阵性质	27
3.9 【了解】连续基中的矩阵表示	28
3.10 【背】Pauli 矩阵	30
4 【背】本征值与本征向量 (Eigenvalues & Eigenvectors)	30
4.1 【背】定义与几何意义	30
4.2 【背】厄米算符的谱定理	36
5 【背】张量积 (Tensor Product)	40
5.1 【背】定义与维度	41
5.2 【背】运算规则	41
5.3 【背】量子比特系统	43
5.4 【了解】Bell 态 (纠缠态例子)	44
6 【背】对易子 (Commutators)	44
6.1 【背】定义	44
6.2 【背】同时对角化定理	44
6.3 【背】重要例子	45

7	【背】重要不等式	45
7.1	【背】Cauchy-Schwarz 不等式	45
7.2	【了解】三角不等式	45
8	【背】量子力学基本假设 (Postulates)	46
8.1	【背】公设一 (假设一): 状态空间与量子态	46
8.2	【背】公设二 (假设二): 演化 (Unitary Evolution)	49
8.3	【背】公设三 (假设三): 测量 (Measurement)	50
8.4	【背】公设四 (假设四): 复合系统 (Composite Systems)	56
9	【了解】波函数与连续表象	61
10	【了解】定态薛定谔方程与典型模型	62
10.1	【了解】定态薛定谔方程	62
10.2	【了解】本征函数性质与边界条件	62
10.3	【了解】典型模型 (速记)	63
11	【了解】算符、对易关系与期望值演化	63
12	【了解】薛定谔/海森堡/相互作用表象	64
13	【背】态叠加与概率幅度规则	64
14	【背】表象与酉变换	65
15	【了解】位置/动量表象与傅里叶变换	66
16	【背】密度算子与混合态	66
17	【了解】测不准关系 (补充)	79
18	【了解】量子纠缠、EPR 佯谬与贝尔不等式	80
18.1	【了解】纠缠态的定义	80
18.2	【了解】EPR 佯谬	82
18.3	【了解】贝尔不等式 (CHSH 形式)	82
19	【了解】量子超密编码 (Superdense Coding)	82
20	【了解】量子线路与量子逻辑门	83
20.1	【了解】线路模型	83
20.2	【背】常用单比特门	83
20.3	【背】受控运算	84
20.4	【了解】可逆性与辅助比特	86
20.5	【了解】通用门集	86
21	【了解】量子计算概述与算法	86
21.1	【了解】经典计算瓶颈	86
21.2	【了解】动机与基本需求	86
21.3	【了解】两类量子计算机	87
21.4	【了解】典型量子算法	87
21.5	【了解】量子计算平台概览 (常见实现)	88
21.6	【了解】量子退火与应用示例 (概览)	88

22 【了解】量子通信	88
22.1 【了解】基本概念	88
22.2 【了解】量子隐形传态 (Teleportation)	89
22.3 【了解】量子密钥分发 (QKD)	90
22.4 【了解】量子中继与网络	91
22.5 【了解】量子隐形传态研究进展 (课件提要)	93
22.6 【了解】量子通信网络进展 (课件提要)	93
23 【了解】常见题型总结	93

1 【背】复数 (Complex Numbers)

1.1 【背】定义与基本运算

定义 复数 $z = x + iy$, 其中 $x, y \in \mathbb{R}$, $i^2 = -1$ 。

核心运算

- **复共轭:** $z^* = x - iy$
- **模:** $|z| = \sqrt{x^2 + y^2} = \sqrt{zz^*}$
- **逆:** $z^{-1} = \frac{z^*}{|z|^2} = \frac{x - iy}{x^2 + y^2}$
- **指数形式:** $z = |z|e^{i\theta}$, 其中 $\theta = \arg(z) = \arctan(y/x)$

模方展开 (常用) 对任意复数 α, β ,

$$|\alpha + \beta|^2 = (\alpha + \beta)(\alpha + \beta)^* = |\alpha|^2 + |\beta|^2 + 2 \operatorname{Re}(\alpha\beta^*)$$

若 $a, b \in \mathbb{R}$ 且 $\beta = be^{i\phi}$ 、 $\alpha = a$, 则

$$|a + be^{i\phi}|^2 = a^2 + b^2 + 2ab \cos \phi$$

因此模方一定是实数且非负; 相位只通过 $\cos \phi$ 进入干涉项。

重要性质

$$(z^*)^* = z \tag{1}$$

$$(z + w)^* = z^* + w^* \tag{2}$$

$$(z - w)^* = z^* - w^* \tag{3}$$

$$(zw)^* = z^*w^* \tag{4}$$

$$\left(\frac{z}{w}\right)^* = \frac{z^*}{w^*} \quad (w \neq 0) \tag{5}$$

$$|zw| = |z||w| \tag{6}$$

$$|e^{i\theta}| = 1 \tag{7}$$

$$(e^{i\theta})^* = e^{-i\theta} \tag{8}$$

几何表示与欧拉公式 复数 $z = x + iy$ 对应复平面上一点 (x, y) , 模长 $|z|$ 为到原点距离, 幅角为 $\theta = \arg z$ 。欧拉公式给出

$$e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$$

从而

$$z = |z|(\cos \theta + i \sin \theta) = |z|e^{i\theta}$$

由此得到 De Moivre 公式:

$$(re^{i\theta})^n = r^n e^{in\theta}$$

例题

计算 $(1+i)^8$

解:

1. 写成指数形式: $1+i = \sqrt{2} e^{i\pi/4}$ (因为 $|1+i| = \sqrt{2}$, $\arg(1+i) = \pi/4$)

2. 计算幂次:

$$(1+i)^8 = (\sqrt{2})^8 e^{i8\pi/4} = 2^4 e^{i2\pi} = 16 \cdot 1 = 16$$

例题

求 $z = 3+4i$ 的逆

解:

$$1. |z|^2 = 3^2 + 4^2 = 25$$

$$2. z^{-1} = \frac{3-4i}{25} = \frac{3}{25} - \frac{4}{25}i$$

2 【背】向量空间与 Dirac 记号

Dirac (狄拉克) 记号 也称 bra-ket 记号, 用 $\langle \cdot |$ 与 $| \cdot \rangle$ 统一书写向量与对偶向量, 便于表达内积与算符作用。

希尔伯特空间 量子态所在的数学空间是复内积空间, 通常称为希尔伯特空间。有限维情形下可以等同于 \mathbb{C}^n , 其向量、内积与线性算符的运算规则与线性代数一致。

2.1 【背】向量与矩阵

列向量 (ket)

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, \quad a_i \in \mathbb{C}$$

行向量 (bra)

$$\langle \psi | = (|\psi\rangle)^\dagger = (a_1^* \ a_2^* \ \cdots \ a_n^*)$$

注: \dagger 表示厄米共轭 (conjugate transpose), 即先复共轭再转置。

常用 ket (计算基与相关基) 单比特计算基:

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Hadamard (哈达玛) 基:

$$|+\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |-\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

Y 基:

$$|+i\rangle = \frac{|0\rangle + i|1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |-i\rangle = \frac{|0\rangle - i|1\rangle}{\sqrt{2}}$$

常用两比特计算基 (张量积):

$$|00\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle, |01\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle, |10\rangle = |1\rangle \otimes |0\rangle, |11\rangle = |1\rangle \otimes |1\rangle$$

常用纠缠态 (Bell 态)

$$|\Phi^+\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |\Phi^-\rangle = \frac{|00\rangle - |11\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$|\Psi^+\rangle = \frac{|01\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |\Psi^-\rangle = \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}}$$

常用三比特计算基

$$|000\rangle, |001\rangle, |010\rangle, |011\rangle, |100\rangle, |101\rangle, |110\rangle, |111\rangle$$

矩阵乘法 若 A 为 $m \times n$ 矩阵, B 为 $n \times p$ 矩阵, 则

$$(AB)_{ij} = \sum_{k=1}^n A_{ik}B_{kj}$$

矩阵的基本操作

- 转置: A^T , 满足 $(A^T)_{ij} = A_{ji}$
- 共轭: A^* , 满足 $(A^*)_{ij} = (A_{ij})^*$
- 迹: $\text{tr}(A) = \sum_i A_{ii}$, 满足 $\text{tr}(AB) = \text{tr}(BA)$
- 行列式: $\det(A)$, 若 $\det(A) \neq 0$ 则 A 可逆
- 不可交换性: 一般有 $AB \neq BA$

迹的直观计算 (补充) 矩阵的迹就是主对角线元素之和。例如

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \Rightarrow \text{tr}(A) = a + d$$

若是分块矩阵

$$M = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix},$$

则 $\text{tr}(M) = \text{tr}(A) + \text{tr}(D)$ (与非对角块 B, C 无关)。

行列式与可逆性 (补充) 齐次方程 $Mx = 0$ 有非零解 $\Leftrightarrow M$ 不可逆。线性代数结论: M 可逆 $\Leftrightarrow \det(M) \neq 0$, 因此

$$Mx = 0 \text{ 有非零解} \Leftrightarrow \det(M) = 0$$

行列式可理解为矩阵对体积的缩放因子: 若 $\det \neq 0$, 体积被缩放且矩阵可逆; 若 $\det = 0$, 体积被压扁到更低维, 矩阵不可逆, 因此才可能有非零解。

不可交换性的几何直觉 二维空间中“先旋转后剪切”与“先剪切后旋转”通常给出不同结果, 反映了矩阵乘法的顺序依赖性。

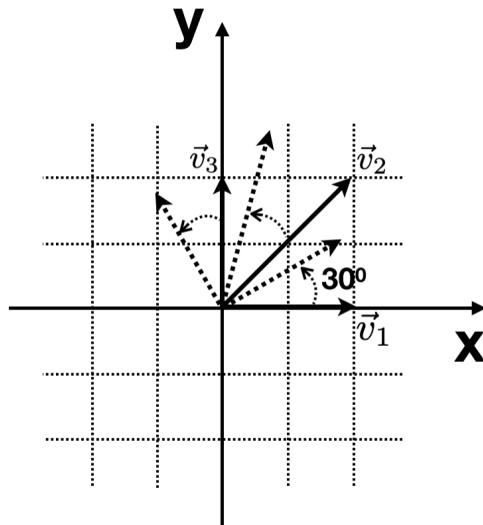


Figure 1: 二维向量旋转/线性变换的几何直观示意。

常见矩阵类型

- **对角矩阵:** 非对角元为 0, 对角矩阵之间可交换
- **单位矩阵:** $I = \text{diag}(1, 1, \dots, 1)$
- **对称矩阵:** $A = A^T$ (实矩阵情形)
- **逆矩阵:** $AA^{-1} = A^{-1}A = I$ (并非所有矩阵都有逆)

对角矩阵的投影分解 (补充) 设标准基 $\{|e_j\rangle\}$ 为“第 j 个分量为 1, 其余为 0”的向量, 则任意对角矩阵

$$D = \text{diag}(d_1, \dots, d_n)$$

可写成

$$D = \sum_{j=1}^n d_j |e_j\rangle\langle e_j|$$

理由: 对任意 k , 有 $D|e_k\rangle = d_k|e_k\rangle$, 而

$$\left(\sum_j d_j |e_j\rangle\langle e_j| \right) |e_k\rangle = \sum_j d_j |e_j\rangle\langle e_j| |e_k\rangle = d_k |e_k\rangle$$

因此两算符对标准基作用相同, 故相等。

数值例子：取

$$D = \text{diag}(2, 3) = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}, \quad |e_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |e_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

则

$$|e_1\rangle\langle e_1| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad |e_2\rangle\langle e_2| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

所以

$$2|e_1\rangle\langle e_1| + 3|e_2\rangle\langle e_2| = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} = D.$$

2.2 【背】线性空间的基本概念

线性组合与张成 给定向量集合 $\{|v_1\rangle, \dots, |v_k\rangle\}$, 其线性组合为

$$\sum_{j=1}^k c_j |v_j\rangle, \quad c_j \in \mathbb{C}$$

所有线性组合的集合称为该集合的**张成** (span)。

索引集 (补充) 索引集是用来标记一族对象的集合, 例如 $\{v_k\}_{k \in \mathcal{I}}$ 表示“用 $k \in \mathcal{I}$ 来编号”的向量族。这里的 \mathcal{I} (有时也写作 I) 就是**索引集合本身**, 它可以是任意集合, 常见如有限情形 $\{1, \dots, n\}$ 或无限情形 \mathbb{N} 。为避免与本文中的单位算符 I 混淆, 这里通常写作 \mathcal{I} 。例如取 $\mathcal{I} = \{1, 2, 3\}$, 则 $\{v_k\}_{k \in \mathcal{I}} = \{v_1, v_2, v_3\}$, 表示用 1、2、3 给这三个向量编号。

线性无关与线性相关 若

$$\sum_{j=1}^k c_j |v_j\rangle = 0 \Rightarrow c_1 = \dots = c_k = 0$$

则 $\{|v_j\rangle\}$ 线性无关; 否则线性相关。

基与维数 一组向量若既线性无关又能张成整个空间, 则称为**基**。基向量个数称为**维数**。

坐标表示 在基 $\{|e_i\rangle\}$ 下, 任意向量可表示为

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

若基为正交归一, 则 $c_i = \langle e_i | \psi \rangle$ 。

2.3 【背】厄米共轭 (Hermitian Conjugate)

定义 对于任意矩阵或算符 A , 其**厄米共轭** (或称**共轭转置**) 记作 A^\dagger 。若 A 表示 A 在某一基下的矩阵表示, 则矩阵元满足

$$(A^\dagger)_{ij} = (A_{ji})^*$$

注意: 对于向量, $\langle \psi | = (|\psi\rangle)^\dagger$ 就是将列向量做厄米共轭得到行向量。

重要运算性质

1. 双重共轭: $(A^\dagger)^\dagger = A$
2. 线性性质:
 - $(cA)^\dagger = c^* A^\dagger$ (其中 c 为复数)
 - $(A + B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$
3. 乘积的共轭: $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$ (注意顺序反转)
4. 内积关系: $\langle \phi | A | \psi \rangle = \langle A^\dagger \phi | \psi \rangle = \langle \psi | A^\dagger | \phi \rangle^*$

推导

内积关系的详细推导: 把态写成列向量, 则 $\langle \phi | = (|\phi\rangle)^\dagger = \phi^\dagger$,

$$\langle \phi | A | \psi \rangle = \phi^\dagger A \psi$$

而伴随算符满足 $(A^\dagger \phi)^\dagger = \phi^\dagger A$, 因此

$$\phi^\dagger A \psi = (A^\dagger \phi)^\dagger \psi = \langle A^\dagger \phi | \psi \rangle$$

关于共轭: 对任意内积都有 $\langle u | v \rangle^* = \langle v | u \rangle$, 于是

$$(\langle A^\dagger \phi | \psi \rangle)^* = \langle \psi | A^\dagger \phi \rangle = \langle \psi | A^\dagger | \phi \rangle$$

从而得到

$$\langle \phi | A | \psi \rangle = \langle A^\dagger \phi | \psi \rangle = \langle \psi | A^\dagger | \phi \rangle^*$$

例题

验证乘积的共轭性质

设 $A = \begin{pmatrix} 1 & i \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, $B = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$, 验证 $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$ 。

解:

$$\begin{aligned} AB &= \begin{pmatrix} 1 & i \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2+i & 3i \\ 1 & 3 \end{pmatrix} \\ (AB)^\dagger &= \begin{pmatrix} 2-i & 1 \\ -3i & 3 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

另一方面:

$$\begin{aligned} A^\dagger &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -i & 1 \end{pmatrix}, \quad B^\dagger = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} \\ B^\dagger A^\dagger &= \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -i & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2-i & 1 \\ -3i & 3 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

因此 $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \checkmark$

2.4 【背】内积 (Inner Product)

定义

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_{k=1}^n a_k^* b_k \in \mathbb{C}$$

其中 $|\phi\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$, $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$ 。

基本性质

1. 共轭对称: $\langle\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^*$
2. 对第二变量线性: $\langle\phi|(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1\langle\phi|\psi_1\rangle + c_2\langle\phi|\psi_2\rangle$
3. 对第一变量共轭线性: $\langle c_1\phi_1 + c_2\phi_2|\psi\rangle = c_1^*\langle\phi_1|\psi\rangle + c_2^*\langle\phi_2|\psi\rangle$
4. 正定性: $\langle\psi|\psi\rangle \geq 0$, 且 $\langle\psi|\psi\rangle = 0 \Leftrightarrow |\psi\rangle = 0$

夹心表达式 (矩阵元) 性质 给定算符 A , 夹心表达式 (矩阵元)

$$\langle\phi|A|\psi\rangle$$

满足:

- 对 ket 线性: $\langle\phi|A(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1\langle\phi|A|\psi_1\rangle + c_2\langle\phi|A|\psi_2\rangle$
- 对 bra 共轭线性: $\langle c_1\phi_1 + c_2\phi_2|A|\psi\rangle = c_1^*\langle\phi_1|A|\psi\rangle + c_2^*\langle\phi_2|A|\psi\rangle$
- 共轭关系:

$$(\langle\phi|A|\psi\rangle)^* = \langle\psi|A^\dagger|\phi\rangle$$

特别地, 若 A 为厄米算符 ($A^\dagger = A$), 则

$$\langle\psi|A|\psi\rangle \in \mathbb{R}$$

推导:

$$(\langle\psi|A|\psi\rangle)^* = \langle\psi|A^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle$$

因此它等于自身的复共轭, 必为实数。

范数 (norm) 与归一化

- 范数: $\|\psi\| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$
- 归一化: 若 $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, 称 $|\psi\rangle$ 已归一化
- 归一化方法: $|\tilde{\psi}\rangle = \frac{|\psi\rangle}{\|\psi\|}$

例题

归一化向量 $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 1 \end{pmatrix}$

解:

1. 计算内积:

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1^* \cdot 1 + i^* \cdot i + 1^* \cdot 1 = 1 + (-i)(i) + 1 = 1 + 1 + 1 = 3$$

2. 归一化:

$$|\tilde{\psi}\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 1 \end{pmatrix}$$

3. 验证: $\langle\tilde{\psi}|\tilde{\psi}\rangle = \frac{1}{3} \cdot 3 = 1 \checkmark$

2.5 【背】外积 (Outer Product) 与投影

定义

$|u\rangle\langle v|$ 是一个矩阵 (算符)

作用规则

$$(|u\rangle\langle v|)|w\rangle = |u\rangle\langle v|w\rangle$$

注意: $\langle v|w\rangle$ 是一个复数, 所以结果是 $|u\rangle$ 乘以这个复数。

矩阵元形式 若 $|u\rangle = (u_1, \dots, u_n)^T$, $|v\rangle = (v_1, \dots, v_n)^T$, 则

$$[|u\rangle\langle v|]_{ij} = u_i v_j^*$$

这里的共轭来自 bra: $\langle v| = (\langle v|)^{\dagger} = \sum_j v_j^* \langle j|$, 所以矩阵元中对 v_j 取共轭, 而不是对 u_i 取共轭。

投影算符 若 $|\psi\rangle$ 已归一化, 则

$$P_{\psi} = |\psi\rangle\langle\psi|$$

满足 $P_{\psi}^2 = P_{\psi}$ (幂等性) 和 $P_{\psi}^{\dagger} = P_{\psi}$ (厄米性)。

2.6 【背】正交归一基 (Orthonormal Basis)

Kronecker delta 符号 定义 Kronecker delta (克罗内克 delta) 符号:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

这是一个非常常用的记号, 用来简洁地表示“相等时为 1, 不等时为 0”。

正交与归一化

- 正交: 若 $\langle\phi|\psi\rangle = 0$, 则称 $|\phi\rangle$ 与 $|\psi\rangle$ 正交
- 归一化: 若 $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, 则称 $|\psi\rangle$ 已归一化

正交归一基 (ONB) 的定义 一组向量 $\{|e_1\rangle, \dots, |e_n\rangle\}$ 称为正交归一基, 如果它们满足:

$$\boxed{\langle e_i|e_j\rangle = \delta_{ij}}$$

即:

- 当 $i \neq j$ 时, $\langle e_i|e_j\rangle = 0$ (互相正交)
- 当 $i = j$ 时, $\langle e_i|e_i\rangle = 1$ (各自归一化)

单位算符 (恒等算符) 单位算符 I (Identity operator) 满足: 对任意向量 $|\psi\rangle$, 都有

$$I|\psi\rangle = |\psi\rangle$$

在有限维空间 \mathbb{C}^n 中, I 就是 $n \times n$ 单位矩阵:

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

完备关系（单位分解） 若 $\{|e_1\rangle, \dots, |e_n\rangle\}$ 是正交归一基，则单位算符可以表示为：

$$I = \sum_{j=1}^n |e_j\rangle\langle e_j|$$

这个公式称为**完备关系或单位分解**。

推导

证明：对任意 $|\psi\rangle$, 设 $|\psi\rangle = \sum_k c_k |e_k\rangle$, 则

$$\begin{aligned} \left(\sum_j |e_j\rangle\langle e_j| \right) |\psi\rangle &= \sum_j |e_j\rangle\langle e_j| \left(\sum_k c_k |e_k\rangle \right) \\ &= \sum_{j,k} c_k |e_j\rangle\langle e_j| |e_k\rangle \\ &= \sum_{j,k} c_k |e_j\rangle \delta_{jk} \quad (\text{利用 } \langle e_j|e_k\rangle = \delta_{jk}) \\ &= \sum_j c_j |e_j\rangle = |\psi\rangle \end{aligned}$$

因此 $\sum_j |e_j\rangle\langle e_j| = I$ 。

应用：展开系数计算 若 $|\psi\rangle = \sum_j c_j |e_j\rangle$, 对等式两边左乘 $\langle e_k|$:

$$\langle e_k|\psi\rangle = \sum_j c_j \langle e_k|e_j\rangle = \sum_j c_j \delta_{kj} = c_k$$

因此 $c_k = \langle e_k|\psi\rangle$ 。

测量概率与展开系数（补充） 在基 $\{|e_j\rangle\}$ 上测量，结果 e_j 的概率为

$$p(j) = |c_j|^2 = |\langle e_j|\psi\rangle|^2$$

测量后态塌缩为对应本征态 $|e_j\rangle$ 。

例题

计算基展开

设计算基 $|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, 求 $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 3 \\ 4i \end{pmatrix}$ 在该基下的展开系数。

解：

$$\begin{aligned} c_0 &= \langle 0|\psi\rangle = (1 \quad 0) \begin{pmatrix} 3 \\ 4i \end{pmatrix} = 3 \\ c_1 &= \langle 1|\psi\rangle = (0 \quad 1) \begin{pmatrix} 3 \\ 4i \end{pmatrix} = 4i \end{aligned}$$

因此 $|\psi\rangle = 3|0\rangle + 4i|1\rangle$ 。

正交归一本征基（补充） 若一组正交归一向量同时是某算符 A 的本征向量，则称为 A 的**正交归一本征基**。若本征值不简并，对应本征向量天然正交；若简并，可在该本征子空间内做 Gram–Schmidt 正交化得到正交归一基。本征值/本征向量的定义见[本征值与本征向量](#)。

正交归一基与酉算符 若将正交归一基按列排成矩阵

$$U = (|\phi_1\rangle \ |\phi_2\rangle \ \cdots \ |\phi_n\rangle)$$

则 $U^\dagger U = I$ ，因此 U 为酉算符。反之，任一酉算符的列向量构成正交归一基。同一事实也可写成完备关系：

$$UU^\dagger = \sum_{j=1}^n |\phi_j\rangle\langle\phi_j| = I$$

2.7 【背】基变换与酉矩阵

从展开系数到基变换 我们已经知道，给定正交归一基 $\{|e_i\rangle\}$ ，任意向量 $|\psi\rangle$ 可展开为

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

其中展开系数由内积给出： $c_i = \langle e_i | \psi \rangle$ 。

现在考虑：如果我们有另一组正交归一基 $\{|f_j\rangle\}$ ，同一个向量 $|\psi\rangle$ 也可在新基下展开：

$$|\psi\rangle = \sum_j c'_j |f_j\rangle, \quad c'_j = \langle f_j | \psi \rangle$$

这引出一个核心问题：**新基 $|f_j\rangle$ 和旧基 $|e_i\rangle$ 之间是什么关系？**

新基在旧基下的展开 由于 $\{|e_i\rangle\}$ 是完备基，新基向量 $|f_j\rangle$ 本身也可在旧基下展开。利用完备关系 $I = \sum_i |e_i\rangle\langle e_i|$ ：

$$|f_j\rangle = I|f_j\rangle = \sum_i |e_i\rangle\langle e_i|f_j\rangle = \sum_i \langle e_i | f_j \rangle |e_i\rangle$$

这告诉我们： $|f_j\rangle$ 在旧基下的第 i 个系数就是 $\langle e_i | f_j \rangle$ 。

基变换矩阵的定义 将所有新基向量在旧基下的系数收集起来，定义**基变换矩阵**

$$U_{ij} = \langle e_i | f_j \rangle$$

则上述展开公式可写成

$$|f_j\rangle = \sum_i U_{ij} |e_i\rangle$$

直观意义： U 的第 j 列就是新基向量 $|f_j\rangle$ 在旧基下的展开系数。

列矩阵写法（常用） 把基向量并成列矩阵，上式可写成

$$(|f_1\rangle \ |f_2\rangle \ \cdots \ |f_n\rangle) = (|e_1\rangle \ |e_2\rangle \ \cdots \ |e_n\rangle)U$$

这只是“按列展开”的记号：第 j 列等式就是 $|f_j\rangle = \sum_i U_{ij} |e_i\rangle$ 。

基变换矩阵必为酉矩阵 由于新旧基都是正交归一的，基变换必须保持内积与长度。利用完备关系验证：

$$\begin{aligned}(U^\dagger U)_{jk} &= \sum_i U_{ij}^* U_{ik} = \sum_i \langle f_j | e_i \rangle \langle e_i | f_k \rangle \\&= \langle f_j | \left(\sum_i |e_i\rangle\langle e_i| \right) |f_k\rangle = \langle f_j | I | f_k \rangle = \langle f_j | f_k \rangle = \delta_{jk}\end{aligned}$$

因此 $U^\dagger U = I$, 即 U 为酉矩阵。

向量展开系数的变换 若向量 $|\psi\rangle$ 在旧基下展开系数为 $\vec{c} = (c_1, \dots, c_n)^T$, 在新基下展开系数为 $\vec{c}' = (c'_1, \dots, c'_n)^T$, 则利用 $c_i = \langle e_i | \psi \rangle$ 、 $c'_j = \langle f_j | \psi \rangle$, 以及旧基的完备关系 $I = \sum_i |e_i\rangle\langle e_i|$:

$$\begin{aligned}c'_j &= \langle f_j | \psi \rangle \\&= \langle f_j | I | \psi \rangle \quad (\text{插入单位算符}) \\&= \langle f_j | \left(\sum_i |e_i\rangle\langle e_i| \right) | \psi \rangle \quad (\text{用完备关系展开 } I) \\&= \sum_i \langle f_j | e_i \rangle \langle e_i | \psi \rangle \quad (\text{内积的线性性}) \\&= \sum_i U_{ij}^* c_i \quad (\text{定义: } U_{ij} = \langle e_i | f_j \rangle, \text{ 故 } \langle f_j | e_i \rangle = U_{ij}^*) \\&= \sum_i U_{ji}^\dagger c_i \quad (\text{厄米共轭定义: } U_{ji}^\dagger = U_{ij}^*)\end{aligned}$$

矩阵形式为

$$\boxed{\vec{c}' = U^\dagger \vec{c}}$$

推导

完整推导总结:

我们依次用到了前面的所有工具：

1) 完备关系 \Rightarrow 展开公式

$$|f_j\rangle = I|f_j\rangle = \sum_i |e_i\rangle\langle e_i | f_j \rangle = \sum_i U_{ij}|e_i\rangle$$

2) 正交归一性 + 完备关系 \Rightarrow 酉性

$$(U^\dagger U)_{jk} = \sum_i \langle f_j | e_i \rangle \langle e_i | f_k \rangle = \langle f_j | f_k \rangle = \delta_{jk}$$

3) 系数计算公式 \Rightarrow 系数变换

$$c'_j = \langle f_j | \psi \rangle = \sum_i \langle f_j | e_i \rangle \langle e_i | \psi \rangle = \sum_i U_{ji}^\dagger c_i$$

物理含义：正交归一基之间的变换必保持内积与范数，这正是酉矩阵的几何本质。

基变换算符 U 基变换 U 既可以看作描述“新基在旧基下展开系数”的数值矩阵，也可以看作一个酉算符。作为算符，它的作用是把旧基映射到新基：

$$U|e_j\rangle = |f_j\rangle$$

矩阵元 U_{ij} 可以通过算符作用或内积两种等价方式计算：

$$U_{ij} = \langle e_i | U | e_j \rangle = \langle e_i | f_j \rangle$$

无论从哪个角度看， U 都是酉的： $U^\dagger U = I$ 。算符在不同基下的变换将在**算符的基变换**一节详细讨论。

例：Hadamard（哈达玛）基 定义

$$|+\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |-\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

这里的**计算基**指标准基 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ ，其中

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

变换矩阵指“把新基向量在旧基下展开”的系数矩阵。若旧基为 $\{|e_i\rangle\}$ 、新基为 $\{|f_j\rangle\}$ ，则 $U_{ij} = \langle e_i | f_j \rangle$ ，并有

$$|f_j\rangle = \sum_i U_{ij} |e_i\rangle$$

因此矩阵 U 的第 j 列就是 $|f_j\rangle$ 在旧基下的展开系数。

对 Hadamard 基，令旧基 $|e_1\rangle = |0\rangle, |e_2\rangle = |1\rangle$ ，新基 $|f_1\rangle = |+\rangle, |f_2\rangle = |-\rangle$ 。计算矩阵元：

$$\begin{aligned} U_{11} &= \langle 0 | + \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, & U_{21} &= \langle 1 | + \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \\ U_{12} &= \langle 0 | - \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, & U_{22} &= \langle 1 | - \rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

所以 $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ 为一组正交归一基，与计算基的变换矩阵为

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

Hadamard（哈达玛）门的用途与用法 Hadamard 门（又称哈达玛门，记为 H ）既是厄米的也是酉的，即

$$H^\dagger = H, \quad H^\dagger H = I$$

因此 $H^2 = I$ 。它最常见的作用是在**计算基**与 Hadamard 基之间切换，以及生成叠加态：

$$H|0\rangle = |+\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad H|1\rangle = |-\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

因此 H 把确定态变成等幅叠加态；反过来再施加一次 H 会回到原态 ($H^2 = I$)。

如何用：改变测量基 若想在 X 基 $(|+\rangle, |-\rangle)$ 测量，可先施加 H ，再在计算基做 Z 测量（“测量”的定义与规则见后文**测量**一节）。因为

$$HZH = X$$

这表示“先变基再测量”等价于直接测量另一方向。

例题

示例：用 H 将 Z 基测量变为 X 基测量

设量子态为 $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ 。若要测量 X 基的概率：

1. 先施加 H 得到 $H|\psi\rangle$ 。
2. 再在计算基测量 (Z 基)。

这样测得 $|0\rangle$ 的概率等于原态在 $|+\rangle$ 的概率，测得 $|1\rangle$ 的概率等于原态在 $|-\rangle$ 的概率。

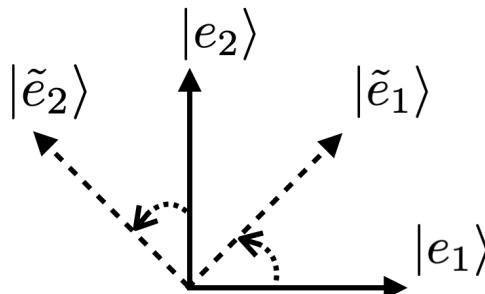


Figure 2: 不同正交基之间的基变换示意 ($\{|e_i\rangle\}$ 与 $\{|\tilde{e}_i\rangle\}$)。

2.8 【了解】离散谱与连续谱 (Dirac δ 归一化)

离散基 vs 连续基 离散正交归一基满足 $\langle e_i | e_j \rangle = \delta_{ij}$ ，而连续谱的本征态满足

$$\langle x | x' \rangle = \delta(x - x')$$

其中 $\delta(x - x')$ 为狄拉克 δ 函数。两者都是“正交归一”的广义形式。

连续完备性 连续基的完备关系写成积分形式：

$$\int |x\rangle \langle x| dx = I, \quad \int |p\rangle \langle p| dp = I$$

波函数与归一化

$$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle, \quad \int |\psi(x)|^2 dx = 1$$

因此，“离散谱 \leftrightarrow 求和”，“连续谱 \leftrightarrow 积分”是同一数学结构在不同谱类型下的体现。

离散与连续的统一表述（补充） 常将求和与积分统一写作

$$I = \int |a\rangle \langle a| da$$

其中对离散谱该符号代表求和，对连续谱代表积分。

3 【背】线性算符 (Linear Operators)

3.1 【了解】基本概念

算符作用 算符 (operator) A 是将一个向量映射到另一个向量的“函数”：

$$A : |\psi\rangle \mapsto A|\psi\rangle$$

在有限维空间中，选定一组基后，算符可用矩阵表示（即 $A^{(e)}$ ），不同基会给出不同矩阵，但它们对应同一个算符 A 。

线性性 线性算符满足

$$A(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1A|\psi_1\rangle + c_2A|\psi_2\rangle$$

单位算符与逆算符 单位算符 I 满足 $I|\psi\rangle = |\psi\rangle$ 。若存在 A^{-1} 使得 $AA^{-1} = A^{-1}A = I$ ，则 A 可逆。算符乘积一般不交换 ($AB \neq BA$)，其物理含义将在对易子部分进一步讨论。

算符相等 (补充) 若对任意态 $|\psi\rangle$ 都有 $A|\psi\rangle = B|\psi\rangle$ ，则 $A = B$ 。

期望值 给定一个算符 A 和一个归一化的态 $|\psi\rangle$ ($\langle\psi|\psi\rangle = 1$)，定义 A 在态 $|\psi\rangle$ 下的期望值 (expectation value) 为：

$$\langle A \rangle_\psi := \langle \psi | A | \psi \rangle$$

若在 A 的本征基下 (本征值/本征向量见后文本征值与本征向量) $A|a_j\rangle = a_j|a_j\rangle$ 且 $|\psi\rangle = \sum_j c_j|a_j\rangle$ ，则

$$\langle A \rangle_\psi = \sum_j a_j |c_j|^2$$

体现“**本征值按概率加权平均**”。这是一个复数。在量子力学中，期望值对应测量的平均值。

重要说明：

- 期望值 $\langle A \rangle$ 是**本征值的加权平均**，不是概率的平均
- 如果算符的本征值包含负数，期望值也可以是负数
- 概率 $|c_j|^2$ 总是非负的 ($0 \leq |c_j|^2 \leq 1$)，但本征值 a_j 可以是任意实数 (对厄米算符)
- 例如： Z 的本征值是 $+1$ 和 -1 ，如果测到 -1 的概率更大，期望值就是负数

例题

计算期望值

设 $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ ， $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ ，求 $\langle A \rangle_\psi$ 。

解：

$$\begin{aligned}\langle A \rangle_\psi &= \langle \psi | A | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \quad 1) A \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} (1 \quad 1) \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} (1 - 1) = 0\end{aligned}$$

例题

期望值为负数的情况

设 $|\psi\rangle = |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, $Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, 求 $\langle Z \rangle_\psi$ 。

解:

$$\begin{aligned}\langle Z \rangle_\psi &= \langle 1 | Z | 1 \rangle \\ &= (0 \quad 1) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= (0 \quad 1) \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} = -1\end{aligned}$$

物理解释:

- $|1\rangle$ 是 Z 的本征态, 本征值为 -1
- 测量结果 100% 确定是 -1 (概率为 1)
- 期望值 $= (+1) \times 0 + (-1) \times 1 = -1$
- 这是完全正常的! 期望值 -1 表示“平均测量结果是 -1 ”

例题

$Z_1 Z_2$ 的期望值为 -1
对单态 $|\Psi^-\rangle = \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}}$, 计算 $\langle Z_1 Z_2 \rangle$ 。

解: $Z_1 Z_2$ 的本征值:

- $|00\rangle$ 和 $|11\rangle$: 本征值 $+1$ (两个自旋方向相同)
- $|01\rangle$ 和 $|10\rangle$: 本征值 -1 (两个自旋方向相反)

单态 $|\Psi^-\rangle$ 只在 $|01\rangle$ 和 $|10\rangle$ 上有振幅, 因此:

$$\langle Z_1 Z_2 \rangle = (+1) \times 0 + (-1) \times 1 = -1$$

物理意义: 期望值 -1 表示“两个自旋总是反关联的”, 完美符合单态的性质!

3.2 【背】测量不确定度 (标准偏差)

定义 给定一个可观测算符 A (厄米算符) 和一个归一化的态 $|\psi\rangle$, 定义 A 在态 $|\psi\rangle$ 下的测量不确定度 (或标准偏差) 为:

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

其中:

- $\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$ 是 A 的期望值 (平均值)
- $\langle A^2 \rangle = \langle \psi | A^2 | \psi \rangle$ 是 A^2 的期望值
- ΔA 即为测量结果的标准差

物理意义 ΔA 描述了对同一态 $|\psi\rangle$ 进行多次测量 A 时, 测量结果相对于平均值的统计涨落。

- $\Delta A = 0$ 当且仅当 $|\psi\rangle$ 是 A 的本征态, 此时测量结果确定为该本征值
- $\Delta A > 0$ 表示测量结果有量子不确定性, 即使对完全相同的态重复测量也会得到不同结果
- 这是量子力学的本征统计性质, 而非测量仪器精度的限制

方差形式 注意到 $\Delta A^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$ 就是测量结果的方差 (variance)。标准偏差就是方差的平方根。

例题

计算测量不确定度

设 $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$, $Z = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|$, 求 ΔZ 。

解：首先计算期望值：

$$\begin{aligned}\langle Z \rangle &= \langle \psi | Z | \psi \rangle = \frac{1}{2}(\langle 0 | + \langle 1 |)(|0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|)(|0\rangle + |1\rangle) \\ &= \frac{1}{2}(\langle 0 | + \langle 1 |)(|0\rangle - |1\rangle) = \frac{1}{2}(1 - 1) = 0\end{aligned}$$

然后计算 Z^2 的期望值。注意到 $Z^2 = I$ (因为 Z 的本征值为 ± 1), 所以

$$\langle Z^2 \rangle = \langle \psi | I | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1$$

因此

$$\Delta Z = \sqrt{\langle Z^2 \rangle - \langle Z \rangle^2} = \sqrt{1 - 0^2} = 1$$

物理解释： $|\psi\rangle = |+\rangle$ 不是 Z 的本征态，测量 Z 会以各 $1/2$ 概率得到 ± 1 ，平均值为 0，标准差为 1。

例题

本征态的测量不确定度

设 $|\psi\rangle = |0\rangle$, $Z = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|$, 求 ΔZ 。

解：

$$\begin{aligned}\langle Z \rangle &= \langle 0 | Z | 0 \rangle = \langle 0 | (|0\rangle) = 1 \\ \langle Z^2 \rangle &= \langle 0 | I | 0 \rangle = 1 \\ \Delta Z &= \sqrt{1 - 1^2} = 0\end{aligned}$$

物理解释： $|0\rangle$ 是 Z 的本征态 (本征值为 +1)，测量结果确定为 +1，无不确定性。

对角化与酉对角化 (定义) 对角化：若存在可逆矩阵 P 使

$$P^{-1}AP = D$$

其中 D 为对角矩阵，则称 A 可对角化，也可写成

$$A = PDP^{-1}$$

含义： P 的列向量是一组线性无关本征向量， D 的对角元就是对应本征值。换句话说，在“以本征向量为基”的表象中，算符矩阵变为对角矩阵。

酉对角化：若存在酉矩阵 U 使

$$U^\dagger AU = D$$

则称 A 酉对角化。这等价于： A 存在一组正交归一本征向量作为基。对厄米算符（以及更一般的正规算符）一定可以酉对角化。

3.3 【背】厄米算符 (Hermitian Operators)

定义 若算符 H 满足 $H = H^\dagger$, 则称 H 为厄米算符 (或自伴算符)。

物理意义 在量子力学中, 所有可观测量 (如能量、动量、位置) 都用厄米算符表示, 因为测量结果必须是实数。

2×2 厄米矩阵的通用形式

$$H = \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & d \end{pmatrix}, \quad a, d \in \mathbb{R}, b \in \mathbb{C}$$

即: 对角元素必须是实数, 非对角元素互为共轭。

关键性质

1. 期望值为实数: 对任意归一化态 $|\psi\rangle$, $\langle\psi|H|\psi\rangle \in \mathbb{R}$
2. 本征值为实数 (定义见后文本^{征值与本征向量})
3. 不同本征值的本征向量正交 (见后文本^{征值与本征向量})

对角化形式 (补充) 任意厄米算符都可被酉对角化:

$$H = U \operatorname{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n) U^\dagger$$

其中 U 的列向量为正交归一的本征态。

推导

证明期望值为实数:

$$\begin{aligned}\langle\psi|H|\psi\rangle^* &= \langle\psi|H^\dagger|\psi\rangle \quad (\text{共轭转置的性质}) \\ &= \langle\psi|H|\psi\rangle \quad (\text{因为 } H = H^\dagger)\end{aligned}$$

因此 $\langle\psi|H|\psi\rangle$ 等于其自身的复共轭, 故为实数。

例题

判断是否为厄米算符判断 $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ 是否为厄米算符。

解:

$$\sigma_z^\dagger = (\sigma_z^T)^* = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}^* = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \sigma_z$$

因此 σ_z 是厄米算符。

3.4 【背】酉算符 (Unitary / 么正 Operators)

定义 若 $U^\dagger U = U U^\dagger = I$, 则称 U 为酉算符 (或么正算符)。

关键性质

1. 保持内积: $\langle U\phi|U\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle$
2. 保持范数: $\|U|\psi\rangle\| = \||\psi\rangle\|$
3. 逆等于厄米共轭: $U^{-1} = U^\dagger$
4. 列向量构成正交归一基: 设 U 为 $n \times n$ 酉矩阵, 记 $|u_j\rangle$ 为 U 的第 j 列 (作为列向量), 则这 n 个列向量 $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_n\rangle\}$ 构成正交归一基, 即满足 $\langle u_i|u_j\rangle = \delta_{ij}$ (反之亦成立, 见[正交归一基与酉矩阵](#))

谱性质 (补充) 酉算符的本征值满足 $|\lambda| = 1$ (位于单位圆上), 因此 $\det(U)$ 也满足 $|\det(U)| = 1$ 。时间演化算符可写成

$$U = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right)$$

其中 H 为厄米算符。

推导

证明保持内积:

$$\begin{aligned}\langle U\phi|U\psi\rangle &= (U|\phi\rangle)^\dagger(U|\psi\rangle) \\ &= \langle\phi|U^\dagger U|\psi\rangle \\ &= \langle\phi|I|\psi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle\end{aligned}$$

例题

验证 Hadamard 门是酉算符

$$\text{Hadamard 门: } H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

解: 因元素全为实数, $H^\dagger = H^T = H$ 。计算:

$$\begin{aligned}H^\dagger H &= H^2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} = I\end{aligned}$$

因此 H 是酉算符 (同时也是厄米算符)。

3.5 【背】算符的矩阵表示 (Matrix Elements)

从向量展开到算符作用 我们已经知道, 给定正交归一基 $\{|e_i\rangle\}$, 任意向量 $|\psi\rangle$ 可展开为

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

其中展开系数由内积给出: $c_i = \langle e_i|\psi\rangle$ 。

现在考虑: 算符 A 作用在基向量 $|e_j\rangle$ 上, 得到一个新向量 $A|e_j\rangle$ 。这个新向量也可以在基 $\{|e_i\rangle\}$ 下展开:

$$A|e_j\rangle = \sum_i (\text{某个系数}) |e_i\rangle$$

这引出一个核心问题: 这些系数是什么?

算符作用后向量的展开系数 由于 $\{|e_i\rangle\}$ 是完备基, 我们可以利用完备关系 $I = \sum_i |e_i\rangle\langle e_i|$ 展开 $A|e_j\rangle$:

$$A|e_j\rangle = I \cdot A|e_j\rangle = \sum_i |e_i\rangle\langle e_i|A|e_j\rangle$$

这告诉我们: $A|e_j\rangle$ 在基下的第 i 个系数就是 $\langle e_i|A|e_j\rangle$ 。

矩阵元的定义 将算符 A 作用在所有基向量上得到的展开系数收集起来, 定义**矩阵元**

$$A_{ij}^{(e)} = \langle e_i|A|e_j\rangle$$

则上述展开公式可写成

$$A|e_j\rangle = \sum_i A_{ij}^{(e)}|e_i\rangle$$

记号约定: 算符与矩阵表示 为了明确区分抽象的算符和依赖于基的矩阵表示, 我们采用如下记号:

- 算符 (独立于基): A
- 算符在基 $\{|e_i\rangle\}$ 下的矩阵表示: $A^{(e)}$
- 矩阵元 (算符在基下的矩阵元素): $A_{ij}^{(e)} = \langle e_i|A|e_j\rangle$

直观意义: 矩阵 $A^{(e)}$ 的第 j 列就是向量 $A|e_j\rangle$ 在基 $\{|e_i\rangle\}$ 下的展开系数。

将所有基向量的作用结果按列排列, 得到算符 A 在基 $\{|e_i\rangle\}$ 下的矩阵表示:

$$A^{(e)} = \begin{pmatrix} A_{11}^{(e)} & A_{12}^{(e)} & \cdots & A_{1n}^{(e)} \\ A_{21}^{(e)} & A_{22}^{(e)} & \cdots & A_{2n}^{(e)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n1}^{(e)} & A_{n2}^{(e)} & \cdots & A_{nn}^{(e)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} | & | & & | \\ A|e_1\rangle & A|e_2\rangle & \cdots & A|e_n\rangle \\ | & | & & | \end{pmatrix}_{\text{展开系数}}$$

例题

例: 二维算符的矩阵表示

设 $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle\}$ 为二维正交归一基, 算符 A 作用为

$$A|e_1\rangle = 2|e_1\rangle + 3|e_2\rangle, \quad A|e_2\rangle = -i|e_1\rangle + 5|e_2\rangle$$

步骤 1: 求第 1 列, 即 $A|e_1\rangle$ 的展开系数:

$$A_{11}^{(e)} = \langle e_1|A|e_1\rangle = 2, \quad A_{21}^{(e)} = \langle e_2|A|e_1\rangle = 3$$

步骤 2: 求第 2 列, 即 $A|e_2\rangle$ 的展开系数:

$$A_{12}^{(e)} = \langle e_1|A|e_2\rangle = -i, \quad A_{22}^{(e)} = \langle e_2|A|e_2\rangle = 5$$

因此矩阵表示为

$$A^{(e)} = \begin{pmatrix} 2 & -i \\ 3 & 5 \end{pmatrix}$$

验证: 第 1 列 $(2, 3)^T$ 确实是 $A|e_1\rangle$ 的展开系数, 第 2 列 $(-i, 5)^T$ 是 $A|e_2\rangle$ 的展开系数。

算符对任意向量的作用 现在我们知道算符 A 作用在基向量上的结果: $A|e_j\rangle = \sum_i A_{ij}^{(e)} |e_i\rangle$ 。
那么对任意向量 $|\psi\rangle = \sum_j c_j |e_j\rangle$, 算符 A 的作用是什么? 利用算符的线性性:

$$\begin{aligned} A|\psi\rangle &= A\left(\sum_j c_j |e_j\rangle\right) \\ &= \sum_j c_j A|e_j\rangle \quad (\text{线性性}) \\ &= \sum_j c_j \sum_i A_{ij}^{(e)} |e_i\rangle \quad (\text{代入 } A|e_j\rangle = \sum_i A_{ij}^{(e)} |e_i\rangle) \\ &= \sum_i \left(\sum_j A_{ij}^{(e)} c_j\right) |e_i\rangle \quad (\text{交换求和顺序}) \end{aligned}$$

因此 $A|\psi\rangle$ 的第 i 个展开系数为

$$c'_i = \sum_j A_{ij}^{(e)} c_j$$

用列向量记号, 若 $|\psi\rangle$ 的展开系数为 $\vec{c} = (c_1, \dots, c_n)^T$, $A|\psi\rangle$ 的展开系数为 $\vec{c}' = (c'_1, \dots, c'_n)^T$, 则

$$\boxed{\vec{c}' = A^{(e)} \vec{c}}$$

这就是矩阵乘法! 算符作用对应矩阵乘法。

推导

完整推导总结:

我们依次用到了前面的所有工具:

1) 完备关系 \Rightarrow 展开公式

$$A|e_j\rangle = I \cdot A|e_j\rangle = \sum_i |e_i\rangle \langle e_i| A|e_j\rangle = \sum_i A_{ij}^{(e)} |e_i\rangle$$

2) 线性性 \Rightarrow 对任意向量的作用

$$A|\psi\rangle = \sum_j c_j A|e_j\rangle = \sum_i \left(\sum_j A_{ij}^{(e)} c_j\right) |e_i\rangle$$

3) 矩阵元定义 \Rightarrow 矩阵乘法

$$c'_i = \sum_j A_{ij}^{(e)} c_j \iff \vec{c}' = A^{(e)} \vec{c}$$

物理含义: 算符 A 在基 $\{|e_i\rangle\}$ 下由矩阵 $A^{(e)}$ 及其矩阵元 $A_{ij}^{(e)} = \langle e_i|A|e_j\rangle$ 完全确定, 其作用通过矩阵乘法实现。

例题

例: 算符作用的矩阵计算

沿用上例，设 $|\psi\rangle = |e_1\rangle + 2|e_2\rangle$ ，展开系数 $\vec{c} = (1, 2)^T$ ，则

$$A|\psi\rangle \text{ 的展开系数} = \begin{pmatrix} 2 & -i \\ 3 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 - 2i \\ 13 \end{pmatrix}$$

即 $A|\psi\rangle = (2 - 2i)|e_1\rangle + 13|e_2\rangle$ 。

验证：

$$\begin{aligned} A|\psi\rangle &= A|e_1\rangle + 2A|e_2\rangle \\ &= (2|e_1\rangle + 3|e_2\rangle) + 2(-i|e_1\rangle + 5|e_2\rangle) \\ &= (2 - 2i)|e_1\rangle + 13|e_2\rangle \quad \checkmark \end{aligned}$$

算符的基展开公式 利用完备性关系，可将算符 A 表示为外积 $|e_i\rangle\langle e_j|$ 的线性组合：

$$A = \sum_{i,j} A_{ij}^{(e)} |e_i\rangle\langle e_j|$$

其中 $A_{ij}^{(e)} = \langle e_i|A|e_j\rangle$ 。

推导

推导：在 A 左右两侧插入完备性关系：

$$\begin{aligned} A &= I \cdot A \cdot I = \left(\sum_i |e_i\rangle\langle e_i| \right) A \left(\sum_j |e_j\rangle\langle e_j| \right) \\ &= \sum_{i,j} |e_i\rangle \underbrace{\langle e_i|A|e_j\rangle}_{=A_{ij}^{(e)}} \langle e_j| = \sum_{i,j} A_{ij}^{(e)} |e_i\rangle\langle e_j| \end{aligned}$$

这个公式的物理意义：外积 $|e_i\rangle\langle e_j|$ 是“从 $|e_j\rangle$ 映射到 $|e_i\rangle$ ”的算符， $A_{ij}^{(e)}$ 是其系数。

3.6 【背】算符的基变换

算符在不同基下的矩阵元 在 2.7 节我们定义了基变换矩阵 $U_{ij} = \langle e_i|f_j\rangle$ ，其中 $\{|e_j\rangle\}$ 是旧基， $\{|f_j\rangle\}$ 是新基。 U 是酉矩阵，满足 $U^\dagger U = I$ 。

算符 A 在两组基下的矩阵元分别为

$$A_{ij}^{(e)} = \langle e_i|A|e_j\rangle, \quad A_{mn}^{(f)} = \langle f_m|A|f_n\rangle$$

推导

由完备关系得到基变换公式：

在 A 的左右分别插入旧基的完备关系 $I = \sum_i |e_i\rangle\langle e_i|$:

$$\begin{aligned} A_{mn}^{(f)} &= \langle f_m | A | f_n \rangle \\ &= \langle f_m | \left(\sum_i |e_i\rangle\langle e_i| \right) A \left(\sum_j |e_j\rangle\langle e_j| \right) | f_n \rangle \\ &= \sum_{i,j} \langle f_m | e_i \rangle \langle e_i | A | e_j \rangle \langle e_j | f_n \rangle \\ &= \sum_{i,j} U_{im}^* A_{ij}^{(e)} U_{jn} \end{aligned}$$

因此

$$A^{(f)} = U^\dagger A^{(e)} U$$

这就是算符在不同基下的相似变换公式。

例题

例：基变换

取基 $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle\}$, 设算符 A 满足

$$A|e_1\rangle = 2|e_1\rangle, \quad A|e_2\rangle = 3|e_2\rangle$$

则在该基下

$$A^{(e)} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$$

现换新基 $\{|f_1\rangle, |f_2\rangle\}$, 其中

$$|f_1\rangle = \frac{|e_1\rangle + |e_2\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |f_2\rangle = \frac{|e_1\rangle - |e_2\rangle}{\sqrt{2}}$$

基变换矩阵

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

在新基下

$$A^{(f)} = U^\dagger A^{(e)} U = \begin{pmatrix} \frac{5}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{5}{2} \end{pmatrix}$$

矩阵形式不同, 但描述的是同一个算符 A 。

3.7 【背】期望值与演化的矩阵形式

有了算符的矩阵表示, 我们可以将量子力学中的许多重要公式转化为矩阵形式, 这在实际计算中非常有用。

期望值的矩阵计算 设态 $|\psi\rangle$ 在正交归一基 $\{|e_i\rangle\}$ 下的展开系数为列向量 $\vec{c} = (c_1, c_2, \dots, c_n)^T$, 算符 A 在该基下的矩阵表示为 $A^{(e)}$, 矩阵元为 $A_{ij}^{(e)} = \langle e_i | A | e_j \rangle$, 则可观测量 A 的期望值可写成矩阵形式:

$$\langle A \rangle_\psi = \langle \psi | A | \psi \rangle = \vec{c}^\dagger A^{(e)} \vec{c}$$

推导

推导：设 $|\psi\rangle = \sum_j c_j |e_j\rangle$, 则

$$\begin{aligned}\langle A \rangle_\psi &= \langle \psi | A | \psi \rangle = \left(\sum_i c_i^* \langle e_i | \right) A \left(\sum_j c_j | e_j \rangle \right) \\ &= \sum_{i,j} c_i^* c_j \langle e_i | A | e_j \rangle = \sum_{i,j} c_i^* A_{ij}^{(e)} c_j \\ &= \vec{c}^\dagger A^{(e)} \vec{c}\end{aligned}$$

其中最后一步就是矩阵乘法 $\vec{c}^\dagger A^{(e)} \vec{c}$ 的定义。

例题

例：计算自旋期望值

设自旋 $1/2$ 粒子处于态

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$$

在标准基 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ 下, 坐标为 $\vec{c} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ 。

Pauli 算符 σ_x 在标准基下的矩阵表示为 $\sigma_x^{(0,1)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, 则期望值

$$\langle \sigma_x \rangle_\psi = \vec{c}^\dagger \sigma_x^{(0,1)} \vec{c} = \frac{1}{2} (1 \ 1) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (1 \ 1) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = 1$$

薛定谔方程的矩阵形式 量子态的时间演化由薛定谔方程描述。在给定基下, 薛定谔方程可转化为矩阵微分方程。

设 $|\psi(t)\rangle$ 在基 $\{|e_i\rangle\}$ 下的坐标为 $\vec{c}(t) = (c_1(t), \dots, c_n(t))^T$, 哈密顿量 H 的矩阵表示为 $H^{(e)}$, 则薛定谔方程

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

在该基下等价于矩阵微分方程:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \vec{c}(t) = H^{(e)} \vec{c}(t)$$

推导

推导：将 $|\psi(t)\rangle = \sum_i c_i(t) |e_i\rangle$ 代入薛定谔方程:

$$i\hbar \sum_i \frac{dc_i}{dt} |e_i\rangle = H \left(\sum_j c_j |e_j\rangle \right)$$

在两侧左乘 $\langle e_k |$:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dc_k}{dt} &= \langle e_k | H \left(\sum_j c_j | e_j \rangle \right) = \sum_j c_j \langle e_k | H | e_j \rangle \\ &= \sum_j H_{kj}^{(e)} c_j(t) \end{aligned}$$

这对每个 $k = 1, 2, \dots, n$ 都成立，因此写成矩阵形式：

$$i\hbar \dot{\vec{c}}(t) = H^{(e)} \vec{c}(t)$$

时间演化算符的矩阵形式 若哈密顿量 H 不依赖时间，薛定谔方程的解为

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle$$

在给定基下，这对应坐标的矩阵变换：

$$\vec{c}(t) = e^{-iH^{(e)}t/\hbar} \vec{c}(0)$$

其中矩阵指数定义为

$$e^{-iH^{(e)}t/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-it/\hbar)^n}{n!} (H^{(e)})^n$$

例题

例：二能级系统的演化

考虑哈密顿量 $H = \omega \sigma_z / 2 = \frac{\omega}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ ，初态 $|\psi(0)\rangle = |0\rangle$ ，坐标 $\vec{c}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 。

演化算符

$$e^{-iHt/\hbar} = e^{-i\omega t \sigma_z / (2\hbar)} = \begin{pmatrix} e^{-i\omega t/2} & 0 \\ 0 & e^{i\omega t/2} \end{pmatrix}$$

因此

$$\vec{c}(t) = \begin{pmatrix} e^{-i\omega t/2} & 0 \\ 0 & e^{i\omega t/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\omega t/2} \\ 0 \end{pmatrix}$$

即 $|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega t/2} |0\rangle$ ，除了整体相位，态保持不变（这是因为 $|0\rangle$ 是能量本征态）。

3.8 【背】厄米算符的矩阵性质

厄米算符在量子力学中扮演可观测量的角色，其矩阵表示具有特殊性质。

厄米矩阵的定义 若算符 $A = A^\dagger$ (厄米算符)，则在任何正交归一基 $\{|e_i\rangle\}$ 下，其矩阵元满足

$$A_{ij}^{(e)} = A_{ji}^{(e)*}$$

即矩阵 $A^{(e)}$ 是厄米矩阵 ($A^{(e)} = A^{(e)\dagger}$)。

推导

推导矩阵元关系：

$$\begin{aligned} A_{ij}^{(e)} &= \langle e_i | A | e_j \rangle = \langle e_i | A^\dagger | e_j \rangle \quad (\text{因为 } A = A^\dagger) \\ &= \langle e_j | A | e_i \rangle^* \quad (\text{伴随的定义}) = A_{ji}^{(e)*} \end{aligned}$$

这说明矩阵关于对角线共轭对称。

例题

例：验证 Pauli 矩阵是厄米的

在标准基下， $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ ：显然 $\sigma_x^\dagger = \sigma_x$ ，满足矩阵元关系。

$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ ：对角矩阵且元素为实数，显然厄米。

本征基下的对角化 厄米算符的一个重要性质是：总可以选择一组正交归一的本征基 $\{|a_i\rangle\}$ （满足 $A|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$ ），使得在该基下算符的矩阵表示为对角形式：

$$A^{\text{(本征基)}} = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_n \end{pmatrix}$$

主对角元即为本征值 a_i （均为实数）。

推导

验证：在本征基 $\{|a_i\rangle\}$ 下，矩阵元为

$$A_{ij}^{(a)} = \langle a_i | A | a_j \rangle = \langle a_i | (a_j | a_j \rangle) = a_j \langle a_i | a_j \rangle = a_j \delta_{ij}$$

因此只有对角元 $A_{ii}^{(a)} = a_i$ 非零，矩阵为对角矩阵。

3.9 【了解】连续基中的矩阵表示

前面讨论的都是离散基（有限维或可数无限维），但量子力学中经常遇到连续基（如位置本征态、动量本征态）。矩阵元在连续基下变为函数（积分核）。

连续基的矩阵元 对连续基 $\{|x\rangle\}$ （如位置本征态，满足 $\langle x | x' \rangle = \delta(x - x')$ ），算符 A 的矩阵元定义为

$$A(x, x') = \langle x | A | x' \rangle$$

这是一个二元函数，称为**积分核**（integral kernel）。

算符作用的积分形式 算符 A 作用在态 $|\psi\rangle$ 上，在位置表象下写为积分：

$$(A\psi)(x) = \int_{-\infty}^{\infty} A(x, x') \psi(x') dx'$$

其中 $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ 是波函数。

推导

推导：插入连续完备关系 $I = \int |x'\rangle\langle x'| dx'$:

$$\begin{aligned}(A\psi)(x) &= \langle x|A|\psi\rangle = \langle x|A\left(\int |x'\rangle\langle x'|\,dx'\right)|\psi\rangle \\ &= \int \langle x|A|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle\,dx' = \int A(x,x')\psi(x')\,dx'\end{aligned}$$

这完全类比于离散情形的矩阵乘法 $(A^{(e)}\vec{c})_i = \sum_j A_{ij}^{(e)} c_j$, 只是求和变成了积分。

例题

例：位置算符

位置算符 X 在位置表象下的矩阵元为

$$X(x,x') = \langle x|X|x'\rangle = x\langle x|x'\rangle = x\delta(x-x')$$

因此作用在波函数上:

$$(X\psi)(x) = \int x\delta(x-x')\psi(x')\,dx' = x\psi(x)$$

即位置算符在位置表象下就是“乘以 x ”。

例题

例：动量算符

动量算符 P 在位置表象下的矩阵元为

$$P(x,x') = \langle x|P|x'\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x')$$

因此作用在波函数上:

$$(P\psi)(x) = \int \left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x')\right]\psi(x')\,dx' = -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}(x)$$

即动量算符在位置表象下是微分算符 $-i\hbar\partial/\partial x$ 。

不同表象之间的关系 同一个算符在不同连续基下有不同的积分核。例如，在动量表象下（基为 $\{|p\rangle\}$ ），算符 A 的矩阵元为

$$\tilde{A}(p,p') = \langle p|A|p'\rangle$$

两个表象通过傅里叶变换联系:

$$\tilde{\psi}(p) = \int e^{-ipx/\hbar}\psi(x)\,dx$$

3.10 【背】Pauli 矩阵

Pauli 矩阵是三个 2×2 厄米算符，在标准计算基 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ 下的矩阵表示为：

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

在量子信息中，通常默认 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ 指的就是这些矩阵。

记号约定 有时用下标 $i, j \in \{x, y, z\}$ 表示三个 Pauli 矩阵中的任意一个：

$$\sigma_i \in \{\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$$

例如 $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}I$ 表示“当 $i = j$ 时反对易子为 $2I$ ，当 $i \neq j$ 时为 0”。

性质

- 都是厄米的： $\sigma_i = \sigma_i^\dagger$
- 都是酉的： $\sigma_i^2 = I$
- 无迹： $\text{tr}(\sigma_i) = 0$
- 反对易关系： $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}I$
- 对易关系： $[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$ (及其循环)
- 乘法公式： $\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij}I + i\sum_k \varepsilon_{ijk}\sigma_k$

2×2 厄米矩阵展开 任意 2×2 厄米矩阵都可写成

$$H = a_0I + a_x\sigma_x + a_y\sigma_y + a_z\sigma_z, \quad a_0, a_x, a_y, a_z \in \mathbb{R}$$

与自旋的关系（补充） 对自旋 $1/2$ 粒子， $S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$ ，测量结果对应 $\pm\frac{\hbar}{2}$ 。

4 【背】本征值与本征向量 (Eigenvalues & Eigenvectors)

4.1 【背】定义与几何意义

本征值问题 给定一个算符（矩阵） A ，如果存在非零向量 $|\phi\rangle$ 和复数 λ 使得

$$A|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle$$

则称：

- λ 为 A 的**本征值** (eigenvalue, 特征值)
- $|\phi\rangle$ 为 λ 对应的**本征向量** (eigenvector, 特征向量)

几何意义 本征向量是那些被算符 A 作用后方向不变（只是长度变为 λ 倍）的特殊向量。

求解方法 要找本征值，需要解方程：

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

这要求 $\det(A - \lambda I) = 0$ (特征方程，也称久期方程)，解出的 λ 就是本征值。

为什么要令 $\det(A - \lambda I) = 0$? 见[行列式与可逆性（补充）](#)。

完整求解流程（必会，含细节与例子）

1. 写出特征方程

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

2. 展开行列式并解 λ 若 $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$, 则

$$\det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} a - \lambda & b \\ c & d - \lambda \end{vmatrix} = (a - \lambda)(d - \lambda) - bc = 0$$

解得

$$\lambda_{\pm} = \frac{a+d}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{a-d}{2}\right)^2 + bc}$$

3. 对每个 λ 解本征向量以 $\lambda = \lambda_+$ 为例, 解

$$(A - \lambda_+ I) \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 0$$

只需取其中一行 (另一行线性相关), 如

$$(a - \lambda_+)x + by = 0 \Rightarrow x = -\frac{b}{a - \lambda_+}y$$

取 $y = 1$ 即可得到一个本征向量, 再做归一化。

4. 归一化与正交化令 $|\phi\rangle = (x, y)^T$, 归一化为

$$|\tilde{\phi}\rangle = \frac{1}{\sqrt{|x|^2 + |y|^2}} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

若有简并, 则对同一本征值的多个本征向量做 Gram–Schmidt 正交化。

例题

2×2 实矩阵求本征值/向量

设

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$$

特征方程:

$$\det \begin{pmatrix} 2 - \lambda & 1 \\ 1 & 2 - \lambda \end{pmatrix} = (2 - \lambda)^2 - 1 = 0 \Rightarrow \lambda_1 = 3, \lambda_2 = 1$$

求本征向量:

- 对 $\lambda_1 = 3$: $(A - 3I) \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 0$ 得 $-x + y = 0 \Rightarrow x = y$, 取 $(1, 1)^T$, 归一化为 $\frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1)^T$ 。
- 对 $\lambda_2 = 1$: $(A - I) \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 0$ 得 $x + y = 0 \Rightarrow x = -y$, 取 $(1, -1)^T$, 归一化为 $\frac{1}{\sqrt{2}}(1, -1)^T$ 。

例题

简并情况：本征子空间的正交化

考虑 3×3 矩阵

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

第 1 步：求本征值

特征方程：

$$\det(B - \lambda I) = \det \begin{pmatrix} 1 - \lambda & 1 & 0 \\ 1 & 1 - \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 2 - \lambda \end{pmatrix} = (2 - \lambda) \det \begin{pmatrix} 1 - \lambda & 1 \\ 1 & 1 - \lambda \end{pmatrix}$$

$$= (2 - \lambda)[(1 - \lambda)^2 - 1] = (2 - \lambda)(1 - \lambda - 1)(1 - \lambda + 1) = (2 - \lambda)(-\lambda)(2 - \lambda)$$

简化得： $(2 - \lambda)^2 \cdot (-\lambda) = 0$

因此本征值为： $\lambda_1 = 0$ (非简并), $\lambda_2 = 2$ (二重简并)。

第 2 步：求本征向量

对 $\lambda_1 = 0$ (非简并)：

$$(B - 0 \cdot I) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 0$$

得到 $x + y = 0$ 和 $2z = 0$, 即 $y = -x, z = 0$ 。

取 $x = 1$, 得本征向量 $(1, -1, 0)^T$, 归一化：

$$|v_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

对 $\lambda_2 = 2$ (二重简并)：

$$(B - 2I) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 0$$

得到 $-x + y = 0$, 即 $x = y$, 而 z 任意。

本征子空间的通解为：

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ x \\ z \end{pmatrix} = x \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + z \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

其中 x, z 是任意常数。因此本征子空间由两个线性无关向量张成：

$$|u_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |u_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

验证它们线性无关且是本征向量：

$$B|u_1\rangle = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix} = 2|u_1\rangle, \quad B|u_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix} = 2|u_2\rangle$$

第 3 步：对简并子空间正交化

检查 $|u_1\rangle$ 和 $|u_2\rangle$ 是否正交：

$$\langle u_1 | u_2 \rangle = (1 \ 1 \ 0) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0$$

已经正交！只需归一化：

$$|v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |v_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

总结：正交归一本征基为

$$|v_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} (\lambda = 0), \quad |v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} (\lambda = 2), \quad |v_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} (\lambda = 2)$$

例题

简并本征向量不正交时的 Gram–Schmidt 正交化

考虑矩阵

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

第 1 步：求本征值

特征方程：

$$\begin{aligned} \det(A - \lambda I) &= \det \begin{pmatrix} 1 - \lambda & 0 & 1 \\ 0 & 2 - \lambda & 0 \\ 1 & 0 & 1 - \lambda \end{pmatrix} = (2 - \lambda) \det \begin{pmatrix} 1 - \lambda & 1 \\ 1 & 1 - \lambda \end{pmatrix} \\ &= (2 - \lambda)[(1 - \lambda)^2 - 1] = (2 - \lambda)(\lambda^2 - 2\lambda) = (2 - \lambda)\lambda(\lambda - 2) \end{aligned}$$

因此本征值为： $\lambda_1 = 0$ （非简并）， $\lambda_2 = 2$ （二重简并）。

第 2 步：求本征向量

对 $\lambda_1 = 0$ （非简并）：

$$(A - 0 \cdot I) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 0$$

得到 $x + z = 0$ 和 $2y = 0$ ，即 $z = -x, y = 0$ 。

本征向量 $(1, 0, -1)^T$, 归一化:

$$|v_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

对 $\lambda_2 = 2$ (二重简并):

$$(A - 2I) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 0$$

得到 $-x + z = 0$, 即 $z = x$, 而 y 任意。

本征子空间的通解为:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ x \end{pmatrix} = x \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + y \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

其中 x, y 是任意常数。

第 3 步: 选择不正交的基向量并正交化

从通解中, 我们可以任意选择两个线性无关的向量。如果选择:

$$|u_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |u_2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

(它们分别对应 $x = 1, y = 1$ 和 $x = 1, y = 0$)

验证它们是 $\lambda = 2$ 的本征向量:

$$A|u_1\rangle = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} = 2|u_1\rangle, \quad A|u_2\rangle = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix} = 2|u_2\rangle \checkmark$$

检查内积:

$$\langle u_1 | u_2 \rangle = 1 \cdot 1 + 1 \cdot 0 + 1 \cdot 1 = 2 \neq 0$$

它们不正交! 需要 Gram–Schmidt 正交化。

Gram–Schmidt 正交化:

1. 归一化 $|u_1\rangle$:

$$|e_1\rangle = \frac{|u_1\rangle}{\|u_1\|} = \frac{1}{\sqrt{1^2 + 1^2 + 1^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

2. 从 $|u_2\rangle$ 中减去 $|e_1\rangle$ 方向的投影:

$$\text{计算内积: } \langle e_1 | u_2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(1 + 0 + 1) = \frac{2}{\sqrt{3}}$$

$$\begin{aligned} |u'_2\rangle &= |u_2\rangle - \langle e_1 | u_2 \rangle |e_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{2}{\sqrt{3}} \cdot \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{2}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 - 2/3 \\ 0 - 2/3 \\ 1 - 2/3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/3 \\ -2/3 \\ 1/3 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

3. 归一化:

$$\|u'_2\| = \sqrt{(1/3)^2 + (-2/3)^2 + (1/3)^2} = \sqrt{1/9 + 4/9 + 1/9} = \sqrt{6/9} = \sqrt{2/3}$$

$$|e_2\rangle = \frac{|u'_2\rangle}{\|u'_2\|} = \sqrt{\frac{3}{2}} \begin{pmatrix} 1/3 \\ -2/3 \\ 1/3 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

验证正交性:

$$\langle e_1 | e_2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \cdot \frac{1}{\sqrt{6}} (1 \cdot 1 + 1 \cdot (-2) + 1 \cdot 1) = \frac{1}{\sqrt{18}} (1 - 2 + 1) = 0 \quad \checkmark$$

总结: 完整的正交归一本征基为

$$|v_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (\lambda = 0), \quad |e_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\lambda = 2), \quad |e_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\lambda = 2)$$

简并 若存在 $\lambda_i = \lambda_j$ ($i \neq j$), 则称为简并。

为什么需要简并的概念?

- 物理意义:** 简并表示系统存在多个线性无关的状态对应同一个测量结果(本征值)。例如, 自由粒子在三维空间中, 不同方向的动量可能对应相同的能量。
- 数学后果:** 简并时, 对应该本征值的本征向量不唯一——该本征值的所有本征向量张成一个子空间(称为**本征子空间**或**简并子空间**), 该子空间内任意向量都是本征向量。
- 实际影响:**
 - 非简并:** 每个本征值对应唯一的本征向量方向(归一化后), 不同本征值的本征向量天然正交。
 - 简并:** 同一本征值对应的多个本征向量可能不正交, 需要在本征子空间内进行 Gram–Schmidt 正交化, 才能得到正交归一本征基。

非简并与简并的区别总结:

	非简并	简并
本征值	互不相同	至少有两个相等
本征向量	每个本征值对应唯一方向	每个简并本征值对应子空间
正交性	不同本征值的本征向量天然正交	需在简并子空间内正交化
测量后态	塌缩到唯一本征态	塌缩到简并子空间内某态

常见特殊矩阵的本征值(速记)

- 对角矩阵:** 本征值就是对角元; 本征向量为标准基。
- 上/下三角矩阵:** 本征值为对角元(证明由行列式展开)。
- 酉矩阵:** 本征值模长为 1(位于单位圆)。
- 厄米矩阵:** 本征值为实数, 且不同本征值的本征向量正交。

本征值/本征向量有什么用?

- 对角化与简化计算:** 若 $A = U \Lambda U^\dagger$, 则 $A^n = U \Lambda^n U^\dagger$, 指数/函数也可直接在对角线上计算。
- 量子测量:** 厄米算符的本征值是测量可能结果, 本征态是测后态。
- 时间演化:** 若 $H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$, 则 $e^{-iHt/\hbar}|\phi_n\rangle = e^{-iE_nt/\hbar}|\phi_n\rangle$ 。
- 物理含义清晰:** 本征态是“保持方向不变”的模式, 很多物理量在其本征基下最直观。

- **谱分解**: 可把算符写成本征态投影的加权和, 便于理解与计算。

4.2 【背】厄米算符的谱定理

若 $H = H^\dagger$, 则存在正交归一本征基 $\{|\phi_1\rangle, \dots, |\phi_n\rangle\}$ 和实本征值 $\{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}$ 使得

$$H = \sum_{j=1}^n \lambda_j |\phi_j\rangle\langle\phi_j|$$

这称为 H 的**谱分解** (spectral decomposition)。

与对角矩阵投影分解的关系 (理解用) 把 H 在本征基下写成对角矩阵 Λ , 再做相似变换回到原基:

$$H = U\Lambda U^\dagger$$

其中 Λ 可由对角矩阵的**投影分解**写成

$$\Lambda = \sum_j \lambda_j |e_j\rangle\langle e_j|$$

于是

$$H = \sum_j \lambda_j U|e_j\rangle\langle e_j|U^\dagger = \sum_j \lambda_j |\phi_j\rangle\langle\phi_j|$$

也就是说, 谱定理就是“**对角矩阵的投影分解在本征基下成立, 再用酉变换换回原基**”的结果。

推导

关键结论 1: 厄米算符本征值为实数

设 $H|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle$, 则

$$\langle\phi|H|\phi\rangle = \lambda\langle\phi|\phi\rangle$$

对两边取共轭并用 $H^\dagger = H$,

$$\langle\phi|H|\phi\rangle^* = \langle\phi|H^\dagger|\phi\rangle = \langle\phi|H|\phi\rangle$$

因此 $\langle\phi|H|\phi\rangle$ 为实数, 又因 $\langle\phi|\phi\rangle > 0$, 可得 $\lambda \in \mathbb{R}$ 。

关键结论 2: 不同本征值的本征向量正交

若 $H|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle$ 、 $H|\psi\rangle = \mu|\psi\rangle$ 且 $\lambda \neq \mu$, 则

$$\langle\phi|H|\psi\rangle = \mu\langle\phi|\psi\rangle$$

另一方面

$$\langle\phi|H|\psi\rangle = \langle H\phi|\psi\rangle = \lambda\langle\phi|\psi\rangle$$

两式相减得 $(\lambda - \mu)\langle\phi|\psi\rangle = 0$, 故 $\langle\phi|\psi\rangle = 0$ 。

关键结论 3: 存在正交归一本征基 (有限维证明思路)

设 H 为 n 维厄米算符。由特征多项式可知 H 至少有一个本征值 λ_1 及对应本征向量 $|\phi_1\rangle$ 。将其归一化, 使 $\langle\phi_1|\phi_1\rangle = 1$ 。考虑正交补空间

$$\mathcal{H}_1 = \{|\psi\rangle : \langle\phi_1|\psi\rangle = 0\}$$

对任意 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_1$,

$$\langle\phi_1|H|\psi\rangle = \langle H\phi_1|\psi\rangle = \lambda_1\langle\phi_1|\psi\rangle = 0$$

故 $H|\psi\rangle \in \mathcal{H}_1$, 即 \mathcal{H}_1 在 H 作用下不变。将 H 限制到 \mathcal{H}_1 上, 仍是厄米算符。对维数 $n - 1$ 的空间重复上述步骤, 用归纳法得到一组正交归一的本征向量 $\{|\phi_1\rangle, \dots, |\phi_n\rangle\}$ 组成基。

关键结论 4: 谱分解的构造

由前文正交归一基与酉矩阵可知, 令

$$U = (|\phi_1\rangle \ |\phi_2\rangle \ \cdots \ |\phi_n\rangle)$$

则 U 为酉矩阵。因为

$$H|\phi_j\rangle = \lambda_j|\phi_j\rangle$$

把各列“并排拼成矩阵”即可得到矩阵等式: 矩阵乘法按列作用满足

$$H(|\phi_1\rangle \ \cdots \ |\phi_n\rangle) = (H|\phi_1\rangle \ \cdots \ H|\phi_n\rangle),$$

而 $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ 为对角矩阵, 因此

$$(|\phi_1\rangle \ \cdots \ |\phi_n\rangle)\Lambda = (\lambda_1|\phi_1\rangle \ \cdots \ \lambda_n|\phi_n\rangle).$$

逐列比较 $H|\phi_j\rangle = \lambda_j|\phi_j\rangle$ 即得

$$HU = U\Lambda$$

两边左乘 U^\dagger , 得到

$$U^\dagger HU = \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$$

其中 Λ 表示由本征值组成的对角矩阵。下面说明 $U\Lambda U^\dagger$ 为何等于投影和形式。由对角矩阵的投影分解可知

$$\Lambda = \sum_j \lambda_j |e_j\rangle\langle e_j|$$

其中 $\{|e_j\rangle\}$ 为标准基。又因为 U 的第 j 列就是 $|\phi_j\rangle$, 矩阵乘法“乘以 $|e_j\rangle$ ”会选出第 j 列, 所以 $U|e_j\rangle = |\phi_j\rangle$ 。于是

$$U\Lambda U^\dagger = \sum_j \lambda_j U|e_j\rangle\langle e_j|U^\dagger = \sum_j \lambda_j |\phi_j\rangle\langle\phi_j|$$

因此

$$H = U\Lambda U^\dagger = \sum_j \lambda_j |\phi_j\rangle\langle\phi_j|$$

并且满足完备关系

$$\sum_j |\phi_j\rangle\langle\phi_j| = I$$

也可直接由完备关系推出谱分解

由于 $\{|\phi_j\rangle\}$ 是正交归一本征基, 任意态 $|\psi\rangle$ 可展开为

$$|\psi\rangle = \sum_j |\phi_j\rangle\langle\phi_j|\psi\rangle$$

于是

$$H|\psi\rangle = \sum_j H|\phi_j\rangle\langle\phi_j|\psi\rangle = \sum_j \lambda_j |\phi_j\rangle\langle\phi_j|\psi\rangle$$

该式对任意 $|\psi\rangle$ 成立, 因此算符恒等成立:

$$H = \sum_j \lambda_j |\phi_j\rangle\langle\phi_j|$$

谱投影形式（简并情形） 当本征值存在简并时，对应本征向量不唯一，但简并子空间是确定的。设 λ 的简并子空间为

$$\mathcal{E}_\lambda = \text{span}\{|\phi_k\rangle : \lambda_k = \lambda\}$$

其中 $\text{span}\{\dots\}$ 的含义见[线性组合与张成](#)；这里 λ 为固定本征值， λ_k 为第 k 个本征向量对应的本征值。并定义索引集 \mathcal{I}_λ （索引集概念见[索引集](#)）

$$\mathcal{I}_\lambda = \{k : \lambda_k = \lambda\}$$

在该子空间内任选一组正交归一基 $\{|\phi_k\rangle\}_{k \in \mathcal{I}_\lambda}$ ，即可定义**投影算符**

$$P_\lambda = \sum_{k \in \mathcal{I}_\lambda} |\phi_k\rangle\langle\phi_k|$$

它把任意态的“ λ 子空间分量”投影出来： $P_\lambda|\psi\rangle \in \mathcal{E}_\lambda$ 。由于在简并子空间内的基变化只是一个酉变换， P_λ 与基的选择无关。

由正交归一性可直接验证

$$P_\lambda^2 = P_\lambda, \quad P_\lambda^\dagger = P_\lambda, \quad P_\lambda P_{\lambda'} = 0 \ (\lambda \neq \lambda'), \quad \sum_\lambda P_\lambda = I$$

再由谱分解按相同本征值分组：

$$H = \sum_j \lambda_j |\phi_j\rangle\langle\phi_j| = \sum_\lambda \lambda \sum_{k \in \mathcal{I}_\lambda} |\phi_k\rangle\langle\phi_k| = \sum_\lambda \lambda P_\lambda$$

因此谱分解等价写为

$$H = \sum_\lambda \lambda P_\lambda, \quad P_\lambda P_{\lambda'} = \delta_{\lambda\lambda'} P_\lambda, \quad \sum_\lambda P_\lambda = I$$

这在量子测量中尤其常用： P_λ 就是测量结果 λ 的投影算符。

例题

简并谱的谱分解与投影算符

设

$$H = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

解：取标准正交基

$$|e_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |e_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |e_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$\lambda = 2$ 为二重简并，本征子空间由 $|e_1\rangle, |e_2\rangle$ 张成； $\lambda = 3$ 的本征向量为 $|e_3\rangle$ 。因此

$$P_2 = |e_1\rangle\langle e_1| + |e_2\rangle\langle e_2|, \quad P_3 = |e_3\rangle\langle e_3|$$

对应的矩阵形式为

$$P_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad P_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

因此 $P_2 + P_3 = I$, 且 $P_2 P_3 = 0$ 。谱分解为

$$H = 2P_2 + 3P_3$$

为了更直观, 取具体态

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{14}} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

则

$$P_2|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{14}} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad P_3|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{14}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix}$$

并且

$$H|\psi\rangle = 2P_2|\psi\rangle + 3P_3|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{14}} \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \\ 9 \end{pmatrix}$$

在 P_2 的子空间内, 可用任意 2×2 的酉矩阵重新组合基向量, 但 P_2 不变。例: 取

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

在子空间 $\text{span}\{|e_1\rangle, |e_2\rangle\}$ 内做基变换, 按

$$|\tilde{e}_i\rangle = \sum_{j=1}^2 |e_j\rangle U_{ji} \quad (i = 1, 2)$$

这等价于把基向量 “并成列矩阵”, 再右乘 U :

$$(|\tilde{e}_1\rangle \ |\tilde{e}_2\rangle) = (|e_1\rangle \ |e_2\rangle)U$$

(见 2.7 节 “基变换与酉矩阵” 的列矩阵写法)。因此这是子空间内的酉变换, P_2 保持不变。

例题

由本征对写出谱分解

已知 H 的正交归一本征对为 $\lambda_1 = 1, |\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, $\lambda_2 = -1, |\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ 。

解:

$$H = 1|\phi_1\rangle\langle\phi_1| + (-1)|\phi_2\rangle\langle\phi_2| = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \sigma_x$$

例题

完整本征分解

求 $H = \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 3 \end{pmatrix}$ 的本征值与归一化本征向量。

解:

- 验证厄米性: $H^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & -(-i)^* \\ i^* & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 3 \end{pmatrix} = H \checkmark$
- 计算本征值: 解 $\det(H - \lambda I) = 0$ 。

$$\det \begin{pmatrix} 1 - \lambda & i \\ -i & 3 - \lambda \end{pmatrix} = (1 - \lambda)(3 - \lambda) - 1 = \lambda^2 - 4\lambda + 2 = 0$$

因此

$$\lambda_{\pm} = 2 \pm \sqrt{2}$$

- 对 $\lambda_- = 2 - \sqrt{2}$, 解 $(H - \lambda_- I)|v\rangle = 0$:

$$\begin{pmatrix} \sqrt{2} - 1 & i \\ -i & 1 + \sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 0$$

从第一行: $(\sqrt{2} - 1)x + iy = 0 \Rightarrow x = \frac{-iy}{\sqrt{2}-1} = \frac{-iy(\sqrt{2}+1)}{1} = -iy(\sqrt{2}+1)$

取 $y = 1$, 得 $x = -i(\sqrt{2}+1)$, 向量 $\begin{pmatrix} -i(\sqrt{2}+1) \\ 1 \end{pmatrix}$

范数: $|x|^2 + |y|^2 = (\sqrt{2}+1)^2 + 1 = 3 + 2\sqrt{2} + 1 = 4 + 2\sqrt{2} = 2(2 + \sqrt{2})$

归一化: $|\phi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(2+\sqrt{2})}} \begin{pmatrix} -i(\sqrt{2}+1) \\ 1 \end{pmatrix}$

- 类似方法求 $|\phi_+\rangle$ 或利用正交性构造

5 【背】张量积 (Tensor Product)

为什么需要张量积? 在量子信息中, 我们经常需要处理多个量子比特组成的复合系统。例如:

- 两个量子比特: Alice 有一个量子比特, Bob 有一个量子比特
- 量子纠缠态: 如 Bell 态 $|\Phi^+\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}$
- 量子计算: 多比特量子门 (如 CNOT) 作用于两个量子比特
- 量子通信: 量子隐形传态需要共享纠缠对

核心问题: 如何用数学描述“两个独立的量子系统组合在一起”?

答案: 张量积 \otimes 是描述复合量子系统的标准工具。

张量积的物理意义

- 独立系统的组合:** 若 Alice 的量子比特处于态 $|\psi_A\rangle$, Bob 的处于态 $|\psi_B\rangle$, 则整个系统处于态 $|\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$
- 维度增长:** 单比特是 2 维空间, 两比特是 $2 \times 2 = 4$ 维空间, n 比特是 2^n 维空间
- 纠缠的基础:** 纠缠态 (如 Bell 态) 无法写成 $|a\rangle \otimes |b\rangle$ 的形式, 这正是量子系统超越经典的核心!
- 多比特门的构造:** CNOT 门作用于两比特系统, 其矩阵通过张量积构造

实际应用举例

- 计算基展开:** 两比特态 $|\psi\rangle = \alpha|00\rangle + \beta|01\rangle + \gamma|10\rangle + \delta|11\rangle$, 其中 $|00\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle$ 等
- Bell 态制备:** 从 $|00\rangle$ 出发, 通过 $H \otimes I$ 和 CNOT 制备纠缠态
- 部分测量:** 测量两比特系统中的第一个比特, 需要用张量积结构计算约化密度矩阵
- 量子算法:** Shor 算法、Grover 算法等都在多比特空间中运行

总结：张量积是量子信息的“语言”——没有它，我们无法谈论多比特系统、纠缠、量子门、量子算法。

5.1 【背】定义与维度

对两个向量空间 V_1, V_2 ，其张量积空间 $V_1 \otimes V_2$ 满足

$$\dim(V_1 \otimes V_2) = \dim(V_1) \times \dim(V_2)$$

向量的张量积

$$|v\rangle \otimes |w\rangle = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1 w_1 \\ v_1 w_2 \\ v_2 w_1 \\ v_2 w_2 \end{pmatrix}$$

矩阵的张量积 (Kronecker 积) (补充) 若 $A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$, B 为任意矩阵，则

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B \\ a_{21}B & a_{22}B \end{pmatrix}$$

它与向量张量积的定义一致，可用于构造多比特算符。

例题

计算矩阵的张量积

计算 $X \otimes Z$, 其中 $X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

解：根据定义

$$\begin{aligned} X \otimes Z &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} & 1 \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ 1 \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} & 0 \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

5.2 【背】运算规则

双线性性

$$(c|v\rangle) \otimes |w\rangle = c(|v\rangle \otimes |w\rangle) = |v\rangle \otimes (c|w\rangle) \quad (9)$$

$$(|v_1\rangle + |v_2\rangle) \otimes |w\rangle = |v_1\rangle \otimes |w\rangle + |v_2\rangle \otimes |w\rangle \quad (10)$$

$$|v\rangle \otimes (|w_1\rangle + |w_2\rangle) = |v\rangle \otimes |w_1\rangle + |v\rangle \otimes |w_2\rangle \quad (11)$$

不可交换性 一般有 $|v\rangle \otimes |w\rangle \neq |w\rangle \otimes |v\rangle$ 。

标量相乘

$$c|v\rangle \otimes |w\rangle = |v\rangle \otimes (c|w\rangle)$$

内积规则

$$\langle v_1 \otimes w_1 | v_2 \otimes w_2 \rangle = \langle v_1 | v_2 \rangle \cdot \langle w_1 | w_2 \rangle$$

张量积基 (补充) 若 $\{|e_i\rangle\}$ 与 $\{|f_j\rangle\}$ 分别为两空间的正交归一基，则 $\{|e_i\rangle \otimes |f_j\rangle\}$ 构成张量积空间的正交归一基。

算符作用规则

$$(A \otimes B)(|v\rangle \otimes |w\rangle) = (A|v\rangle) \otimes (B|w\rangle)$$

简化记号 (常用) 在多比特系统中，常用简化记号：

- A_1 或 $A \otimes I$ 表示 A 作用在第 1 个量子比特，第 2 个比特不变
- B_2 或 $I \otimes B$ 表示 B 作用在第 2 个量子比特，第 1 个比特不变
- $A_1 B_2$ 或 AB 或 $A \otimes B$ 表示 A 作用在第 1 个比特， B 作用在第 2 个比特

例题

多种记号的等价性

以下记号都表示同一个算符：

$$Z_1 Z_2 = Z_1 \otimes Z_2 = Z \otimes Z$$

含义：第 1 个量子比特进行 Z 测量，第 2 个量子比特也进行 Z 测量。

在计算基 $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ 下的矩阵表示为：

$$Z \otimes Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

因为：

$$\begin{aligned} (Z \otimes Z)|00\rangle &= Z|0\rangle \otimes Z|0\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle = +|00\rangle \\ (Z \otimes Z)|01\rangle &= Z|0\rangle \otimes Z|1\rangle = |0\rangle \otimes (-|1\rangle) = -|01\rangle \\ (Z \otimes Z)|10\rangle &= Z|1\rangle \otimes Z|0\rangle = (-|1\rangle) \otimes |0\rangle = -|10\rangle \\ (Z \otimes Z)|11\rangle &= Z|1\rangle \otimes Z|1\rangle = (-|1\rangle) \otimes (-|1\rangle) = +|11\rangle \end{aligned}$$

算符复合

$$(A \otimes B)(C \otimes D) = (AC) \otimes (BD)$$

特别地，

$$(A \otimes I)(I \otimes B) = A \otimes B = (I \otimes B)(A \otimes I)$$

共轭与迹 (补充)

$$(A \otimes B)^\dagger = A^\dagger \otimes B^\dagger, \quad \text{tr}(A \otimes B) = \text{tr}(A) \text{tr}(B)$$

$$\text{tr}_B(A \otimes B) = \text{tr}(B) A$$

交换算符 (Swap) (补充) 交换算符 S 定义为 $S(|v\rangle \otimes |w\rangle) = |w\rangle \otimes |v\rangle$, 满足 $S^2 = I$ 。在多比特系统中, S 用于改变张量积的次序。在计算基下可写为

$$S = \sum_{i,j} |ij\rangle\langle ji|$$

5.3 【背】量子比特系统

单比特计算基 $|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

两比特计算基

$$\begin{aligned} |00\rangle &= |0\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ |01\rangle &= |0\rangle \otimes |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ |10\rangle &= |1\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ |11\rangle &= |1\rangle \otimes |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

例题

展开张量积

计算 $(|0\rangle + |1\rangle) \otimes (|0\rangle - |1\rangle)$

解: 利用双线性性:

$$\begin{aligned} &(|0\rangle + |1\rangle) \otimes (|0\rangle - |1\rangle) \\ &= |0\rangle \otimes |0\rangle - |0\rangle \otimes |1\rangle + |1\rangle \otimes |0\rangle - |1\rangle \otimes |1\rangle \\ &= |00\rangle - |01\rangle + |10\rangle - |11\rangle \\ &= \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

例题

算符作用

计算 $(\sigma_x \otimes I)|01\rangle$

解：

$$\begin{aligned} (\sigma_x \otimes I)|01\rangle &= (\sigma_x \otimes I)(|0\rangle \otimes |1\rangle) \\ &= (\sigma_x|0\rangle) \otimes (I|1\rangle) \\ &= |1\rangle \otimes |1\rangle = |11\rangle \end{aligned}$$

或用矩阵形式：

$$\begin{aligned} \sigma_x \otimes I &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ (\sigma_x \otimes I) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |11\rangle \end{aligned}$$

5.4 【了解】Bell 态 (纠缠态例子)

$$\begin{aligned} |\Phi^+\rangle &= \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}, & |\Phi^-\rangle &= \frac{|00\rangle - |11\rangle}{\sqrt{2}} \\ |\Psi^+\rangle &= \frac{|01\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}}, & |\Psi^-\rangle &= \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

注意：Bell 态不能写成 $|a\rangle \otimes |b\rangle$ 的形式，这是纠缠的标志。

6 【背】对易子 (Commutators)

6.1 【背】定义

$$[A, B] := AB - BA$$

若 $[A, B] = 0$, 称 A, B 对易。

反对易子 (Anticommutator)

$$\{A, B\} := AB + BA$$

若 $\{A, B\} = 0$, 称 A, B 反对易。

6.2 【背】同时对角化定理

若 A, B 都是厄米算符, 则

$$[A, B] = 0 \iff A, B \text{ 存在共同的正交归一本征基}$$

物理意义：对易的可观测量可以同时精确测量。若 $[A, B] \neq 0$, 则先测 A 再测 B 与先测 B 再测 A 的统计结果一般不同 (测量顺序相关)。这与测不准关系 $\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2}|\langle [A, B] \rangle|$ 相一致。

6.3 【背】重要例子

Pauli 矩阵 Pauli 矩阵 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ 之间的对易与反对易关系 (定义见 3.9 节):

- $[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$ (不对易)
- $[\sigma_y, \sigma_z] = 2i\sigma_x$
- $[\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y$
- $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}I$ (反对易, 其中 $i, j \in \{x, y, z\}$)
- $[\sigma_i, I] = 0$ (任何算符与单位矩阵对易)

例题

验证 $[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$

解:

$$\begin{aligned}\sigma_x \sigma_y &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} \\ \sigma_y \sigma_x &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} \\ [\sigma_x, \sigma_y] &= \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2i & 0 \\ 0 & -2i \end{pmatrix} = 2i\sigma_z\end{aligned}$$

7 【背】重要不等式

7.1 【背】Cauchy-Schwarz 不等式

$$|\langle \phi | \psi \rangle| \leq \|\phi\| \cdot \|\psi\|$$

等号成立当且仅当 $|\phi\rangle$ 与 $|\psi\rangle$ 线性相关。

推导

证明: 考虑非负量 (对任意 $c \in \mathbb{C}$)

$$0 \leq \langle \psi - c\phi | \psi - c\phi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle - c\langle \phi | \psi \rangle - c^*\langle \psi | \phi \rangle + |c|^2\langle \phi | \phi \rangle$$

取 $c = \frac{\langle \phi | \psi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle}$ (设 $|\phi\rangle \neq 0$), 代入整理得

$$\langle \psi | \psi \rangle - \frac{|\langle \phi | \psi \rangle|^2}{\langle \phi | \phi \rangle} \geq 0$$

即 $|\langle \phi | \psi \rangle|^2 \leq \langle \phi | \phi \rangle \langle \psi | \psi \rangle$, 开方即得。

7.2 【了解】三角不等式

$$\|\phi\rangle + |\psi\rangle\| \leq \|\phi\| + \|\psi\|$$

8 【背】量子力学基本假设 (Postulates)

8.1 【背】公设一 (假设一): 状态空间与量子态

陈述 孤立量子系统的状态由复希尔伯特空间中的一个归一化态矢 $|\psi\rangle$ 描述 (或等价地, 由相差全局相位的态矢等价类描述)。

为什么需要复数? 为什么需要相位? 量子态的系数是复数而非实数, 这是量子力学的核心特征:

- **复数表示:** 任意复数可写成 $\alpha = |\alpha|e^{i\theta}$, 其中 $|\alpha|$ 是模 (幅度), θ 是相位 (辐角)
- **相位的作用:** 相位决定了量子态之间的干涉行为
- **为什么实数不够:** 如果系数都是实数, 量子态只能是“正叠加”或“负叠加”, 无法产生量子干涉现象 (如双缝实验的干涉条纹)

物理类比: 量子态的相位类似于波的相位——两个波相遇时, 相位决定了是相长干涉还是相消干涉。

归一化与全局相位

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1, \quad |\psi\rangle \sim e^{i\gamma} |\psi\rangle$$

全局相位 vs 相对相位

- **全局相位:** 整个态乘以 $e^{i\gamma}$, 即 $|\psi\rangle \rightarrow e^{i\gamma} |\psi\rangle$
例如: $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ 与 $|\psi'\rangle = e^{i\pi/4} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ 是同一个量子态
原因: 全局相位不影响任何测量概率, 物理上不可观测
- **相对相位:** 不同项之间的相位差, 如 $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ 中 β/α 的辐角
例如: $|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ 与 $|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$ 是不同的量子态
原因: 相对相位影响干涉结果, 物理上可观测 (例如通过不同基的测量)
关键结论: 只有相对相位才是物理上有意义的; 全局相位可以任意选取 (通常选为 0)。

例题

全局相位不影响测量概率

设 $|\psi'\rangle = e^{i\gamma} |\psi\rangle$, 则对任意测量态 $|\phi\rangle$,

$$|\langle \phi | \psi' \rangle|^2 = |\langle \phi | e^{i\gamma} |\psi\rangle|^2 = |e^{i\gamma}|^2 |\langle \phi | \psi \rangle|^2 = |\langle \phi | \psi \rangle|^2$$

因此全局相位不可观测。

叠加原理 若 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ 是允许的量子态, 则

$$c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle$$

仍是允许的量子态 (归一化后使用)。

量子比特 单量子比特态可写为

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C}, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

$|0\rangle, |1\rangle$ 为计算基, 两者正交归一。

概率解释 (Born 规则预览) 系数的模方给出测量概率 (详见公设三): 在计算基 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ 上测量时,

$$P(0) = |\alpha|^2, \quad P(1) = |\beta|^2$$

归一化条件 $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ 保证总概率为 1。

不同基表示: 同一态可在任意正交基下展开, 例如

$$|+\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |-\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

例题

由测量概率写出态

若在计算基测量时, 得到 $|0\rangle$ 的概率为 $1/3$ 、 $|1\rangle$ 的概率为 $2/3$, 则态可写为

$$|\psi\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}|0\rangle + e^{i\varphi}\sqrt{\frac{2}{3}}|1\rangle$$

其中 $e^{i\varphi}$ 是相对相位 (可取任意值)。通常简化取 $\varphi = 0$ 。

施特恩-盖拉赫实验 (量子比特的实验起源) 施特恩-盖拉赫实验 (1922 年) 是展示量子测量和二能级系统的经典实验。下面用量子信息的语言完整描述。

量子系统: 电子自旋是一个二能级系统, 希尔伯特空间为 \mathbb{C}^2 。

计算基 (z 基):

$$|\uparrow\rangle = |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

这两个态是自旋沿 z 方向的本征态。

一般量子态: 在测量前, 自旋可以处于任意叠加态:

$$|\psi\rangle = \alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

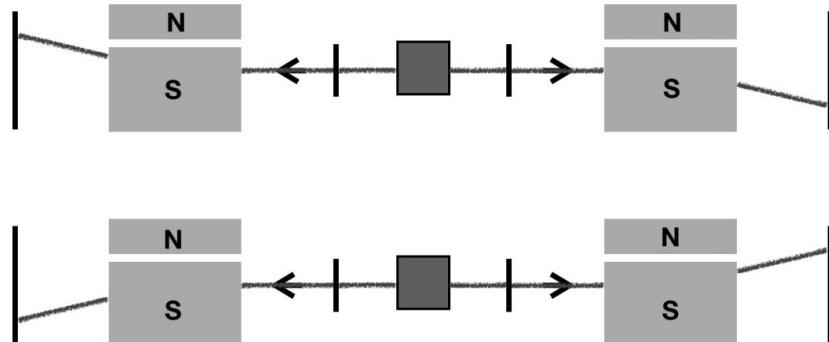


Figure 3: 施特恩-盖拉赫实验装置示意: 非均匀磁场导致自旋分束。

测量过程: S-G 装置实际上是对自旋进行投影测量。

沿 z 方向测量对应的投影算符为:

$$P_{\uparrow} = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad P_{\downarrow} = |\downarrow\rangle\langle\downarrow| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

满足 $P_{\uparrow} + P_{\downarrow} = I$ (完备性)。

测量概率 (Born 规则): 对态 $|\psi\rangle$ 测量, 得到结果的概率为:

$$P(\uparrow) = \langle\psi|P_{\uparrow}|\psi\rangle = |\langle\uparrow|\psi\rangle|^2 = |\alpha|^2$$

$$P(\downarrow) = \langle\psi|P_{\downarrow}|\psi\rangle = |\langle\downarrow|\psi\rangle|^2 = |\beta|^2$$

实验结果: 银原子束分裂为两束, 对应两个可能的测量结果。这证明:

- 测量结果是离散的 (只有两个可能值), 不是连续的
- 测量是随机的: 相同制备的原子可能得到不同结果
- 分束比例由概率 $|\alpha|^2 : |\beta|^2$ 决定

态塌缩: 测量后, 量子态塌缩到对应的本征态:

$$|\psi\rangle = \alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle \xrightarrow{\text{测得}\uparrow} |\uparrow\rangle \quad \text{或} \quad \xrightarrow{\text{测得}\downarrow} |\downarrow\rangle$$

连续测量: 不同基的测量

现在考虑沿 x 方向测量。 x 基的本征态为:

$$|\rightarrow\rangle = |+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle), \quad |\leftarrow\rangle = |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)$$

关键观察: z 基的本征态在 x 基下是叠加态!

$$|\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\rightarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\leftarrow\rangle$$

连续测量实验:

1. 第一次沿 z 方向测量, 得到 $|\uparrow\rangle$ (概率 $|\alpha|^2$)
2. 态塌缩到 $|\uparrow\rangle$
3. 第二次沿 x 方向测量, 得到 $|\rightarrow\rangle$ 或 $|\leftarrow\rangle$ 的概率各为:

$$P(\rightarrow) = |\langle\rightarrow|\uparrow\rangle|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{2}$$

$$P(\leftarrow) = |\langle\leftarrow|\uparrow\rangle|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{2}$$

4. 结果: 原本“确定”是 $|\uparrow\rangle$ 的原子束, 在 x 方向测量时又分裂为两束!

量子信息的核心概念:

- 测量基的选择: 同一个态在不同基下有不同的表示
- 不确定性: 在 z 基确定的态 ($|\uparrow\rangle$), 在 x 基是完全不确定的 (50%-50%)
- 不对易性: z 和 x 方向的测量算符不对易, 无法同时确定两个方向的自旋

数学刻画: 测量算符 (可观测量) 为 Pauli 矩阵:

$$\sigma_z = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_x = |\rightarrow\rangle\langle\rightarrow| - |\leftarrow\rangle\langle\leftarrow| = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

它们满足 $[\sigma_x, \sigma_z] = 2i\sigma_y \neq 0$ (不对易)。

总结: 施特恩-盖拉赫实验直接展示了量子信息的核心要素:

1. 二能级系统 (量子比特)
2. Born 规则 ($P = |\langle\phi|\psi\rangle|^2$)
3. 测量导致态塌缩
4. 测量基的选择和不确定性原理

量子比特的物理载体 任意二能级系统均可作为 qubit, 如光子偏振、电子自旋、原子两能级等。

Bloch 球表示 任意纯态等价表示为

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle, \quad \theta \in [0, \pi], \varphi \in [0, 2\pi)$$

(θ, φ) 对应 Bloch 球面上一点。对应的 Bloch 向量为

$$\vec{r} = (\sin\theta \cos\varphi, \sin\theta \sin\varphi, \cos\theta)$$

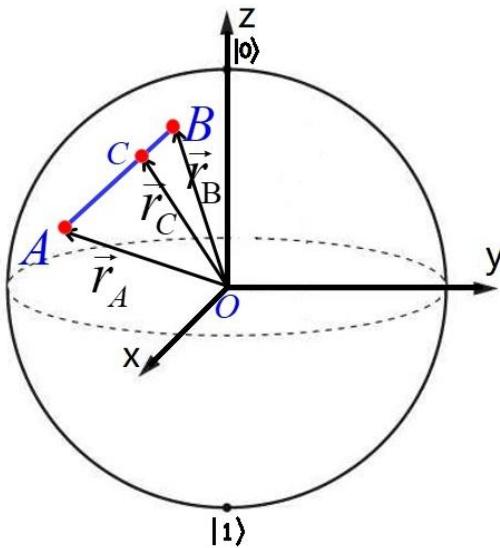


Figure 4: Bloch 球：单比特纯态对应球面点，混态对应球内点。

纯态与混合态 纯态可由单个态矢描述；混合态来自不完备知识或统计混合，需用密度算子描述。

8.2 【背】公设二（假设二）：演化（Unitary Evolution）

陈述 封闭系统的时间演化由酉算符描述：

$$|\psi(t_2)\rangle = U(t_1, t_2)|\psi(t_1)\rangle, \quad U^\dagger U = I$$

薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$$

其中 H 为哈密顿量（哈密尔顿算符）。若 H 与时间无关，则

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

因果性（初值决定演化） 给定初始态 $|\psi(t_0)\rangle$ ，薛定谔方程确定其在任意时刻的态。因此量子力学的时间演化是确定性的（概率性来自测量）。

量子逻辑门（离散演化） 常用单比特门（均为酉矩阵）：

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

其中 X 为比特翻转， Z 为相位翻转， H 可在计算基与 Hadamard 基之间切换。

线性性与量子并行性 由于酉算符线性，

$$U \left(\sum_i a_i |i\rangle \right) = \sum_i a_i U |i\rangle$$

量子门可在叠加态上“并行”作用。

例题

Hadamard 门作用

$$H|0\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} = |+\rangle, \quad H|1\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} = |-\rangle$$

8.3 【背】公设三（假设三）：测量（Measurement）

【背】一般测量（测量算子） 给定测量算子集合 $\{M_m\}$ ，满足

$$\sum_m M_m^\dagger M_m = I$$

对态 $|\psi\rangle$ ，得到结果 m 的概率与测后态为：

$$p(m) = \langle \psi | M_m^\dagger M_m | \psi \rangle, \quad |\psi_m\rangle = \frac{M_m |\psi\rangle}{\sqrt{p(m)}}$$

定义 POVM 元素 $E_m = M_m^\dagger M_m$ 。

$$E_m \succeq 0, \quad \sum_m E_m = I, \quad p(m) = \langle \psi | E_m | \psi \rangle$$

POVM 适用于非正交态判别、非破坏/非投影测量等情形。要点：非正交量子态不可被完美区分，POVM 允许在正确率与“不确定/失败”之间权衡。

【了解】POVM 小例子（补充） 任意满足 $0 \preceq E \preceq I$ 的算符都可构成二元 POVM： $\{E, I - E\}$ 。这里“ \preceq ”表示半正定序： $A \preceq B$ 的意思是 $B - A \succeq 0$ ，即对任意向量 $|\psi\rangle$ 都有 $\langle \psi | (B - A) | \psi \rangle \geq 0$ 。因此 $0 \preceq E \preceq I$ 等价于： E 的所有测量概率都在 $[0, 1]$ 范围内。例如“带噪 Z 测量”可取

$$E_0 = (1 - \epsilon)|0\rangle\langle 0| + \epsilon|1\rangle\langle 1|, \quad E_1 = I - E_0$$

其中 $\epsilon \in [0, 1/2]$ 表示判错概率。 $\epsilon = 0$ 时退化为投影测量。

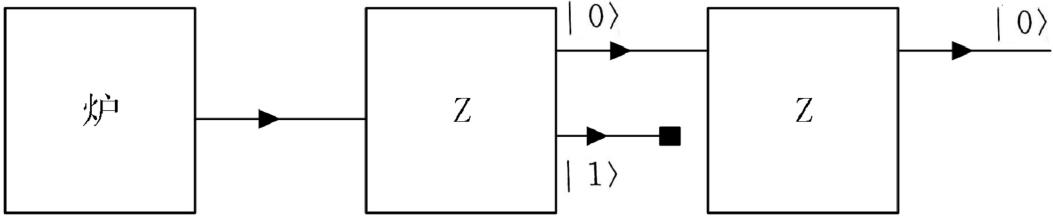


Figure 5: 测量的间接模型：系统与辅助体系经酉演化后进行读出。

【了解】含“失败”结果的 POVM (补充) 也可引入三元测量 $\{E_0, E_1, E_?\}$, 其中

$$E_0 = (1 - \eta)|0\rangle\langle 0|, \quad E_1 = (1 - \eta)|1\rangle\langle 1|, \quad E_? = \eta I$$

$E_?$ 表示“不确定/失败”结果 ($\eta \in [0, 1]$)。此类设计常用于在降低错误率与允许失败之间权衡。

若系统与辅助态 $|0\rangle_E$ 先经历酉演化 U , 再在辅助系统上做投影测量 $\{|m\rangle_E\}$, 则

$$M_m = \langle m|_E U |0\rangle_E$$

因此 $\{M_m\}$ 称为 Kraus (测量) 算子集。满足完备性条件 $\sum_m M_m^\dagger M_m = I$, 保证非选择性测量保持 $\text{tr}(\rho)$ 不变。更一般的开放系统演化也可写成 Kraus 形式: $\rho' = \sum_k E_k \rho E_k^\dagger$ (完全正、保迹映射)。

对密度算子 ρ , 有

$$p(m) = \text{tr}(M_m \rho M_m^\dagger), \quad \rho_m = \frac{M_m \rho M_m^\dagger}{p(m)}$$

并可写成

$$p(m) = \text{tr}(\rho E_m), \quad E_m = M_m^\dagger M_m$$

若不记录测量结果 (非选择性测量), 测后态为

$$\rho' = \sum_m M_m \rho M_m^\dagger$$

【背】投影测量 (可观测量) 若测量由厄米算符 M 描述, 其谱分解为

$$M = \sum_m m P_m, \quad P_m P_n = \delta_{mn} P_m, \quad \sum_m P_m = I$$

则 $p(m) = \langle \psi | P_m | \psi \rangle$, 测后态为 $P_m |\psi\rangle / \sqrt{p(m)}$ 。若忽略结果, 则 $\rho' = \sum_m P_m \rho P_m$ 。

【背】非简并情形 (补充) 若本征值互不相同, 则 $P_m = |m\rangle\langle m|$,

$$p(m) = \text{tr}(\rho P_m) = \langle m | \rho | m \rangle$$

测后态为 $|m\rangle$ (纯态情况) 或 $\rho_m = P_m \rho P_m / p(m)$ (密度算子形式)。

【了解】简并与非简并测量 若本征值互不相同, 测量后态塌缩为对应本征向量; 若存在简并, 则塌缩到对应本征子空间中。

【了解】期望值与概率 测量可观测量 M 的期望值为

$$\langle M \rangle = \sum_m m p(m)$$

【了解】三类测量的关系 当测量算子 M_m 恰为一组正交投影算符时，一般测量退化为投影测量；POVM 则是最一般的测量描述，可由投影测量在更大系统上实现。

【了解】可重复性与破坏性（补充） 投影测量具有可重复性：若对同一可观测量立即重复测量，结果保持不变。一般测量（POVM）可描述破坏性测量（如吸收型探测），测后态未必仍在原可观测量的本征态中。

【了解】测量基的意义 选择不同测量基等价于在测量前做一个酉变换。比如对 X 方向测量，可以先施加 H 将基底从 $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ 旋回到计算基后再测 Z 。

例题

对 $|+\rangle$ 做 Z 测量

计算基为 $|0\rangle, |1\rangle$, $|+\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}$ 。投影算子 $P_0 = |0\rangle\langle 0|$, $P_1 = |1\rangle\langle 1|$, 于是

$$p(0) = \langle +|P_0|+\rangle = \frac{1}{2}, \quad p(1) = \frac{1}{2}$$

测量后态分别塌缩为 $|0\rangle$ 或 $|1\rangle$ 。

例题

对 $|0\rangle$ 做 X 测量

X 基为 $|+\rangle, |-\rangle$, 且 $|0\rangle = \frac{|+\rangle + |-\rangle}{\sqrt{2}}$, 因此测得 $|+\rangle$ 与 $|-\rangle$ 的概率均为 $1/2$ 。

例题

一般态的测量概率计算

设 $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|0\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}e^{i\pi/4}|1\rangle$ 。

(1) 在计算基 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ 测量：

投影算符: $P_0 = |0\rangle\langle 0|$, $P_1 = |1\rangle\langle 1|$

概率:

$$p(0) = |\langle 0|\psi\rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{3}} \right|^2 = \frac{1}{3}$$

$$p(1) = |\langle 1|\psi\rangle|^2 = \left| \sqrt{\frac{2}{3}}e^{i\pi/4} \right|^2 = \frac{2}{3}$$

测后态: 若测得 0, 态塌缩为 $|0\rangle$; 若测得 1, 态塌缩为 $|1\rangle$ 。

(2) 在 Hadamard 基 $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ 测量：

首先将 $|\psi\rangle$ 在 $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ 基下展开。由于

$$|0\rangle = \frac{|+\rangle + |-\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |1\rangle = \frac{|+\rangle - |-\rangle}{\sqrt{2}}$$

代入得：

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} \cdot \frac{|+\rangle + |-\rangle}{\sqrt{2}} + \sqrt{\frac{2}{3}} e^{i\pi/4} \cdot \frac{|+\rangle - |-\rangle}{\sqrt{2}} \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{6}} + \sqrt{\frac{1}{3}} e^{i\pi/4} \right) |+\rangle + \left(\frac{1}{\sqrt{6}} - \sqrt{\frac{1}{3}} e^{i\pi/4} \right) |-\rangle \end{aligned}$$

概率：

$$p(+)=\left|\frac{1}{\sqrt{6}}+\sqrt{\frac{1}{3}} e^{i\pi / 4}\right|^2, \quad p(-)=\left|\frac{1}{\sqrt{6}}-\sqrt{\frac{1}{3}} e^{i\pi / 4}\right|^2$$

详细计算（以 $p(+)$ 为例）：

$$\begin{aligned} p(+)&=\left(\frac{1}{\sqrt{6}}+\frac{1}{\sqrt{3}} e^{i\pi / 4}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{6}}+\frac{1}{\sqrt{3}} e^{i\pi / 4}\right)^{*} \\ &=\left(\frac{1}{\sqrt{6}}+\frac{1}{\sqrt{3}} e^{i\pi / 4}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{6}}+\frac{1}{\sqrt{3}} e^{-i\pi / 4}\right) \\ &=\frac{1}{6}+\frac{1}{\sqrt{18}}\left(e^{i\pi / 4}+e^{-i\pi / 4}\right)+\frac{1}{3} \\ &=\frac{1}{6}+\frac{1}{\sqrt{18}} \cdot 2 \cos \frac{\pi}{4}+\frac{1}{3}=\frac{1}{6}+\frac{1}{3}+\frac{1}{3}=\frac{5}{6} \end{aligned}$$

同理

$$\begin{aligned} p(-)&=\left(\frac{1}{\sqrt{6}}-\frac{1}{\sqrt{3}} e^{i\pi / 4}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{6}}-\frac{1}{\sqrt{3}} e^{i\pi / 4}\right)^{*} \\ &=\frac{1}{6}-\frac{1}{\sqrt{18}}\left(e^{i\pi / 4}+e^{-i\pi / 4}\right)+\frac{1}{3}=\frac{1}{6}+\frac{1}{3}-\frac{1}{3}=\frac{1}{6} \end{aligned}$$

关键观察：相位 $e^{i\pi/4}$ 在计算基测量中不影响概率（只有模方），但在 Hadamard 基测量中会影响干涉项！

例题

连续测量与态塌缩

初始态： $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) = |+\rangle$

第一次测量：在计算基测量

- 概率： $p(0) = p(1) = 1/2$
- 假设测得结果为 0，态塌缩为 $|0\rangle$

第二次测量：对塌缩后的态 $|0\rangle$ 在计算基再次测量

- 概率： $p(0) = 1, p(1) = 0$
- 结果一定是 0（可重复性）

第三次测量：对 $|0\rangle$ 在 Hadamard 基测量

- $|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$
- 概率： $p(+) = p(-) = 1/2$
- 假设测得 $|+\rangle$ ，态塌缩为 $|+\rangle$

第四次测量：对 $|+\rangle$ 在计算基测量

- $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$
- 概率: $p(0) = p(1) = 1/2$
- 原本确定的 $|0\rangle$ 信息丢失了!

结论: 不同基的测量不对易——在一个基确定的信息，在另一个基测量时会被破坏。

例题

用 POVM 区分非正交态

考虑两个非正交态: $|0\rangle$ 和 $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$, 出现概率各为 $1/2$ 。

问题: 能否完美区分它们?

答案: 不能! 因为 $\langle 0|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \neq 0$ (非正交)。

策略 1: 投影测量到 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$

- 两个候选初态: $|\psi_0\rangle = |0\rangle$, $|\psi_+\rangle = |+\rangle = \frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt{2}}$, 先验各为 $1/2$
- 对 $|\psi_0\rangle$ 测量: $P(0|\psi_0) = 1$, $P(1|\psi_0) = 0$
- 对 $|\psi_+\rangle$ 测量: $P(0|\psi_+) = |\langle 0|+\rangle|^2 = \frac{1}{2}$, $P(1|\psi_+) = |\langle 1|+\rangle|^2 = \frac{1}{2}$
- 若测得 $|1\rangle$, 只能来自 $|\psi_+\rangle$, 因此确定是 $|+\rangle$ (成功)
- 若测得 $|0\rangle$, 既可能来自 $|\psi_0\rangle$ (必然) 也可能来自 $|\psi_+\rangle$ (概率 $1/2$), 因此无法确定来源
- 若强行在“测得 $|0\rangle$ 时”猜 $|0\rangle$, 错误只可能发生在真态为 $|\psi_+\rangle$ 且测得 $|0\rangle$ 的情形:

$$P_{\text{err}} = P(\psi_+) P(0|\psi_+) = \frac{1}{2} \cdot |\langle 0|+\rangle|^2 = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{4}$$

- 若反过来在“测得 $|0\rangle$ 时”猜 $|+\rangle$, 错误只会来自真态为 $|\psi_0\rangle$ 的情形:

$$P_{\text{err}} = P(\psi_0) P(0|\psi_0) = \frac{1}{2} \cdot 1 = \frac{1}{2}$$

策略 2: 允许“不确定”结果的 POVM

用更直观的话说: POVM 就是一组“可能的测量结果”, 每个结果对应一个算符, 记为

$$\{E_0, E_+, E_?\}, \quad E_0 + E_+ + E_? = I, \quad E_k \succeq 0$$

物理意义是: 若真实态为 $|\psi\rangle$, 则出现结果 k 的概率是

$$P(k|\psi) = \langle \psi | E_k | \psi \rangle$$

我们希望“一旦给出结论就不出错”, 也就是

$$P(0|+) = \langle + | E_0 | + \rangle = 0, \quad P(+|0) = \langle 0 | E_+ | 0 \rangle = 0$$

意思是: 若真实态是 $|+\rangle$, 就绝不输出“是 $|0\rangle$ ”; 反之亦然。这迫使 E_0 只能“响应”与 $|+\rangle$ 正交的方向 (即 $|-\rangle$), 而 E_+ 只能“响应”与 $|0\rangle$ 正交的方向 (即 $|1\rangle$)。因此一个简单选择是

$$E_0 = c |-\rangle\langle -|, \quad E_+ = c |1\rangle\langle 1|, \quad E_? = I - E_0 - E_+$$

其中 $c > 0$ 需要选得足够小, 使得 $E_? \succeq 0$ (保证“失败”结果的概率非负)。如何确定最优 c (保证永不出错): 在 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ 基下,

$$E_? = \begin{pmatrix} 1 - \frac{c}{2} & \frac{c}{2} \\ \frac{c}{2} & 1 - \frac{3c}{2} \end{pmatrix}$$

要求 $E_? \succeq 0$ 等价于两个特征值均 ≥ 0 。对 2×2 实对称矩阵 $\begin{pmatrix} a & b \\ b & d \end{pmatrix}$ 有一个常用判别：

$$E_? \succeq 0 \iff a \geq 0, d \geq 0, ad - b^2 \geq 0$$

理由：对任意向量 (x, y) , 有二次型

$$Q(x, y) = ax^2 + 2bxy + dy^2 \geq 0$$

取 $(1, 0)$ 、 $(0, 1)$ 得到 $a \geq 0, d \geq 0$ 。令 $t = y/x$ ($x \neq 0$)，

$$Q(x, y) = x^2(a + 2bt + dt^2) \geq 0 \quad \forall t$$

要求一元二次式对任意 t 非负, 等价于判别式 $(2b)^2 - 4ad \leq 0$, 即 $ad - b^2 \geq 0$ 。因此只需检查这三个条件。代入本题即

$$1 - \frac{c}{2} \geq 0, \quad 1 - \frac{3c}{2} \geq 0, \quad \det(E_?) = \left(1 - \frac{c}{2}\right)\left(1 - \frac{3c}{2}\right) - \left(\frac{c}{2}\right)^2 \geq 0$$

其中最后一个条件化简为

$$1 - 2c + \frac{c^2}{2} \geq 0 \iff c^2 - 4c + 2 \geq 0$$

解得 $c \leq 2 - \sqrt{2}$ 或 $c \geq 2 + \sqrt{2}$ 。结合 $c > 0$ 及前两条不等式 (要求 $c \leq 2/3$), 最终最优为

$$c = 2 - \sqrt{2}$$

此时 $E_?$ 仍为半正定, 且成功率最大。

成功/失败概率 (直接代入):

$$|+\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |-\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

于是

$$P(\text{判为 } 0|0) = \langle 0|E_0|0\rangle = c|\langle 0|-\rangle|^2 = \frac{c}{2}$$

$$P(\text{判为 } +|+) = \langle +|E_+|+\rangle = c|\langle 1|+\rangle|^2 = \frac{c}{2}$$

因此 (先验各为 $1/2$)

$$P_{\text{succ}} = \frac{1}{2} \cdot \frac{c}{2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{c}{2} = \frac{c}{2}, \quad P_? = 1 - P_{\text{succ}}$$

说明：这里写出的只是与成功率直接相关的几个概率。对三元 POVM, 每个输入态都有三个条件概率, 且总和为 1:

$$P(0|\psi) + P(+|\psi) + P(?|\psi) = 1$$

本例中由于“无错判别”条件, $P(+|0) = 0$ 、 $P(0|+) = 0$, 因此省略未写。若取最优 $c = 2 - \sqrt{2}$ (使 $E_? \succeq 0$ 的最大值), 则

$$P_{\text{succ}} = 1 - \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad P_? = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

即永不出错, 但约有 70.7% 概率得到“不确定”结果。

权衡：降低错误率 vs 增加失败率。

8.4 【背】公设四（假设四）：复合系统（Composite Systems）

陈述 若系统 A 与 B 的状态空间分别为 $\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_B$, 则复合系统的状态空间为 $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ 。

一般态展开 两比特系统可写成

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j \in \{0,1\}} c_{ij} |i\rangle \otimes |j\rangle$$

若存在 $|a\rangle, |b\rangle$ 使得 $|\psi\rangle = |a\rangle \otimes |b\rangle$, 称为**可分态**；否则为**纠缠态**。

多量子比特计算基 两比特基: $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$; 三比特基: $|000\rangle, \dots, |111\rangle$ (共 2^3 个)。一般 n 比特系统维度为 2^n , 基可用二进制索引表示。因此多比特态是 2^n 个基态的线性叠加, 但测量只能读出有限经典结果。

$$|\psi\rangle = \sum_{i=0}^{2^n-1} a_i |i\rangle, \quad \sum_i |a_i|^2 = 1$$

二进制索引与次序（补充） 通常约定

$$|i\rangle \otimes |j\rangle = |2i + j\rangle$$

例如 $|1\rangle \otimes |0\rangle = |10\rangle = |2\rangle$ 。具体次序应与电路图中的线路顺序保持一致。

【背】复合系统的部分测量 在多比特系统中, 我们经常需要**只测量部分比特**, 计算时可直接用张量积性质。

常用张量积规则:

- 线性: $(|u\rangle + |v\rangle) \otimes |w\rangle = |u\rangle \otimes |w\rangle + |v\rangle \otimes |w\rangle$
- 算符作用: $(A \otimes B)(|u\rangle \otimes |v\rangle) = (A|u\rangle) \otimes (B|v\rangle)$
- 内积: $\langle u \otimes v | u' \otimes v' \rangle = \langle u | u' \rangle \langle v | v' \rangle$

只测量第一个比特的通式: 将两比特态按第一个比特分组

$$|\psi\rangle = |0\rangle \otimes |\phi_0\rangle + |1\rangle \otimes |\phi_1\rangle$$

其中

$$|\phi_0\rangle = c_{00}|0\rangle + c_{01}|1\rangle, \quad |\phi_1\rangle = c_{10}|0\rangle + c_{11}|1\rangle$$

在计算基测量第一个比特时,

$$P_0 = |0\rangle\langle 0|, \quad P_1 = |1\rangle\langle 1|, \quad M_0 = P_0 \otimes I, \quad M_1 = P_1 \otimes I$$

利用张量积规则,

$$(P_0 \otimes I)|\psi\rangle = |0\rangle \otimes |\phi_0\rangle, \quad (P_1 \otimes I)|\psi\rangle = |1\rangle \otimes |\phi_1\rangle$$

因此测得 $A = 0$ 的概率为

$$p(A = 0) = \langle \psi | (P_0 \otimes I)|\psi\rangle = \langle \phi_0 | \phi_0 \rangle = |c_{00}|^2 + |c_{01}|^2$$

测后态为

$$|\psi_0\rangle = \frac{|0\rangle \otimes |\phi_0\rangle}{\sqrt{p(A = 0)}} = |0\rangle \otimes \frac{c_{00}|0\rangle + c_{01}|1\rangle}{\sqrt{|c_{00}|^2 + |c_{01}|^2}}$$

同理可得 $p(A = 1) = \langle \phi_1 | \phi_1 \rangle$ 与对应测后态。

一般规则 (n 个量子比特):

- 只测量第 1 个比特: $M_m^{(1)} = M_m \otimes I \otimes I \otimes \cdots \otimes I$
- 只测量第 2 个比特: $M_m^{(2)} = I \otimes M_m \otimes I \otimes \cdots \otimes I$
- 只测量第 k 个比特: $M_m^{(k)} = I \otimes \cdots \otimes I \otimes \underbrace{M_m}_{\text{第 } k \text{ 位}} \otimes I \otimes \cdots \otimes I$

其中每个 I 都是 2×2 单位矩阵, M_m 是 2×2 测量算符。

例题

部分测量的详细计算

考虑态 $|\psi\rangle = \frac{1}{2}(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle)$

(1) 只测量第一个比特 (在计算基):

测量算符 (投影): $P_0 \otimes I$, $P_1 \otimes I$, 其中

$$P_0 = |0\rangle\langle 0|, \quad P_1 = |1\rangle\langle 1|, \quad I = |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|$$

它们在标准基上的作用为

$$(P_0 \otimes I)|00\rangle = |00\rangle, \quad (P_0 \otimes I)|01\rangle = |01\rangle, \quad (P_0 \otimes I)|10\rangle = 0, \quad (P_0 \otimes I)|11\rangle = 0$$

计算 $p(A = 0)$:

$$\begin{aligned} p(A = 0) &= \langle \psi | (P_0 \otimes I) | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{4} [\langle 00 | + \langle 01 | + \langle 10 | + \langle 11 |] (P_0 \otimes I) (|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle) \\ &= \frac{1}{4} [\langle 00 | + \langle 01 | + \langle 10 | + \langle 11 |] (|00\rangle + |01\rangle) \\ &= \frac{1}{4} [1 + 1 + 0 + 0] = \frac{1}{2} \end{aligned}$$

同理 $p(A = 1) = \frac{1}{2}$ 。

测后态 (若测得 $A = 0$):

$$|\psi'\rangle = \frac{(P_0 \otimes I)|\psi\rangle}{\sqrt{1/2}} = \frac{\frac{1}{2}(|00\rangle + |01\rangle)}{\sqrt{1/2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |01\rangle) = |0\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$$

物理解释:

- 第一个比特确定为 $|0\rangle$
- 第二个比特处于 $|+\rangle$ 态
- 原态的 $|10\rangle$ 和 $|11\rangle$ 项被“塌缩掉”了

(2) 只测量第二个比特 (在计算基):

测量算符: $I \otimes P_0$, $I \otimes P_1$, 其中

$$(I \otimes P_0)|00\rangle = |00\rangle, \quad (I \otimes P_0)|10\rangle = |10\rangle, \quad (I \otimes P_0)|01\rangle = 0, \quad (I \otimes P_0)|11\rangle = 0$$

$p(B = 0)$:

$$\begin{aligned} p(B = 0) &= \langle \psi | (I \otimes P_0) | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{4} [\langle 00 | + \langle 01 | + \langle 10 | + \langle 11 |] (|00\rangle + |10\rangle) \\ &= \frac{1}{2} \end{aligned}$$

测后态 (若测得 $B = 0$):

$$|\psi'\rangle = \frac{(I \otimes P_0)|\psi\rangle}{\sqrt{1/2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |10\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |0\rangle$$

第二个比特确定为 $|0\rangle$, 第一个比特处于 $|+\rangle$ 态。

(3) 同时测量两个比特:

这就是通常的测量, 测量算符 (四个投影):

$$P_{ij} = |i\rangle\langle i| \otimes |j\rangle\langle j|, \quad i, j \in \{0, 1\}$$

它们满足 $\sum_{i,j} P_{ij} = I$ 。对本例

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2} \sum_{i,j \in \{0,1\}} |ij\rangle$$

因此

$$p(ij) = \langle\psi|P_{ij}|\psi\rangle = |c_{ij}|^2 = \left|\frac{1}{2}\right|^2 = \frac{1}{4}$$

测得结果为 (i, j) 时的测后态:

$$|\psi_{ij}\rangle = \frac{P_{ij}|\psi\rangle}{\sqrt{p(ij)}} = \frac{\frac{1}{2}|ij\rangle}{\sqrt{1/4}} = |ij\rangle$$

(四个可能结果之一)。

部分迹的矩阵直观 (补充) 对两比特密度矩阵 ρ_{AB} , 对 B 做偏迹等价于对 B 的矩阵块求迹, 可理解为“对 B 的指标求和”, 从而得到 A 的 2×2 矩阵。

例题

可分态 vs 纠缠态的判别

态 1: $|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |10\rangle)$

尝试分解:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |0\rangle = |+\rangle \otimes |0\rangle$$

这是可分态 (product state)。

态 2: $|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$ (Bell 态 $|\Phi^+\rangle$)

假设 $|\psi_2\rangle = (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) \otimes (\gamma|0\rangle + \delta|1\rangle)$

展开右边: $\alpha\gamma|00\rangle + \alpha\delta|01\rangle + \beta\gamma|10\rangle + \beta\delta|11\rangle$

要求: $\alpha\gamma = \frac{1}{\sqrt{2}}$, $\alpha\delta = 0$, $\beta\gamma = 0$, $\beta\delta = \frac{1}{\sqrt{2}}$

从 $\alpha\delta = 0$ 得 $\alpha = 0$ 或 $\delta = 0$; 从 $\beta\gamma = 0$ 得 $\beta = 0$ 或 $\gamma = 0$

但若 $\alpha = 0$, 则 $\alpha\gamma = 0 \neq \frac{1}{\sqrt{2}}$, 矛盾! 其他情况类似。

因此 $|\psi_2\rangle$ 不可分解, 是纠缠态。

例题

两比特系统的测量

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

(1) 只测量第一个比特 (在计算基):

测量算符: $P_0 \otimes I = |0\rangle\langle 0| \otimes I$, $P_1 \otimes I = |1\rangle\langle 1| \otimes I$

概率:

$$p(0) = \langle \Phi^+ | (P_0 \otimes I) |\Phi^+ \rangle = \frac{1}{2} [\langle 00 | + \langle 11 |] (|00\rangle + |11\rangle) = \frac{1}{2}$$

同理 $p(1) = \frac{1}{2}$

测后态: 若测得 0, 态塌缩为

$$\frac{(P_0 \otimes I)|\Phi^+\rangle}{\sqrt{p(0)}} = \frac{(P_0 \otimes I)\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)}{\sqrt{1/2}} = \frac{\frac{1}{\sqrt{2}}|00\rangle}{\sqrt{1/2}} = |00\rangle$$

关键: 测量第一个比特为 0 后, 第二个比特也确定为 0! 这是纠缠的体现。

(2) 同时测量两个比特 (在计算基):

四个测量算符: $P_{00} = |00\rangle\langle 00|$, $P_{01} = |01\rangle\langle 01|$, $P_{10} = |10\rangle\langle 10|$, $P_{11} = |11\rangle\langle 11|$

概率:

$$p(00) = |\langle 00 | \Phi^+ \rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2}$$

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

$$p(01) = p(10) = 0$$

结论: 只能测得 00 或 11, 永远不会得到 01 或 10——两个比特完全关联!

例题

部分迹 (偏迹) 的计算

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

密度矩阵:

$$\begin{aligned} \rho_{AB} &= |\Phi^+\rangle\langle \Phi^+| \\ &= \frac{1}{2}(|00\rangle + |11\rangle)(\langle 00 | + \langle 11 |) \\ &= \frac{1}{2}(|00\rangle\langle 00| + |00\rangle\langle 11| + |11\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 11|) \end{aligned}$$

矩阵形式 (基序 $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$):

$$\rho_{AB} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

对第二个比特做偏迹:

$$\rho_A = \text{tr}_B(\rho_{AB}) = \sum_{j=0}^1 (I_A \otimes \langle j |_B) \rho_{AB} (I_A \otimes |j\rangle_B)$$

计算：

$$\begin{aligned}
 \rho_A &= (I \otimes \langle 0 |) \rho_{AB} (I \otimes |0\rangle) + (I \otimes \langle 1 |) \rho_{AB} (I \otimes |1\rangle) \\
 &= \frac{1}{2} [\langle 0|00\rangle\langle 00|0\rangle + \langle 0|11\rangle\langle 11|0\rangle] + \frac{1}{2} [\langle 1|00\rangle\langle 00|1\rangle + \langle 1|11\rangle\langle 11|1\rangle] \\
 &= \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1| \\
 &= \frac{1}{2}I
 \end{aligned}$$

矩阵形式：

$$\rho_A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

关键结论：

- ρ_A 是最大混合态（完全随机）
- 虽然整体态 $|\Phi^+\rangle$ 是纯态，但子系统 A 的约化态是混态！
- 这是纠缠的标志：单独看一个子系统，看不出任何确定信息
- 纯度： $\text{tr}(\rho_A^2) = \frac{1}{2} < 1$ （混态）

例题

双自旋纠缠单重态

双自旋施特恩-盖拉赫实验中常出现单重态

$$|\Psi^-\rangle = \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}}$$

测量关联：

- 若测量第一个自旋为 $|0\rangle$ （向上），第二个必为 $|1\rangle$ （向下）
- 若测量第一个自旋为 $|1\rangle$ （向下），第二个必为 $|0\rangle$ （向上）
- 两个自旋呈现完全反相关（总自旋为 0）

约化密度矩阵：

$$\rho_A = \text{tr}_B(|\Psi^-\rangle\langle\Psi^-|) = \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1| = \frac{1}{2}I$$

与 $|\Phi^+\rangle$ 相同——所有 Bell 态的约化态都是最大混合态！

例题

可分态的约化密度矩阵

考虑可分态 $|\psi\rangle = |+\rangle \otimes |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |10\rangle)$

密度矩阵：

$$\rho_{AB} = |\psi\rangle\langle\psi| = (|+\rangle\langle+|) \otimes (|0\rangle\langle 0|)$$

约化密度矩阵：

$$\rho_A = \text{tr}_B(\rho_{AB}) = \text{tr}_B[(|+\rangle\langle+|) \otimes (|0\rangle\langle 0|)] = |+\rangle\langle+| \cdot \text{tr}(|0\rangle\langle 0|) = |+\rangle\langle+|$$

这是纯态！矩阵形式：

$$\rho_A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

纯度: $\text{tr}(\rho_A^2) = 1$ (纯态)

对比: 可分态的约化态仍是纯态; 纠缠态的约化态是混态。这是判别纠缠的重要方法!

9 【了解】波函数与连续表象

位置表象与玻恩 (Born) 解释 在位置基 $|x\rangle$ 下, 波函数定义为

$$\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle$$

其物理意义是概率幅度, 概率密度为

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2$$

归一化条件为

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1$$

因此粒子出现在区间 $[a, b]$ 的概率为

$$P_{[a, b]} = \int_a^b |\psi(x, t)|^2 dx$$

从离散基到连续基的极限中, $\psi(x, t)$ 可视作态矢在位置本征态上的展开系数。

德布罗意物质波与衍射直觉 自由粒子可用平面波 $\psi(x) \propto e^{ikx}$ 描述, 其动量满足

$$p = \hbar k, \quad \lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{\hbar}{p}$$

这对应德布罗意物质波。双缝干涉/衍射实验展示了粒子波动性。

波函数的基本要求 波函数应当单值、有限且连续 (在势能不发散处还应连续可导)。

概率流密度与连续性方程 对一维系统, 概率流密度

$$j(x, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right)$$

满足连续性方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0$$

体现了概率守恒。对自由粒子平面波, 可得 $j = \frac{p}{m}\rho$, 体现“流密度 = 速度 \times 密度”的直觉。对全空间积分可得 $\frac{d}{dt} \int |\psi(x, t)|^2 dx = 0$, 说明归一化随时间保持。三维情况下

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0, \quad \vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

位置与动量算符

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x), \quad \hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x)$$

其中 \hat{x} 也称坐标算符。因此

$$\langle x \rangle = \int \psi^* x \psi dx, \quad \langle p \rangle = \int \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx$$

能量算符 (补充) 若哈密顿量为 $H = \frac{p^2}{2m} + V(\hat{x})$, 则

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H\psi(x, t)$$

形式上可把 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ 视为能量算符在位置表象中的作用。

动量表象中的平均值 若动量波函数为 $\phi(p)$, 则

$$\langle p \rangle = \int p |\phi(p)|^2 dp$$

位置与动量表象通过傅里叶变换联系。

例题

平面波的动量期望

设 $\psi(x) = Ae^{ikx}$, 则

$$\hat{p}\psi = \hbar k\psi \Rightarrow \langle p \rangle = \hbar k$$

10 【了解】定态薛定谔方程与典型模型

10.1 【了解】定态薛定谔方程

当哈密顿量 H 不显含时间时, 可将含时薛定谔方程分离变量:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iEt/\hbar} |\phi\rangle$$

代入得定态薛定谔方程 (本征值问题):

$$H|\phi\rangle = E|\phi\rangle$$

定态的物理意义 若系统处于某一能量本征态 $|\phi\rangle$, 概率密度

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2$$

与时间无关。能量本征态称为定态。

本征态/本征解展开 任意初态都可展开为本征态叠加 (离散谱为求和, 连续谱为积分):

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} |\phi_n\rangle \quad \text{或} \quad |\psi(t)\rangle = \int c(E) e^{-iEt/\hbar} |\phi_E\rangle dE$$

$|c_n|^2$ 表示测得能量为 E_n 的概率。

10.2 【了解】本征函数性质与边界条件

- **波函数条件:** 单值、有限、连续 (在势能不发散处还应连续可导)
- **正交与完备:** 束缚态本征函数彼此正交并可构成完备基
- **非简并性:** 一维束缚态能级通常非简并
- **量子化来源:** 边界条件使能量谱离散化

10.3 【了解】典型模型（速记）

一维无限深势阱 势阱 $V(x) = 0$ ($0 < x < L$)，其余处 $V = \infty$ 。本征函数与能级：

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}, \quad E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

一维谐振子 能级为

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

本征函数含厄密多项式 (Hermite)。其方程可化为厄密方程 (Hermite equation)。

氢原子（中心势问题） 在球坐标中分离变量，能级

$$E_n = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

波函数由径向部分与角向部分构成，径向部分含广义拉盖尔多项式，量子数为 (n, l, m) 。基态波函数常写为

$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$$

其中 a_0 为波尔半径。

11 【了解】算符、对易关系与期望值演化

算符与厄米性 算符是将函数/态映射到函数/态的运算。物理可观测量对应厄米算符：

$$\langle \phi | A | \psi \rangle = \langle A \phi | \psi \rangle \iff A^\dagger = A$$

基本对易关系 位置与动量满足

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

角动量算符

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}, \quad L_x = yp_z - zp_y, \quad L_y = zp_x - xp_z, \quad L_z = xp_y - yp_x$$

其对易关系为

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z \quad (\text{循环置换})$$

算符函数（提示） 对算符 A 的函数可用泰勒级数定义，例如

$$f(A) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n A^n$$

当算符不对易时需注意乘法顺序不可交换。

Ehrenfest/海森堡型公式 若 A 不显含时间, 则

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle_\psi = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle_\psi$$

若 A 显含时间, 则

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle_\psi = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle_\psi + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle_\psi$$

若 $[H, A] = 0$ (且 A 不显含时间), 则 $\langle A \rangle_\psi$ 为常量, 对应守恒量。特别地, 若 $A = H$ 且 H 不显含时间, 则 $\frac{d}{dt}\langle H \rangle_\psi = 0$ (能量守恒)。

位置与动量的经典极限 (补充) 对 $H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$, 可得

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle_\psi = \frac{\langle p \rangle_\psi}{m}, \quad \frac{d}{dt}\langle p \rangle_\psi = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle_\psi$$

这体现了 Ehrenfest 定理与经典牛顿方程的对应关系。

12 【了解】薛定谔/海森堡/相互作用表象

术语说明 此处“表象”(picture) 指动力学描述方式, 不同于前文基变换意义下的“表象/表示”(representation)。

薛定谔表象 态矢随时间演化, 算符 (若无显含时间) 不随时间变:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle$$

海森堡表象 态矢固定, 算符随时间演化:

$$\frac{dA_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, A_H] + \left(\frac{\partial A}{\partial t} \right)_H$$

若 $U(t) = e^{-iHt/\hbar}$, 则

$$A_H(t) = U^\dagger(t) A_S U(t), \quad |\psi_H\rangle = |\psi(0)\rangle$$

相互作用表象 将哈密顿量拆分 $H = H_0 + V$, 部分时间依赖移到态矢, 部分移到算符, 便于处理微扰或相互作用问题。

$$|\psi_I(t)\rangle = U_0^\dagger(t) |\psi_S(t)\rangle, \quad A_I(t) = U_0^\dagger(t) A_S U_0(t), \quad U_0(t) = e^{-iH_0 t/\hbar}$$

三种表象的等价性 (补充) 无论采用哪种表象, 物理预测一致:

$$\langle A \rangle = \langle \psi_S(t) | A_S | \psi_S(t) \rangle = \langle \psi_H | A_H(t) | \psi_H \rangle$$

只是“时间依赖”分配在态矢还是算符上不同。

13 【背】态叠加与概率幅度规则

叠加原理 若 ψ_1, ψ_2 是薛定谔方程的解, 则任意线性组合 $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ 仍是解。

概率幅度的四条规则（简化版）

1. 不可区分路径：总幅度为各路径幅度之和。
2. 可区分末态：总概率为各末态概率之和。
3. 连续跃迁：总幅度为分段幅度之积。
4. 独立体系：总体幅度为各子系统幅度之积。

这说明量子叠加是幅度相加而非概率相加。典型例子是电子双缝干涉：两路径幅度相加产生干涉条纹。Born 规则：概率 $P = |\text{幅度}|^2$ 。

双缝干涉的幅度叠加（补充） 若通过两条不可区分路径到达同一末态的幅度分别为 ψ_1, ψ_2 , 则

$$P = |\psi_1 + \psi_2|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + 2\text{Re}(\psi_1^*\psi_2)$$

最后一项即干涉项。若引入路径信息使两路径可区分，则干涉项消失，概率退化为 $|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$ 。

14 【背】表象与酉变换

基与表象 设 $\{|a_i\rangle\}$ 、 $\{|b_j\rangle\}$ 是两组正交归一基，定义

$$U_{ji} = \langle b_j | a_i \rangle$$

则 U 为酉矩阵，系数在两基之间变换为

$$c'_j = \sum_i U_{ji} c_i \iff \vec{c}' = U \vec{c}$$

算符的表象变换 若算符在 a 表象中矩阵为 $A^{(a)}$ ，在 b 表象中矩阵为 $A^{(b)}$ ，则

$$A^{(b)} = U A^{(a)} U^\dagger$$

酉变换不改变算符的本征值。

例：计算基与 Hadamard 基变换（补充） 设 a 表象为计算基 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ ， b 表象为 $|+\rangle, |-\rangle$ ，则

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad \vec{c}' = U \vec{c}$$

例如 $|0\rangle$ 的系数 $\vec{c} = (1, 0)^T$ ，在 b 表象中为 $\vec{c}' = (\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}})^T$ 。算符也满足 $A^{(b)} = U A^{(a)} U^\dagger$ ，因此 Z 在 Hadamard 基下变为

$$U Z U^\dagger = X$$

术语对照 课件中常写“么正变换”，即么正/酉变换的同义说法。

连续完备基 位置表象满足完备性：

$$\int |x\rangle \langle x| dx = I, \quad \psi(x) = \langle x | \psi \rangle$$

动量表象同理： $\int |p\rangle \langle p| dp = I$ 。

15 【了解】位置/动量表象与傅里叶变换

傅里叶变换对 位置与动量波函数互为傅里叶变换:

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \psi(x) dx$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar} \phi(p) dp$$

且归一化保持:

$$\int |\psi(x)|^2 dx = \int |\phi(p)|^2 dp = 1$$

位置/动量本征态 (补充) 位置与动量本征态满足

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}, \quad \langle x|x'\rangle = \delta(x - x'), \quad \langle p|p'\rangle = \delta(p - p')$$

因此动量本征态在位置表象中是平面波, 位置本征态则对应 δ 函数。

$$\int |p\rangle\langle p| dp = I, \quad \int |x\rangle\langle x| dx = I$$

16 【背】密度算子与混合态

纯态与混合态 (前置) 若一个系统的状态可以用一个态矢 $|\psi\rangle$ 完全描述, 则称为**纯态**。若我们只知道系统以一定概率处于若干纯态之一 (例如: 以 p_1 处于 $|\psi_1\rangle$, 以 p_2 处于 $|\psi_2\rangle$), 这种统计混合称为**混合态**。混合态一般无法用单个态矢表示, 需要用密度算子来统一描述。

定义 若系统以概率 p_k 处于纯态 $|\psi_k\rangle$, 则其密度算子为

$$\rho = \sum_k p_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k|, \quad p_k \geq 0, \quad \sum_k p_k = 1$$

纯态特例: 若系统确定处于 $|\psi\rangle$, 则

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$$

性质

- $\rho^\dagger = \rho$ (厄米)
- $\rho \succeq 0$ (半正定)
- $\text{tr}(\rho) = 1$
- 纯态判据: $\rho^2 = \rho$ 或 $\text{tr}(\rho^2) = 1$
混态满足 $\text{tr}(\rho^2) < 1$ 。

【背】纯态与混合态的判断方法 方法 1: 计算 ρ^2

- 若 $\rho^2 = \rho$, 则是纯态
 - 若 $\rho^2 \neq \rho$, 则是混合态
- 方法 2: 计算 $\text{tr}(\rho^2)$ (纯度)**
- 若 $\text{tr}(\rho^2) = 1$, 则是纯态
 - 若 $\text{tr}(\rho^2) < 1$, 则是混合态

- 纯度越接近 1, 态越“纯”; 纯度越小, 混合程度越高
- 方法 3: 检查秩 (rank)**
- 若 $\text{rank}(\rho) = 1$, 则是纯态 (可以写成 $|\psi\rangle\langle\psi|$)
 - 若 $\text{rank}(\rho) > 1$, 则是混合态
- 物理意义:**
- 纯态: 系统处于确定的量子态 $|\psi\rangle$, 不确定性完全来自量子测量
 - 混合态: 系统处于多个量子态的概率混合, 既有量子不确定性, 又有经典概率不确定性

例题

判断纯态: 单态

对单态 $|\Psi^-\rangle = \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}}$, 其密度算子为

$$\rho = |\Psi^-\rangle\langle\Psi^-| = \frac{1}{2}(|01\rangle - |10\rangle)(\langle 01| - \langle 10|)$$

方法 1: 计算 ρ^2

$$\rho^2 = |\Psi^-\rangle\langle\Psi^-|\Psi^-\rangle\langle\Psi^-| = |\Psi^-\rangle \underbrace{\langle\Psi^-|\Psi^-\rangle}_{=1} \langle\Psi^-| = |\Psi^-\rangle\langle\Psi^-| = \rho$$

因为 $\rho^2 = \rho$, 所以是纯态。

方法 2: 计算 $\text{tr}(\rho^2)$

$$\text{tr}(\rho^2) = \text{tr}(\rho) = \text{tr}(|\Psi^-\rangle\langle\Psi^-|) = \langle\Psi^-|\Psi^-\rangle = 1$$

因为 $\text{tr}(\rho^2) = 1$, 所以是纯态。

例题

判断混合态: 约化密度算子

考虑单态 $|\Psi^-\rangle = \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}}$ 的第一个量子比特的约化密度算子:

$$\rho_1 = \text{tr}_2(\rho) = \frac{1}{2}(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{I}{2}$$

方法 1: 计算 ρ_1^2

$$\rho_1^2 = \left(\frac{I}{2}\right)^2 = \frac{I}{4} \neq \frac{I}{2} = \rho_1$$

因为 $\rho_1^2 \neq \rho_1$, 所以是混合态。

方法 2: 计算 $\text{tr}(\rho_1^2)$

$$\text{tr}(\rho_1^2) = \text{tr}\left(\frac{I}{4}\right) = \frac{1}{4}\text{tr}(I) = \frac{1}{4} \times 2 = \frac{1}{2} < 1$$

因为 $\text{tr}(\rho_1^2) = \frac{1}{2} < 1$, 所以是混合态。

物理意义: 纠缠态的子系统总是混合态 (除非整个态可分离)。这是量子纠缠的重要性质!

例题

判断纯态：经典概率混合的对比

考虑量子叠加态 $|+\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}$ 的密度算子：

$$\rho_+ = |+\rangle\langle+| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

计算 $\text{tr}(\rho_+^2)$ ：

$$\rho_+^2 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \rho_+$$

因此 $\text{tr}(\rho_+^2) = \text{tr}(\rho_+) = 1$, 是纯态。

对比：经典混合态”以 $1/2$ 概率是 $|0\rangle$, 以 $1/2$ 概率是 $|1\rangle$ ”：

$$\rho_{\text{mix}} = \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

计算纯度：

$$\text{tr}(\rho_{\text{mix}}^2) = \text{tr}\left(\frac{I}{4}\right) = \frac{1}{2} < 1$$

所以是混合态。注意 ρ_+ 和 ρ_{mix} 虽然在 Z 基下测量概率相同, 但前者是纯态 (有相干), 后者是混合态 (无相干)!

证明 (简要)

- **厄米性:** $\rho^\dagger = (\sum_k p_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k|)^\dagger = \sum_k p_k (|\psi_k\rangle\langle\psi_k|)^\dagger = \sum_k p_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k| = \rho$
- **半正定:** 对任意 $|\phi\rangle$,

$$\langle\phi|\rho|\phi\rangle = \sum_k p_k |\langle\phi|\psi_k\rangle|^2 \geq 0$$

因此 $\rho \succeq 0$ 。

- **迹为 1:**

$$\text{tr}(\rho) = \sum_k p_k \text{tr}(|\psi_k\rangle\langle\psi_k|) = \sum_k p_k \langle\psi_k|\psi_k\rangle = \sum_k p_k = 1$$

- **纯态判据:** 若 $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$, 则

$$\rho^2 = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = \rho, \quad \text{tr}(\rho^2) = \text{tr}(\rho) = 1$$

反之, 若 $\rho = \sum_k p_k |k\rangle\langle k|$ (谱分解) 且 $\text{tr}(\rho^2) = \sum_k p_k^2 = 1$, 则只有一个 $p_k = 1$ 其余为 0, 故 ρ 必为纯态投影。

迹的基不变性 (补充) 对任意酉变换 U , 有 $\text{tr}(U\rho U^\dagger) = \text{tr}(\rho)$, 因此 $\text{tr}(\rho) = 1$ 与基的选择无关。

纯度的不变性 (补充) 纯度 $\text{tr}(\rho^2)$ 在酉演化下保持不变: $\text{tr}((U\rho U^\dagger)^2) = \text{tr}(\rho^2)$ 。

谱分解与概率 (补充) 密度算子可在其本征基中写成

$$\rho = \sum_k p_k |k\rangle\langle k|$$

其中 $p_k \in [0, 1]$ 且 $\sum_k p_k = 1$ 。这些 p_k 可解释为处于本征态 $|k\rangle$ 的概率。

【了解】相干与经典混合 (补充) 这里的“相干”指的是量子叠加带来的相位关联，在密度矩阵中体现为非对角元 ($|0\rangle\langle 1|$ 与 $|1\rangle\langle 0|$ 项)。而“经典混合”是指系统以概率处于若干纯态之一 (但并没有相位关系)，密度矩阵是这些纯态投影的概率加权和，通常对角 (在相应基下)。因此：有非对角元 \Rightarrow 有相干；只有对角元 \Rightarrow 只是经典统计混合。

以单比特为例，

$$|+\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \Rightarrow \rho_+ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

计算过程：

$$\begin{aligned} \rho_+ &= |+\rangle\langle +| = \frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle)(\langle 0| + \langle 1|) \\ &= \frac{1}{2}(|0\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1||1\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) \end{aligned}$$

在基 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ 下，上式对应矩阵

$$\rho_+ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

而经典混合 (“以 $1/2$ 的概率是 $|0\rangle$ ，以 $1/2$ 的概率是 $|1\rangle$ ”) 对应

$$\rho_{\text{mix}} = \frac{1}{2}(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

它没有非对角元，因此没有相干。两者在 Z 基测量上概率相同，但在 X 基上表现不同。混态分解一般不唯一。混态常由与环境耦合、或对环境做偏迹产生，即“丢失”部分自由度导致相干衰减 (退相干)。

【了解】单比特密度矩阵与 Bloch 向量 任意单比特密度矩阵可写为

$$\rho = \frac{1}{2}(I + \vec{r} \cdot \vec{\sigma}), \quad |\vec{r}| \leq 1$$

其中 $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ 。纯态对应 $|\vec{r}| = 1$ ，完全混态对应 $\vec{r} = 0$ 。纯度与 Bloch 向量长度满足

$$\text{tr}(\rho^2) = \frac{1 + |\vec{r}|^2}{2}$$

Bloch 向量可由

$$r_i = \text{tr}(\rho \sigma_i)$$

直接求得。

【了解】Bloch 球中的混态 单比特纯态位于 Bloch 球面，混态对应球内点；密度矩阵可写为

$$\rho = \sum_n p_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|$$

其中 p_n 为系统处于纯态 $|\psi_n\rangle$ 的概率。若仅混合两个纯态 $|\psi_A\rangle, |\psi_B\rangle$ ，其 Bloch 向量位于两点连线段上，体现混态是纯态的凸组合。

期望值与演化

$$\langle A \rangle = \text{tr}(\rho A), \quad \rho' = U \rho U^\dagger$$

若 $U = \exp(-\frac{i}{\hbar} H t)$, 则满足冯诺依曼方程

$$i\hbar \frac{d\rho}{dt} = [H, \rho]$$

测量概率 (补充) 在正交基 $\{|e_i\rangle\}$ 上投影测量时, 结果 i 的概率为

$$p_i = \langle e_i | \rho | e_i \rangle$$

即密度矩阵在该基下的对角元。

复合系统的密度算子 (前置) 若系统由 A, B 两部分组成, 其状态空间为 $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ 。

- **纯态:** 若联合态为 $|\psi\rangle_{AB}$, 则

$$\rho_{AB} = |\psi\rangle_{AB}\langle\psi|$$

- **混合态:** 若以概率 p_k 处于 $|\psi_k\rangle_{AB}$, 则

$$\rho_{AB} = \sum_k p_k |\psi_k\rangle_{AB}\langle\psi_k|$$

它是作用在 $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ 上的算符; 只有当需要写成矩阵时, 才会选基 $\{|a_i\rangle\}$ 与 $\{|b_j\rangle\}$, 并用张量积基 $\{|a_i\rangle \otimes |b_j\rangle\}$ 表示。

具体例子:

- **纯态 (可分态):** 取 $|\psi\rangle_{AB} = |0\rangle \otimes |+\rangle$,

$$\rho_{AB} = |\psi\rangle\langle\psi| = (|0\rangle\langle 0|) \otimes (|+\rangle\langle +|)$$

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

$$\rho_{AB} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

- **混合态 (经典混合):** 取 “以 $1/2$ 是 $|00\rangle$, 以 $1/2$ 是 $|11\rangle$ ”,

$$\rho_{AB} = \frac{1}{2}|00\rangle\langle 00| + \frac{1}{2}|11\rangle\langle 11| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

约化密度算子 (偏迹) 当我们只关心子系统 A 、而忽略 B 时, 用偏迹把 B 的信息“求和掉”。直观上, 它就像经典概率里的“把联合分布对 B 求和得到边缘分布”。

最常用的计算公式 (记住这个就够用): 若

$$|\psi\rangle = a|00\rangle + b|01\rangle + c|10\rangle + d|11\rangle$$

则

$$\rho_A = \text{tr}_B(|\psi\rangle\langle\psi|) = \begin{pmatrix} |a|^2 + |b|^2 & ac^* + bd^* \\ a^*c + b^*d & |c|^2 + |d|^2 \end{pmatrix}$$

其中“把 B 的同一指标配对后相加”就是偏迹的本质。

立即算一个数值例子：取

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle)$$

则 $a = b = c = d = \frac{1}{2}$, 代入得

$$\rho_A = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} + \frac{1}{4} & \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} + \frac{1}{4} & \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

这就是 $|+\rangle\langle+|$, 说明只看 A 时它处于 $|+\rangle$ 态。

三步法（操作版）：

1. 写出 ρ_{AB} 在基 $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ 下的矩阵；

2. 把它分成 2×2 子块： $\rho_{AB} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}$ ；

3. 对每个子块取迹，得到 $\rho_A = \begin{pmatrix} \text{tr}(A) & \text{tr}(B) \\ \text{tr}(C) & \text{tr}(D) \end{pmatrix}$ 。

（形式化定义，供需要时查看）： 符号说明：

- $\text{tr}_A(\cdot)$: 只对系统 A 做迹（把 A 的指标求和），也叫对 A 的偏迹。
- $\text{tr}_{AB}(\cdot)$: 对整个系统 AB 做迹（全迹）。
- ρ_AX : 矩阵乘法，表示先有 A 的状态 ρ_A ，再取可观测量 X 的期望值。

对任意 A 上可观测量 X ,

$$\text{tr}_A(\rho_AX) = \text{tr}_{AB}(\rho_{AB}X \otimes I_B), \quad \rho_A = \text{tr}_B(\rho_{AB})$$

这一定义保证 ρ_A 保存了所有关于 A 的测量统计。

详细推理（从定义到计算公式）：

1. 说明符号： A, B 是两个子系统，各自的状态空间是 $\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_B$ 。为了描述它们的联合系统 $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ ，需要分别选取两组正交归一基 $\{|a_i\rangle\}$ （属于 A ）和 $\{|b_j\rangle\}$ （属于 B ）。于是复合系统的基是 $\{|a_i\rangle \otimes |b_j\rangle\}$ 。

2. 任何算符（包括密度算子）都能在“基矢外积”上展开，因此

$$\rho_{AB} = \sum_{i,k} \sum_{j,l} \rho_{ij,kl} |a_i\rangle\langle a_k| \otimes |b_j\rangle\langle b_l|$$

其中 $\rho_{ij,kl}$ 就是 ρ_{AB} 在复合基上的矩阵元：

$$\rho_{ij,kl} = \langle a_i b_j | \rho_{AB} | a_k b_l \rangle$$

这就是“为什么会出现四个指标”的原因： i, k 属于 A , j, l 属于 B 。

3. 先算一个基元的偏迹：

$$\text{tr}_B(|a_i\rangle\langle a_k| \otimes |b_j\rangle\langle b_l|) = \sum_m (I \otimes \langle b_m |) (|a_i\rangle\langle a_k| \otimes |b_j\rangle\langle b_l|) (I \otimes |b_m \rangle)$$

由于 $\langle b_m | b_j \rangle = \delta_{mj}$ 、 $\langle b_l | b_m \rangle = \delta_{lm}$, 上式等于

$$\sum_m \delta_{mj} \delta_{lm} |a_i\rangle\langle a_k| = \delta_{jl} |a_i\rangle\langle a_k|$$

4. 利用线性性，把上一条推广到一般 ρ_{AB} :

$$\rho_A = \sum_{i,k} \left(\sum_j \rho_{ij,kj} \right) |a_i\rangle\langle a_k|$$

即矩阵元公式

$$(\rho_A)_{ik} = \sum_j \rho_{ij,kj}$$

这就是“对 B 的指标求和”的来源。

5. 若 ρ_{AB} 来自纯态 $|\psi\rangle = \sum_{i,j} c_{ij} |a_i b_j\rangle$, 则

$$\rho_{ij,kl} = c_{ij} c_{kl}^* \Rightarrow (\rho_A)_{ik} = \sum_j c_{ij} c_{kj}^*$$

对二比特写成 a, b, c, d 就得到前面的 2×2 公式。

数值例子 (纯态): 取

$$|\psi\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} \Rightarrow c_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}, c_{11} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \text{ 其余0}$$

由公式 $(\rho_A)_{ik} = \sum_j c_{ij} c_{kj}^*$ 得

$$(\rho_A)_{00} = |c_{00}|^2 + |c_{01}|^2 = \frac{1}{2}, \quad (\rho_A)_{11} = |c_{10}|^2 + |c_{11}|^2 = \frac{1}{2}$$

且

$$(\rho_A)_{01} = c_{00} c_{10}^* + c_{01} c_{11}^* = 0, \quad (\rho_A)_{10} = 0$$

因此

$$\rho_A = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} I$$

数值例子 (混合态): 取

$$\rho_{AB} = \frac{1}{2} |00\rangle\langle 00| + \frac{1}{2} |11\rangle\langle 11|$$

用矩阵元公式 $(\rho_A)_{ik} = \sum_j \rho_{ij,kj}$, 有

$$(\rho_A)_{00} = \rho_{00,00} + \rho_{01,01} = \frac{1}{2} + 0 = \frac{1}{2}, \quad (\rho_A)_{11} = \rho_{10,10} + \rho_{11,11} = 0 + \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$$

且

$$(\rho_A)_{01} = \rho_{00,10} + \rho_{01,11} = 0, \quad (\rho_A)_{10} = 0$$

因此同样得到

$$\rho_A = \frac{1}{2} I$$

说明偏迹的计算只依赖于 ρ_{AB} , 与其“纯/混”来源无关。

局域可观测量 (补充) 对子系统 A 的可观测量 A , 其期望值可用约化密度算子计算:

$$\langle A \rangle = \text{tr}_{AB}(\rho_{AB} A \otimes I) = \text{tr}_A(\rho_A A)$$

说明偏迹保留了子系统的全部可观测统计信息。

张量积的迹公式 (补充) 对可分态 $\rho_{AB} = \rho_A \otimes \rho_B$, 有

$$\text{tr}(\rho_{ABA} \otimes B) = \text{tr}(\rho_A A) \text{tr}(\rho_B B)$$

例题

Bell 态的约化密度矩阵

设 $|\Phi^+\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}$,

$$\rho_{AB} = |\Phi^+\rangle\langle\Phi^+| = \frac{1}{2}\left(|00\rangle\langle 00| + |00\rangle\langle 11| + |11\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 11|\right)$$

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

$$\rho_{AB} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

方法一 (矩阵元求和公式): 对任意两比特 ρ_{AB} , 有

$$(\rho_A)_{ik} = \sum_j \rho_{ij,kj}, \quad (\rho_B)_{jl} = \sum_i \rho_{ij,il}$$

这里 $\rho_{ij,kl}$ 表示 ρ_{AB} 在计算基下的矩阵元:

$$\rho_{ij,kl} = \langle ij | \rho_{AB} | kl \rangle$$

例如 $\rho_{00,00} = \langle 00 | \rho_{AB} | 00 \rangle$ 。本例所有矩阵元具体为

$$\begin{aligned} \rho_{00,00} &= \frac{1}{2}, & \rho_{00,01} &= 0, & \rho_{00,10} &= 0, & \rho_{00,11} &= \frac{1}{2}, \\ \rho_{01,00} &= 0, & \rho_{01,01} &= 0, & \rho_{01,10} &= 0, & \rho_{01,11} &= 0, \\ \rho_{10,00} &= 0, & \rho_{10,01} &= 0, & \rho_{10,10} &= 0, & \rho_{10,11} &= 0, \\ \rho_{11,00} &= \frac{1}{2}, & \rho_{11,01} &= 0, & \rho_{11,10} &= 0, & \rho_{11,11} &= \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

把上面的矩阵元代入可得

$$(\rho_A)_{00} = \rho_{00,00} + \rho_{01,01} = \frac{1}{2} + 0 = \frac{1}{2}, \quad (\rho_A)_{11} = \rho_{10,10} + \rho_{11,11} = 0 + \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$$

且 $(\rho_A)_{01} = \rho_{00,10} + \rho_{01,11} = 0$, 所以

$$\rho_A = \frac{1}{2}I$$

同理

$$(\rho_B)_{00} = \rho_{00,00} + \rho_{10,10} = \frac{1}{2} + 0 = \frac{1}{2}, \quad (\rho_B)_{11} = \rho_{01,01} + \rho_{11,11} = 0 + \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$$

且 $(\rho_B)_{01} = \rho_{00,01} + \rho_{10,11} = 0$, 因此

$$\rho_B = \frac{1}{2}I$$

方法二 (按定义逐项偏迹): 对 B 做偏迹:

$$\rho_A = \text{tr}_B(\rho_{AB}) = \sum_{j=0}^1 (I \otimes \langle j |) \rho_{AB} (I \otimes |j \rangle)$$

将 $\rho_{AB} = \frac{1}{2}(|00\rangle\langle 00| + |00\rangle\langle 11| + |11\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 11|)$ 代入,

$$\begin{aligned}(I \otimes \langle 0|) \rho_{AB} (I \otimes |0\rangle) &= \frac{1}{2} \left[(I \otimes \langle 0|) |00\rangle\langle 00| (I \otimes |0\rangle) \right. \\ &\quad + (I \otimes \langle 0|) |00\rangle\langle 11| (I \otimes |0\rangle) \\ &\quad + (I \otimes \langle 0|) |11\rangle\langle 00| (I \otimes |0\rangle) \\ &\quad \left. + (I \otimes \langle 0|) |11\rangle\langle 11| (I \otimes |0\rangle) \right]\end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}(I \otimes \langle 0|) |00\rangle\langle 00| (I \otimes |0\rangle) &= |0\rangle\langle 0| \langle 0|0\rangle\langle 0|0\rangle = |0\rangle\langle 0|, \\ (I \otimes \langle 0|) |00\rangle\langle 11| (I \otimes |0\rangle) &= |0\rangle\langle 1| \langle 0|0\rangle\langle 1|0\rangle = 0, \\ (I \otimes \langle 0|) |11\rangle\langle 00| (I \otimes |0\rangle) &= |1\rangle\langle 0| \langle 0|1\rangle\langle 0|0\rangle = 0, \\ (I \otimes \langle 0|) |11\rangle\langle 11| (I \otimes |0\rangle) &= |1\rangle\langle 1| \langle 0|1\rangle\langle 1|0\rangle = 0,\end{aligned}$$

因此

$$(I \otimes \langle 0|) \rho_{AB} (I \otimes |0\rangle) = \frac{1}{2} |0\rangle\langle 0|.$$

同理

$$\begin{aligned}(I \otimes \langle 1|) \rho_{AB} (I \otimes |1\rangle) &= \frac{1}{2} \left[(I \otimes \langle 1|) |00\rangle\langle 00| (I \otimes |1\rangle) \right. \\ &\quad + (I \otimes \langle 1|) |00\rangle\langle 11| (I \otimes |1\rangle) \\ &\quad + (I \otimes \langle 1|) |11\rangle\langle 00| (I \otimes |1\rangle) \\ &\quad \left. + (I \otimes \langle 1|) |11\rangle\langle 11| (I \otimes |1\rangle) \right]\end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}(I \otimes \langle 1|) |00\rangle\langle 00| (I \otimes |1\rangle) &= |0\rangle\langle 0| \langle 1|0\rangle\langle 0|1\rangle = 0, \\ (I \otimes \langle 1|) |00\rangle\langle 11| (I \otimes |1\rangle) &= |0\rangle\langle 1| \langle 1|0\rangle\langle 1|1\rangle = 0, \\ (I \otimes \langle 1|) |11\rangle\langle 00| (I \otimes |1\rangle) &= |1\rangle\langle 0| \langle 1|1\rangle\langle 0|1\rangle = 0, \\ (I \otimes \langle 1|) |11\rangle\langle 11| (I \otimes |1\rangle) &= |1\rangle\langle 1| \langle 1|1\rangle\langle 1|1\rangle = |1\rangle\langle 1|,\end{aligned}$$

因此

$$(I \otimes \langle 1|) \rho_{AB} (I \otimes |1\rangle) = \frac{1}{2} |1\rangle\langle 1|.$$

相加得 $\rho_A = \frac{1}{2}I$ 。

对 A 做偏迹:

$$\rho_B = \text{tr}_A(\rho_{AB}) = \sum_{i=0}^1 (\langle i| \otimes I) \rho_{AB} (|i\rangle \otimes I)$$

逐项计算:

$$\begin{aligned}(\langle 0| \otimes I) \rho_{AB} (|0\rangle \otimes I) &= \frac{1}{2} \left[(\langle 0| \otimes I) |00\rangle\langle 00| (|0\rangle \otimes I) \right. \\ &\quad + (\langle 0| \otimes I) |00\rangle\langle 11| (|0\rangle \otimes I) \\ &\quad + (\langle 0| \otimes I) |11\rangle\langle 00| (|0\rangle \otimes I) \\ &\quad \left. + (\langle 0| \otimes I) |11\rangle\langle 11| (|0\rangle \otimes I) \right]\end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned} (\langle 0| \otimes I)|00\rangle\langle 00|(|0\rangle \otimes I) &= \langle 0|0\rangle\langle 0|0\rangle|0\rangle\langle 0| = |0\rangle\langle 0|, \\ (\langle 0| \otimes I)|00\rangle\langle 11|(|0\rangle \otimes I) &= \langle 0|0\rangle\langle 1|0\rangle|0\rangle\langle 1| = 0, \\ (\langle 0| \otimes I)|11\rangle\langle 00|(|0\rangle \otimes I) &= \langle 0|1\rangle\langle 0|0\rangle|1\rangle\langle 0| = 0, \\ (\langle 0| \otimes I)|11\rangle\langle 11|(|0\rangle \otimes I) &= \langle 0|1\rangle\langle 1|0\rangle|1\rangle\langle 1| = 0, \end{aligned}$$

因此

$$(\langle 0| \otimes I)\rho_{AB}(|0\rangle \otimes I) = \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0|.$$

同理

$$\begin{aligned} (\langle 1| \otimes I)\rho_{AB}(|1\rangle \otimes I) &= \frac{1}{2}\left[(\langle 1| \otimes I)|00\rangle\langle 00|(|1\rangle \otimes I) \right. \\ &\quad + (\langle 1| \otimes I)|00\rangle\langle 11|(|1\rangle \otimes I) \\ &\quad + (\langle 1| \otimes I)|11\rangle\langle 00|(|1\rangle \otimes I) \\ &\quad \left. + (\langle 1| \otimes I)|11\rangle\langle 11|(|1\rangle \otimes I) \right] \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned} (\langle 1| \otimes I)|00\rangle\langle 00|(|1\rangle \otimes I) &= \langle 1|0\rangle\langle 0|1\rangle|0\rangle\langle 0| = 0, \\ (\langle 1| \otimes I)|00\rangle\langle 11|(|1\rangle \otimes I) &= \langle 1|0\rangle\langle 1|1\rangle|0\rangle\langle 1| = 0, \\ (\langle 1| \otimes I)|11\rangle\langle 00|(|1\rangle \otimes I) &= \langle 1|1\rangle\langle 0|1\rangle|1\rangle\langle 0| = 0, \\ (\langle 1| \otimes I)|11\rangle\langle 11|(|1\rangle \otimes I) &= \langle 1|1\rangle\langle 1|1\rangle|1\rangle\langle 1| = |1\rangle\langle 1|, \end{aligned}$$

因此

$$(\langle 1| \otimes I)\rho_{AB}(|1\rangle \otimes I) = \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1|.$$

相加得

$$\rho_B = \frac{1}{2}(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) = \frac{1}{2}I$$

方法三（子矩阵取迹）：在基 $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ 下，把 ρ_{AB} 按 A 的索引分成子块：

$$\rho_{AB} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}, \quad A = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad C = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad D = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

对 B 做偏迹（对子块取迹）：

$$\rho_A = \begin{pmatrix} \text{tr}(A) & \text{tr}(B) \\ \text{tr}(C) & \text{tr}(D) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}I$$

若要用子块法求 ρ_B ，需把基按 B 分组为 $\{|00\rangle, |10\rangle\}$ 与 $\{|01\rangle, |11\rangle\}$ （即先固定 $B = 0$ 、再固定 $B = 1$ ）。在此顺序下，等价于把原矩阵的第 2、3 行与第 2、3 列同时对调（本例中第 2、3 行列全为零，因此数值形式不变）：

$$\rho_{AB}^{(B \text{分组})} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A' & B' \\ C' & D' \end{pmatrix}$$

其中

$$A' = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad B' = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad C' = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad D' = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

对子块取迹：

$$\rho_B = \begin{pmatrix} \text{tr}(A') & \text{tr}(B') \\ \text{tr}(C') & \text{tr}(D') \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}I$$

说明纠缠态的任一子系统都表现为混态（完全随机）。

例题

偏迹的直观例题（可分态）

取

$$|\psi\rangle = \frac{|00\rangle + |01\rangle}{\sqrt{2}} = |0\rangle \otimes |+\rangle$$

先写密度算子：

$$\rho_{AB} = |\psi\rangle\langle\psi| = \frac{1}{2}\left(|00\rangle\langle 00| + |00\rangle\langle 01| + |01\rangle\langle 00| + |01\rangle\langle 01|\right)$$

对 B 做偏迹，按公式

$$\rho_A = \sum_{j=0}^1 (I \otimes \langle j|) \rho_{AB} (I \otimes |j\rangle)$$

逐项计算（对每个 j 把 ρ_{AB} 的四项全部代入）：

$$\begin{aligned} (I \otimes \langle 0|) \rho_{AB} (I \otimes |0\rangle) &= \frac{1}{2} \left[(I \otimes \langle 0|) |00\rangle\langle 00| (I \otimes |0\rangle) \right. \\ &\quad + (I \otimes \langle 0|) |00\rangle\langle 01| (I \otimes |0\rangle) \\ &\quad + (I \otimes \langle 0|) |01\rangle\langle 00| (I \otimes |0\rangle) \\ &\quad \left. + (I \otimes \langle 0|) |01\rangle\langle 01| (I \otimes |0\rangle) \right] \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned} (I \otimes \langle 0|) |00\rangle\langle 00| (I \otimes |0\rangle) &= |0\rangle\langle 0| \langle 0|0\rangle\langle 0|0\rangle = |0\rangle\langle 0|, \\ (I \otimes \langle 0|) |00\rangle\langle 01| (I \otimes |0\rangle) &= |0\rangle\langle 0| \langle 0|0\rangle\langle 1|0\rangle = 0, \\ (I \otimes \langle 0|) |01\rangle\langle 00| (I \otimes |0\rangle) &= |0\rangle\langle 0| \langle 0|1\rangle\langle 0|0\rangle = 0, \\ (I \otimes \langle 0|) |01\rangle\langle 01| (I \otimes |0\rangle) &= |0\rangle\langle 0| \langle 0|1\rangle\langle 1|0\rangle = 0, \end{aligned}$$

因此

$$(I \otimes \langle 0|) \rho_{AB} (I \otimes |0\rangle) = \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0|.$$

再算 $j = 1$ ：

$$\begin{aligned} (I \otimes \langle 1|) \rho_{AB} (I \otimes |1\rangle) &= \frac{1}{2} \left[(I \otimes \langle 1|) |00\rangle\langle 00| (I \otimes |1\rangle) \right. \\ &\quad + (I \otimes \langle 1|) |00\rangle\langle 01| (I \otimes |1\rangle) \\ &\quad + (I \otimes \langle 1|) |01\rangle\langle 00| (I \otimes |1\rangle) \\ &\quad \left. + (I \otimes \langle 1|) |01\rangle\langle 01| (I \otimes |1\rangle) \right] \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned} (I \otimes \langle 1|) |00\rangle\langle 00| (I \otimes |1\rangle) &= |0\rangle\langle 0| \langle 1|0\rangle\langle 0|1\rangle = 0, \\ (I \otimes \langle 1|) |00\rangle\langle 01| (I \otimes |1\rangle) &= |0\rangle\langle 0| \langle 1|0\rangle\langle 1|1\rangle = 0, \\ (I \otimes \langle 1|) |01\rangle\langle 00| (I \otimes |1\rangle) &= |0\rangle\langle 0| \langle 1|1\rangle\langle 0|1\rangle = 0, \\ (I \otimes \langle 1|) |01\rangle\langle 01| (I \otimes |1\rangle) &= |0\rangle\langle 0| \langle 1|1\rangle\langle 1|1\rangle = |0\rangle\langle 0|, \end{aligned}$$

因此

$$(I \otimes \langle 1 |) \rho_{AB} (I \otimes |1 \rangle) = \frac{1}{2} |0\rangle\langle 0|.$$

相加得

$$\rho_A = \frac{1}{2} |0\rangle\langle 0| + \frac{1}{2} |0\rangle\langle 0| = |0\rangle\langle 0|$$

说明对可分态，偏迹后仍是纯态。

对 A 做偏迹可得

$$\rho_B = |+\rangle\langle +| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

即子系统 B 仍保留相干。

方法一 (矩阵元求和公式): 对任意两比特 ρ_{AB} , 有

$$(\rho_A)_{ik} = \sum_j \rho_{ij,kj}, \quad (\rho_B)_{jl} = \sum_i \rho_{ij,il}$$

本例 $\rho_{AB} = \frac{1}{2}(|00\rangle\langle 00| + |00\rangle\langle 01| + |01\rangle\langle 00| + |01\rangle\langle 01|)$, 因此

$$(\rho_A)_{00} = \rho_{00,00} + \rho_{01,01} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1, \quad (\rho_A)_{11} = \rho_{10,10} + \rho_{11,11} = 0$$

且 $(\rho_A)_{01} = \rho_{00,10} + \rho_{01,11} = 0$, 故 $\rho_A = |0\rangle\langle 0|$ 。按公式 $(\rho_B)_{jl} = \sum_i \rho_{ij,il}$, 逐项得

$$(\rho_B)_{00} = \rho_{00,00} + \rho_{10,10} = \frac{1}{2} + 0 = \frac{1}{2}, \quad (\rho_B)_{11} = \rho_{01,01} + \rho_{11,11} = \frac{1}{2} + 0 = \frac{1}{2}$$

且 $(\rho_B)_{01} = \rho_{00,01} + \rho_{10,11} = \frac{1}{2} + 0 = \frac{1}{2}$, 因此

$$\rho_B = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

方法二 (按定义逐项偏迹): 对 B 的偏迹已在上面逐项算出得到 $\rho_A = |0\rangle\langle 0|$; 对 A 的偏迹:

$$\rho_B = \sum_{i=0}^1 (\langle i | \otimes I) \rho_{AB} (|i\rangle \otimes I)$$

对 $i = 0$:

$$\begin{aligned} (\langle 0 | \otimes I) \rho_{AB} (|0\rangle \otimes I) &= \frac{1}{2} \left[(\langle 0 | \otimes I) |00\rangle\langle 00| (|0\rangle \otimes I) \right. \\ &\quad + (\langle 0 | \otimes I) |00\rangle\langle 01| (|0\rangle \otimes I) \\ &\quad + (\langle 0 | \otimes I) |01\rangle\langle 00| (|0\rangle \otimes I) \\ &\quad \left. + (\langle 0 | \otimes I) |01\rangle\langle 01| (|0\rangle \otimes I) \right] \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned} (\langle 0 | \otimes I) |00\rangle\langle 00| (|0\rangle \otimes I) &= \langle 0 | 0 \rangle \langle 0 | 0 \rangle |0\rangle\langle 0| = |0\rangle\langle 0|, \\ (\langle 0 | \otimes I) |00\rangle\langle 01| (|0\rangle \otimes I) &= \langle 0 | 0 \rangle \langle 0 | 0 \rangle |0\rangle\langle 1| = |0\rangle\langle 1|, \\ (\langle 0 | \otimes I) |01\rangle\langle 00| (|0\rangle \otimes I) &= \langle 0 | 0 \rangle \langle 0 | 0 \rangle |1\rangle\langle 0| = |1\rangle\langle 0|, \\ (\langle 0 | \otimes I) |01\rangle\langle 01| (|0\rangle \otimes I) &= \langle 0 | 0 \rangle \langle 0 | 0 \rangle |1\rangle\langle 1| = |1\rangle\langle 1|, \end{aligned}$$

所以

$$(\langle 0 | \otimes I) \rho_{AB} (|0\rangle \otimes I) = \frac{1}{2} (|0\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) = |+\rangle\langle +|.$$

对 $i = 1$:

$$\begin{aligned} (\langle 1| \otimes I) \rho_{AB} (|1\rangle \otimes I) &= \frac{1}{2} \left[(\langle 1| \otimes I) |00\rangle \langle 00| (|1\rangle \otimes I) \right. \\ &\quad + (\langle 1| \otimes I) |00\rangle \langle 01| (|1\rangle \otimes I) \\ &\quad + (\langle 1| \otimes I) |01\rangle \langle 00| (|1\rangle \otimes I) \\ &\quad \left. + (\langle 1| \otimes I) |01\rangle \langle 01| (|1\rangle \otimes I) \right] \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned} (\langle 1| \otimes I) |00\rangle \langle 00| (|1\rangle \otimes I) &= \langle 1|0\rangle \langle 0|1\rangle |0\rangle \langle 0| = 0, \\ (\langle 1| \otimes I) |00\rangle \langle 01| (|1\rangle \otimes I) &= \langle 1|0\rangle \langle 0|1\rangle |0\rangle \langle 1| = 0, \\ (\langle 1| \otimes I) |01\rangle \langle 00| (|1\rangle \otimes I) &= \langle 1|0\rangle \langle 0|1\rangle |1\rangle \langle 0| = 0, \\ (\langle 1| \otimes I) |01\rangle \langle 01| (|1\rangle \otimes I) &= \langle 1|0\rangle \langle 0|1\rangle |1\rangle \langle 1| = 0, \end{aligned}$$

因此

$$(\langle 1| \otimes I) \rho_{AB} (|1\rangle \otimes I) = 0, \quad \rho_B = |+\rangle \langle +|.$$

方法三 (子矩阵取迹): 在基 $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ 下,

$$\rho_{AB} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}$$

其中

$$A = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad B = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad C = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad D = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

对子块取迹得

$$\rho_A = \begin{pmatrix} \text{tr}(A) & \text{tr}(B) \\ \text{tr}(C) & \text{tr}(D) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = |0\rangle \langle 0|$$

按 B 分组 (重排基 $\{|00\rangle, |10\rangle, |01\rangle, |11\rangle\}$), 即把原基序 $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ 中的第二、三项对调, 所以矩阵需同时交换第 2、3 行与第 2、3 列, 得到

$$\rho_{AB} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_B & B_B \\ C_B & D_B \end{pmatrix}$$

其中

$$A_B = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad B_B = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad C_B = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad D_B = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

对子块取迹:

$$\rho_B = \begin{pmatrix} \text{tr}(A_B) & \text{tr}(B_B) \\ \text{tr}(C_B) & \text{tr}(D_B) \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = |+\rangle \langle +|$$

【了解】纠缠判据（纯态）（补充） 对纯态 $|\psi\rangle_{AB}$, 若其约化态满足

$$\text{tr}(\rho_A^2) = 1$$

则 $|\psi\rangle_{AB}$ 为可分态; 若 $\text{tr}(\rho_A^2) < 1$, 则为纠缠态。

【了解】Schmidt 分解（补充） 任意纯态 $|\psi\rangle_{AB}$ 都可写成

$$|\psi\rangle_{AB} = \sum_k \sqrt{\lambda_k} |u_k\rangle_A \otimes |v_k\rangle_B, \quad \lambda_k \geq 0, \quad \sum_k \lambda_k = 1$$

若且仅若只有一个非零 λ_k , 则态为可分态; 否则为纠缠态。

【了解】Schmidt 数（补充） 非零 Schmidt 系数的个数称为 Schmidt 数。Schmidt 数为 1 当且仅当态可分。

【了解】纠缠熵（补充） 纯态的纠缠可用冯诺依曼熵刻画:

$$S(\rho_A) = -\text{tr}(\rho_A \log \rho_A)$$

对纯态 $|\psi\rangle_{AB}$, 有 $S(\rho_A) = S(\rho_B)$, 且 $S = 0$ 当且仅当可分。

【了解】熵的最大值（补充） 对 d 维系统, $S(\rho) \leq \log d$, 最大值在 $\rho = I/d$ (完全混态) 时取得。

17 【了解】测不准关系（补充）

一般形式 对任意厄米算符 A, B ,

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|$$

其中 $\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$ 。

不确定度的含义（补充） ΔA 是测量结果分布的标准差 (statistical spread), 并非仪器精度的主观限制。Kennard (1927) 给出了位置-动量的精确不等式形式。若系统处于 A 的本征态, 则 $\Delta A = 0$; 但对与 A 不对易的算符 B , 仍受不确定性下界约束。

位置-动量

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

该结论可由 Cauchy-Schwarz 不等式推出, 是量子统计规律的直接体现。

时间-能量 时间与能量也满足类似的不等式 (形式上)

$$\Delta t \Delta E \gtrsim \frac{\hbar}{2}$$

常用于估计能级寿命与谱线宽度的关系。不确定性反映的是量子本征统计规律, 而非测量技术不足。对应到频率亦可写为 $\Delta t \Delta \omega \gtrsim \frac{1}{2}$ (形式上)。

18 【了解】量子纠缠、EPR佯谬与贝尔不等式

18.1 【了解】纠缠态的定义

可分态 vs 纠缠态 若两比特态可写成 $|\psi\rangle = |a\rangle \otimes |b\rangle$, 则为可分态; 否则称为**纠缠态**。例如

$$|\Psi^+\rangle = \frac{|01\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}}$$

无法写成单比特态的张量积, 因此是纠缠态。

例题

可分态示例

$$\frac{|00\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}} = \left(\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \right) \otimes |0\rangle$$

该态可以分解为张量积, 因此不是纠缠态。

纠缠的核心特征

- **强关联:** 测量一个子系统会瞬时确定另一个子系统的结果分布。
- **非定域关联:** 相关性与距离无关, 但**不能**用于超光速通信。
- **应用广泛:** 量子隐形传态、量子密钥分发、量子计算与量子精密测量的关键资源。
- **易受退相干:** 高质量纠缠的制备与保持在实验上具有挑战。

四个 Bell 态

$$|\Phi^\pm\rangle = \frac{|00\rangle \pm |11\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |\Psi^\pm\rangle = \frac{|01\rangle \pm |10\rangle}{\sqrt{2}}$$

Bell 态是两比特最大纠缠态, 可由 H 门 + CNOT 电路制备。四个 Bell 态构成两比特的正交归一基:

$$\sum_{\mu \in \{\Phi^\pm, \Psi^\pm\}} |\mu\rangle \langle \mu| = I$$

单态与三重态 (补充) 在量子力学中, 两个自旋-1/2 粒子组合的态可以按**总自旋**分类:

- **单态 (Singlet):** 总自旋 $S = 0$, 只有一个态

$$|\Psi^-\rangle = \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}}$$

特点: 反对称态, 沿任意方向测量总是得到相反结果

- **三重态 (Triplet):** 总自旋 $S = 1$, 有三个态

$$|\Psi^+\rangle = \frac{|01\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |\Phi^+\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |\Phi^-\rangle = \frac{|00\rangle - |11\rangle}{\sqrt{2}}$$

特点: 对称态 (注意: $|\Phi^-\rangle$ 虽然有负号, 但在空间交换下是对称的)

贝尔态的分类总结:

贝尔态	表达式	总自旋	对称性
$ \Psi^-\rangle$	$\frac{ 01\rangle - 10\rangle}{\sqrt{2}}$	$S = 0$	反对称 (单态)
$ \Psi^+\rangle$	$\frac{ 01\rangle + 10\rangle}{\sqrt{2}}$	$S = 1$	对称 (三重态)
$ \Phi^+\rangle$	$\frac{ 00\rangle + 11\rangle}{\sqrt{2}}$	$S = 1$	对称 (三重态)
$ \Phi^-\rangle$	$\frac{ 00\rangle - 11\rangle}{\sqrt{2}}$	$S = 1$	对称 (三重态)

物理意义：

1. **总自旋为 0** (单态)：两个自旋的角动量完全抵消，系统没有净角动量
2. **总自旋为 1** (三重态)：两个自旋的角动量叠加，系统有净角动量
3. 单态与三重态在空间交换下有不同对称性：单态反对称，三重态对称
4. 在原子物理、分子物理中，单态和三重态有不同的能量和性质

如何记忆？

- **单态**: $|\Psi^-\rangle$ ——唯一一个反对称的贝尔态，交换两个粒子会改变符号
- **三重态**: 其余三个 $|\Psi^+\rangle, |\Phi^+\rangle, |\Phi^-\rangle$ ——都是对称的
- 判断标准: 交换 $1 \leftrightarrow 2$, 若变号则是单态, 否则是三重态

验证交换对称性：

$$\begin{aligned} |\Psi^-\rangle &= \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}} \xrightarrow{1 \leftrightarrow 2} \frac{|10\rangle - |01\rangle}{\sqrt{2}} = -|\Psi^-\rangle \quad (\text{反对称}) \\ |\Psi^+\rangle &= \frac{|01\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}} \xrightarrow{1 \leftrightarrow 2} \frac{|10\rangle + |01\rangle}{\sqrt{2}} = +|\Psi^+\rangle \quad (\text{对称}) \\ |\Phi^+\rangle &= \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} \xrightarrow{1 \leftrightarrow 2} \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} = +|\Phi^+\rangle \quad (\text{对称}) \\ |\Phi^-\rangle &= \frac{|00\rangle - |11\rangle}{\sqrt{2}} \xrightarrow{1 \leftrightarrow 2} \frac{|00\rangle - |11\rangle}{\sqrt{2}} = +|\Phi^-\rangle \quad (\text{对称}) \end{aligned}$$

为什么单态的相位是负号？单态的反对称性要求在交换两个粒子时波函数改变符号：

$$|\Psi^-\rangle_{12} = \frac{|0\rangle_1|1\rangle_2 - |1\rangle_1|0\rangle_2}{\sqrt{2}} \xrightarrow{\text{交换 } 1 \leftrightarrow 2} \frac{|0\rangle_2|1\rangle_1 - |1\rangle_2|0\rangle_1}{\sqrt{2}} = -|\Psi^-\rangle_{12}$$

这个负号（相位 $\phi = \pi$ ）是由量子力学的反对称性要求决定的。

完美关联示例（补充） 对 $|\Psi^-\rangle$, 若两方沿同一方向测量自旋, 总是得到相反结果（完美反相关）。

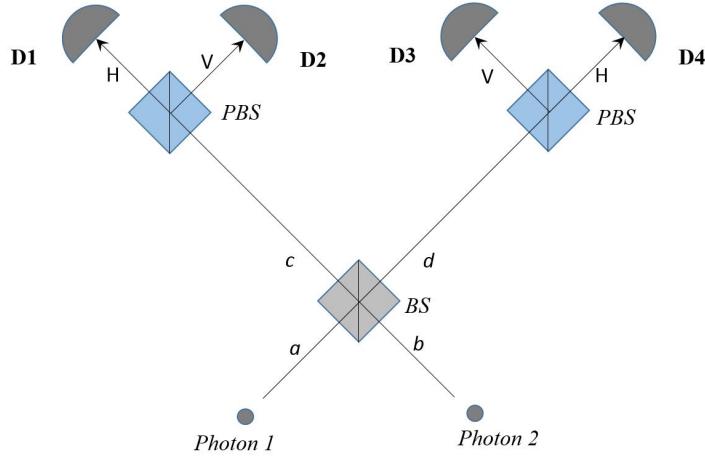


Figure 6: Bell 态测量的光学干涉装置示意（分束器 + 偏振分束器 + 探测器）。

不同基下的表示 例如

$$|\Phi^+\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|++\rangle + |--\rangle}{\sqrt{2}}$$

说明纠缠态在不同测量基下仍保持强关联。

18.2 【了解】EPR佯谬

1935年EPR提出“定域实在论”挑战：

1. **实在性**: 若可在不扰动系统的前提下精确预测某物理量，则该物理量具有客观实在。
2. **定域性**: 不存在超光速影响。
3. **推论**: 纠缠测量可瞬时决定远处粒子状态，说明远处粒子早已具有确定值（隐变量），量子力学不完备。

18.3 【了解】贝尔不等式 (CHSH 形式)

设 $E(a, b)$ 表示在测量基 a, b 下的相关函数（例如 $E = P_{\text{同}} - P_{\text{异}}$ ），则经典定域隐变量理论满足

$$-2 \leq E(a, b) - E(a, b') + E(a', b) - E(a', b') \leq 2$$

量子力学在合适纠缠态与测量设置下可违反该不等式。实验结果支持量子预言，否定定域隐变量模型。20世纪80年代以来（如 Aspect 等实验）对贝尔不等式的违反被反复验证。

量子预测示例（补充） 对 singlet 态 $|\Psi^-\rangle$ ，量子力学给出

$$E(a, b) = -\cos \theta_{ab}$$

在合适测量角度下可达到 $2\sqrt{2}$ 的最大违背。

CHSH 算符定义（补充） 取 A, A' 为 Alice 的两种测量（本征值 ± 1 ）， B, B' 为 Bob 的两种测量，则

$$\hat{B} = A \otimes (B + B') + A' \otimes (B - B')$$

算符形式 定义 Bell 算符 \hat{B} ，则

$$-2 \leq \langle \hat{B} \rangle \leq 2$$

是经典定域隐变量的上界；量子力学可给出更大的 $\langle \hat{B} \rangle$ 。

Tsirelson 上界（补充） 量子力学对 CHSH 算符的上界为

$$\langle \hat{B} \rangle \leq 2\sqrt{2}$$

表明量子相关性强于经典，但仍受量子力学限制。

19 【了解】量子超密编码 (Superdense Coding)

核心思想 利用纠缠作为共享资源，实现“发送 1 个量子比特传递 2 个经典比特”。**提出者**: Bennett 与 Wiesner (1992)。**对比**: 经典信道中发送 1 个物理比特只能传递 1 个经典比特。又称**量子密集编码**。

协议步骤

1. 共享 $|\Phi^+\rangle$: Alice 和 Bob 各持一半纠缠对。
2. Alice 编码两比特信息，对自己量子比特施加幺正操作。
3. Alice 发送该量子比特给 Bob (只发送 1 个 qubit)。
4. Bob 对两比特做 Bell 基测量 (Bell State Measurement, BSM)，得到 2 个经典比特。

Bell 基测量实现（补充） 对两比特先施加 CNOT（第 1 控制第 2），再对第 1 比特施加 H ，随后在计算基测量即可完成 BSM（理想情况下）。

【了解】编码映射（以 $|\Phi^+\rangle$ 为初态）

经典比特	Alice 操作	
00	I	
01	X	⇒ 得到四个 Bell 态之一
10	Z	
11	$iY = ZX$	

对应关系为：

$$00 \rightarrow |\Phi^+\rangle, \quad 01 \rightarrow |\Psi^+\rangle, \quad 10 \rightarrow |\Phi^-\rangle, \quad 11 \rightarrow |\Psi^-\rangle$$

要点 纠缠是核心资源；单独截获一个粒子无法读取信息；测量会破坏纠缠，具有安全性潜力。

20 【了解】量子线路与量子逻辑门

20.1 【了解】线路模型

量子算法以线路表示：量子比特为线路，酉门为方块，测量为读出。线路保持可逆性。门的分类：按作用比特数分为单比特门、双比特门、三比特门等。量子门通常通过其对计算基的作用来定义，再由线性扩展到任意叠加态。

20.2 【背】常用单比特门

$$\begin{aligned} X &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, & Z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, & H &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \\ Y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, & S &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}, & R_\phi &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\phi} \end{pmatrix} \\ T &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

【了解】常用关系（补充） $H^\dagger = H = H^{-1}$, $X^2 = Y^2 = Z^2 = I$, $S^2 = Z$, $T^2 = S$, 且 $HZH = X$ 、 $HXH = Z$ 。

【了解】相位门的物理含义（补充） R_ϕ 仅改变 $|1\rangle$ 的相对相位： $|0\rangle \mapsto |0\rangle$, $|1\rangle \mapsto e^{i\phi}|1\rangle$ 。全局相位对测量概率无影响，但相对相位会影响干涉结果。

【了解】S/T 门与旋转门关系（补充） $S = R_z(\pi/2)$, $T = R_z(\pi/4)$ (均忽略全局相位)。

【了解】旋转门（补充） 绕 Bloch 球坐标轴的旋转门定义为

$$R_x(\theta) = e^{-i\theta X/2}, \quad R_y(\theta) = e^{-i\theta Y/2}, \quad R_z(\theta) = e^{-i\theta Z/2}$$

它们在单比特空间中对应空间旋转，是构造任意单比特门的基础。当 $\theta = \pi$ 时， $R_x(\pi) \sim X$ 、 $R_y(\pi) \sim Y$ 、 $R_z(\pi) \sim Z$ (忽略全局相位)。

【了解】旋转门的矩阵形式（补充）

$$R_z(\theta) = \begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2} \end{pmatrix}, \quad R_x(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -i \sin \frac{\theta}{2} \\ -i \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

20.3 【背】受控运算

控制比特为 $|1\rangle$ 时对目标比特施加门 U :

$$|c\rangle|t\rangle \mapsto |c\rangle U^c |t\rangle$$

等价写成算符形式:

$$U_c = |0\rangle\langle 0| \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes U$$

在矩阵上表现为块对角结构。

- CNOT: 控制为 1 时翻转目标比特。
- Toffoli (CCNOT): 两个控制比特同时为 1 时翻转目标比特。
- Fredkin (CSWAP): 控制为 1 时交换两个目标比特。

Toffoli/Fredkin 门可实现可逆经典逻辑，是量子线路构建的基础组件。当控制比特为 $|0\rangle$ 时，受控门对目标比特不产生作用。Toffoli 门配合单比特门可构成通用量子计算门集。

【了解】Toffoli 与 Fredkin 的逻辑形式（补充） Toffoli (CCNOT):

$$|a, b, c\rangle \mapsto |a, b, c \oplus (ab)\rangle$$

Fredkin (CSWAP):

$$|c, a, b\rangle \mapsto |c, a, b\rangle \ (c=0), \quad |c, a, b\rangle \mapsto |c, b, a\rangle \ (c=1)$$

【了解】Toffoli 真值表（补充）

$$|000\rangle \rightarrow |000\rangle, |001\rangle \rightarrow |001\rangle, |010\rangle \rightarrow |010\rangle, |011\rangle \rightarrow |011\rangle,$$

$$|100\rangle \rightarrow |100\rangle, |101\rangle \rightarrow |101\rangle, |110\rangle \rightarrow |111\rangle, |111\rangle \rightarrow |110\rangle$$

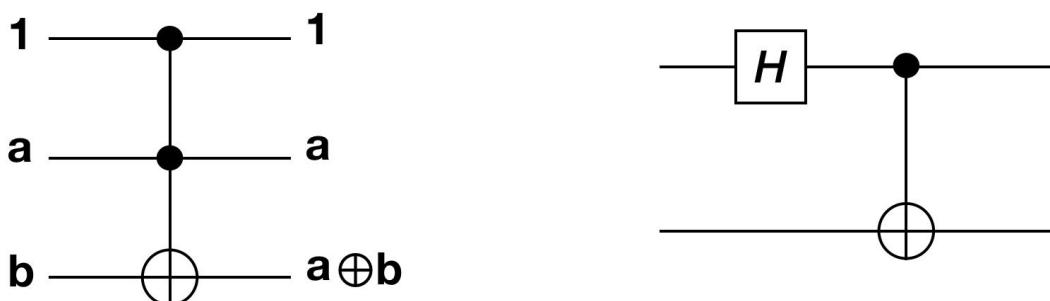


Figure 7: 受控门示意：左为 CNOT 逻辑 ($a \oplus b$)，右为 $H+CNOT$ 产生纠缠的线路。

【背】CNOT 矩阵表示

$$[\text{CNOT}] = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

其作用: $|00\rangle \rightarrow |00\rangle$, $|01\rangle \rightarrow |01\rangle$, $|10\rangle \rightarrow |11\rangle$, $|11\rangle \rightarrow |10\rangle$ 。

$$|a\rangle|b\rangle \mapsto |a\rangle|a \oplus b\rangle$$

$$\text{CNOT}^2 = I \quad (\text{自逆})$$

若控制比特处于叠加态, CNOT 可产生纠缠 (例如 $|+\rangle|0\rangle \mapsto |\Phi^+\rangle$)。

【了解】SWAP 门 交换两个量子比特的状态:

$$\text{SWAP} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

常用分解为三次 CNOT: $\text{SWAP} = (\text{CNOT}_{12})(\text{CNOT}_{21})(\text{CNOT}_{12})$ 。

$$\text{SWAP} = (\text{CNOT}_{21})(\text{CNOT}_{12})(\text{CNOT}_{21})$$

$$\text{SWAP}^2 = I$$

【了解】SWAP 真值表 (补充)

$$|00\rangle \rightarrow |00\rangle, \quad |01\rangle \rightarrow |10\rangle, \quad |10\rangle \rightarrow |01\rangle, \quad |11\rangle \rightarrow |11\rangle$$

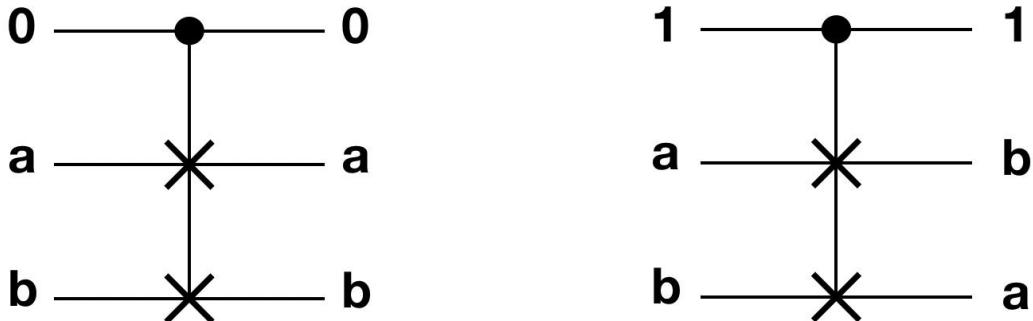


Figure 8: Fredkin (受控 SWAP) 门: 控制为 1 时交换两条线, 控制为 0 时保持不变。

例题

制备 Bell 态电路

对 $|00\rangle$, 先对第 1 比特施加 H , 再施加 CNOT (第 1 控制第 2):

$$|00\rangle \xrightarrow{H \otimes I} \frac{|00\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}} \xrightarrow{\text{CNOT}} \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} = |\Phi^+\rangle$$

对 $|\Phi^+\rangle$ 在计算基测量，只会得到 00 或 11，且概率各为 1/2。

20.4 【了解】可逆性与辅助比特

量子门必须可逆；经典不可逆运算（如擦除、AND）需要引入辅助比特与可逆门实现。

例题

二进制个位数相加（思路）

为避免不可逆映射，需引入辅助比特。一个常见流程（与课件思路一致）：

1. 初始化 $|0; x_2; x_1\rangle$ （辅助比特置 0）。
2. 以第 2 比特为控制、辅助比特为目标，施加 CNOT。
3. 以辅助比特为控制，施加 Fredkin 门。
4. 以第 2 比特为控制、第 1 比特为目标，施加 CNOT。
5. 测量前两个比特得到加法结果（进位与和）。

20.5 【了解】通用门集

任意单比特酉门 + CNOT 组成通用门集；常见实现为 $\{H, S, T, \text{CNOT}\}$ 。任意单比特酉算符可分解为欧拉角形式（例如 $U = e^{i\alpha}R_z(\beta)R_y(\gamma)R_z(\delta)$ ），因此只需有限基本门即可逼近任意量子电路。

21 【了解】量子计算概述与算法

21.1 【了解】经典计算瓶颈

- **摩尔定律放缓**：器件尺寸逼近纳米尺度，量子隧穿与热效应使性能提升受限。
- **量子系统难模拟**：经典资源随系统规模指数爆炸。

经典计算机发展简述（课件要点）

- 1946 年：第一台经典电子计算机 ENIAC。
- 1982 年：286 时代的集成电路计算机。
- 现代芯片已集成数十亿晶体管（例：智能手机 SoC）。

21.2 【了解】动机与基本需求

- **动机**：经典计算资源随量子系统规模指数爆炸（Feynman 模拟观点）。
- **基本需求**：可控物理比特、初始化、长相干时间、通用门集、测量读出与可扩展性。
可概括为常见的 DiVincenzo 判据：可扩展量子比特、初始化、通用门集、长相干、可靠测量等。

量子计算概念的提出 Richard Feynman 提出：用量子系统模拟量子系统可避免经典计算资源的指数爆炸。

经典比特 vs 量子比特 经典比特只能处于 0/1；量子比特可处于叠加态 $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ ，并能体现相干与干涉效应。

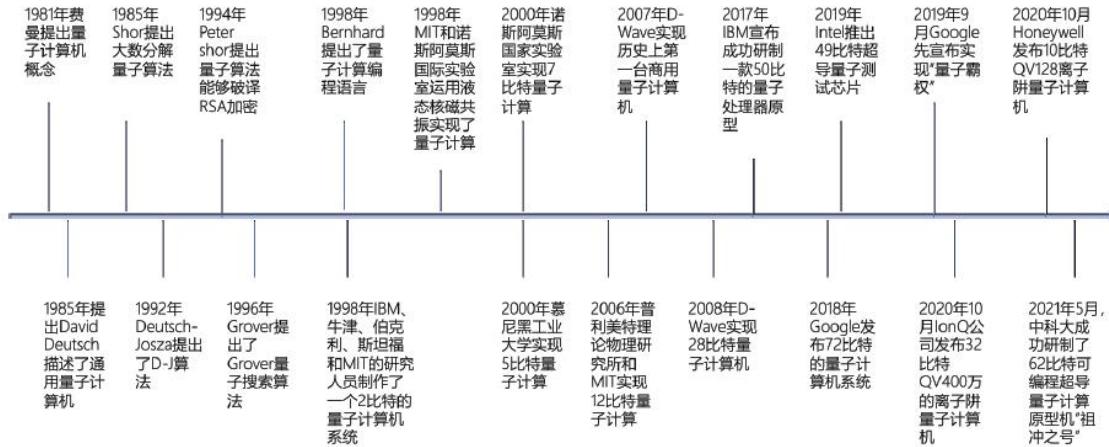


Figure 9: 量子计算发展里程碑时间线（课件示意）。

21.3 【了解】两类量子计算机

- **量子退火/绝热计算**: 专注优化问题 (如 QUBO/Ising)。
- **通用门电路量子计算**: 可执行任意量子算法。

21.4 【了解】典型量子算法

- **Shor 算法**: 大整数分解, 指数级加速 (威胁 RSA)。
- **Grover 算法**: 无结构搜索, 平方加速。
- **量子模拟**: 直接模拟量子系统的动力学与性质。

量子计算应用 (概览) 优化、量子化学与材料模拟、密码学与安全分析、机器学习加速等是常见应用方向。

Grover 算法核心流程

初始化 \rightarrow Hadamard 叠加 \rightarrow Oracle 标记 \rightarrow 扩散算子放大 \rightarrow 测量

Oracle 的相位翻转 (补充) 常用相位 Oracle 的作用为

$$O_f|x\rangle = (-1)^{f(x)}|x\rangle$$

其中 $f(x) = 1$ 的目标态获得相位 -1 。

Grover 扩散算子 (补充) 扩散算子可写为

$$D = 2|s\rangle\langle s| - I, \quad |s\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=0}^{N-1} |x\rangle$$

其作用可理解为“关于平均幅度的反射”，与 Oracle 一起形成幅度放大。

$$G = D O_f$$

Grover 迭代次数约为 $\left\lfloor \frac{\pi}{4} \sqrt{N} \right\rfloor$ 。若设目标态幅度角 $\sin \theta = 1/\sqrt{N}$, 则第 k 次迭代后的成功概率为

$$P_k = \sin^2((2k+1)\theta)$$

若存在 M 个目标态, 则近似迭代次数为 $\left\lfloor \frac{\pi}{4} \sqrt{N/M} \right\rfloor$ 。

量子算法通用套路 初始化 (多比特置 $|0\rangle$) → 量子门序列/线路 → 测量得到概率分布；测量输出为经典比特，需重复多次以统计结果。Grover 搜索将无结构搜索的复杂度从 $O(N)$ 降至 $O(\sqrt{N})$ 。

Shor 算法要点（补充） Shor 算法核心是将整数分解转化为**周期查找**问题，利用量子傅里叶变换 (QFT) 高效提取周期，从而得到因子。QFT 在计算基上的作用为

$$\text{QFT}_N|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{2\pi i x k / N} |k\rangle$$

在电路实现中，QFT 可用 $O(n^2)$ 个受控相位门构成 ($n = \log_2 N$)。其逆变换为

$$\text{QFT}_N^\dagger|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=0}^{N-1} e^{-2\pi i x k / N} |x\rangle$$

因此 QFT_N 是酉算符，且 $\text{QFT}_N^{-1} = \text{QFT}_N^\dagger$ 。实际实现中需构造模指数函数并在经典端用连分数法提取周期。

21.5 【了解】量子计算平台概览（常见实现）

量子计算体系 现有量子计算体系主要包括核磁共振 (NMR)、光子、离子阱、超导芯片、金刚石 NV 色心等。以 NMR 为例，核自旋在外磁场中发生塞曼能级劈裂，可用两能级作为量子比特。

- 超导量子比特 (约瑟夫森结)
- 离子阱 (激光操控)
- 光子量子计算
- 核磁共振 (NMR)
- NV 色心与半导体量子点
- 拓扑量子计算 (准粒子编织)

关键性能指标（补充） 量子比特的相干时间 (T_1, T_2) 需显著长于门操作时间，且门/测量误差率需低于容错阈值。连接度、读出保真度与可扩展性也是平台比较的核心指标。

21.6 【了解】量子退火与应用示例（概览）

量子退火将问题转化为 Ising/QUBO 优化，通过量子涨落寻找最优解；在物流路径、组合优化、机器学习等领域被探索应用（如 D-Wave 平台示例）。

22 【了解】量子通信

22.1 【了解】基本概念

量子通信利用叠加与纠缠传递信息，其安全性来自不确定性、测量塌缩与不可克隆定理。典型任务包括：量子隐形传态、量子密钥分发 (QKD)、量子超密编码、量子中继。

【背】不可克隆定理（要点） 不存在一个固定的酉变换能将任意未知态克隆：

$$|\psi\rangle|0\rangle \not\rightarrow |\psi\rangle|\psi\rangle \quad (\text{对所有 } |\psi\rangle)$$

这是量子通信安全性的根基之一。

不可克隆定理的线性性证明（补充） 设某酉算符满足 $U|0\rangle|0\rangle = |0\rangle|0\rangle$ 、 $U|1\rangle|0\rangle = |1\rangle|1\rangle$ ，则对叠加态 $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ ，

$$U|\psi\rangle|0\rangle = \alpha|0\rangle|0\rangle + \beta|1\rangle|1\rangle \neq (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) \otimes (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)$$

因此不存在能克隆任意未知态的线性（酉）操作。

内积证明（补充） 若 $U|\psi\rangle|0\rangle = |\psi\rangle|\psi\rangle$ 且 $U|\phi\rangle|0\rangle = |\phi\rangle|\phi\rangle$ ，则

$$\langle\psi|\phi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^2$$

除非 $|\langle\psi|\phi\rangle| = 0$ 或 1，否则矛盾，故不能克隆任意非正交态。

量子密集编码 量子密集编码与超密编码同义，本质是**纠缠 + 局域操作 + 联合测量**实现容量提升。要点：单独截获一个量子比特无法读出信息，因为信息编码在整体 Bell 态上。

典型任务速记

- 隐形传态：传输量子态本身（需纠缠 + 经典信道）。
- QKD：生成安全密钥而非直接传消息。
- 超密编码：1 个量子比特传 2 个经典比特。
- 量子中继：基于纠缠交换延伸距离。

不可克隆与安全性（补充） 未知量子态无法被完美复制，任何窃听尝试都会改变状态并可被检测，这是量子通信安全的核心原理之一。

量子通信的几类技术

- 隐形传态：传送量子态
- QKD：分发密钥
- 超密编码：提升信道容量
- 量子中继：延伸距离

信道损耗与距离（补充） 光纤与自由空间信道存在指数衰减与噪声，直接传输距离受限，因此需要中继、纠缠交换与量子存储器等技术扩展通信距离。

可信中继 vs 量子中继（补充） 可信中继依赖中继节点的**可信任假设**；量子中继基于纠缠交换与量子存储器，目标是实现端到端的量子安全。

22.2 【了解】量子隐形传态（Teleportation）

提出 1993 年 Bennett 等提出量子隐形传态方案。

协议步骤

1. Alice 与 Bob 共享 Bell 态 $|\Phi^+\rangle$ 。
2. Alice 对待传态量子比特与自己的一半纠缠比特做 CNOT。
3. Alice 对其第一个比特做 H ，并在 Bell 基下测量两个比特（BSM），得到 2 个经典比特。
4. Alice 通过经典信道发送测量结果；Bob 据此施加校正 I, X, Z, XZ 之一。

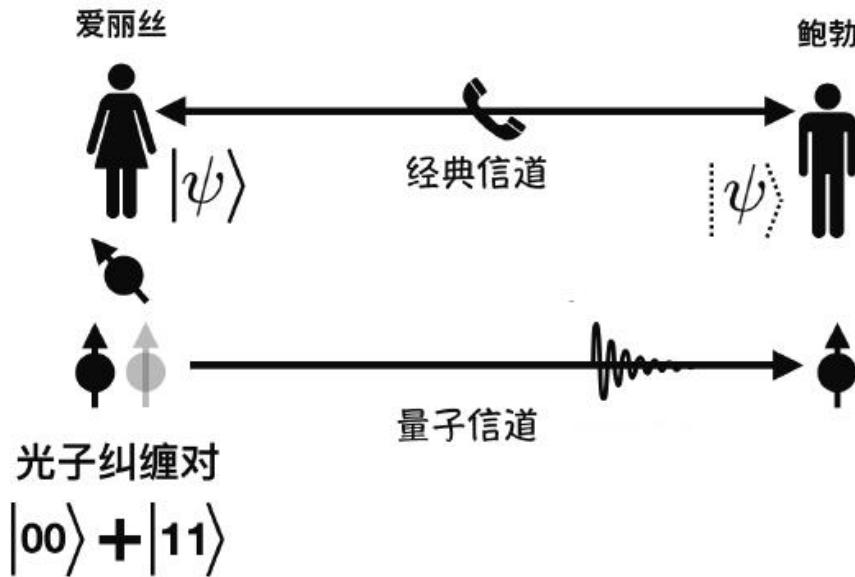


Figure 10: 量子隐形传态示意：纠缠对 + 经典信道共同完成态的传输。

【了解】纠正映射

Alice 测量结果	Bob 操作
00	I
01	X
10	Z
11	XZ

重要说明 传输的是量子态而非物质本体；需要经典信道，不能超光速；测量破坏原态，不违背不可克隆定理。发送者与接收者对该未知量子态的具体参数可以始终一无所知。

22.3 【了解】量子密钥分发 (QKD)

QKD 只生成共享密钥，不直接传输消息。任何窃听测量都会扰动量子态并引入可检测错误（如 BB84/E91 思想）。其安全性来自测量不可避免地引入扰动与不可克隆原理。

典型协议

- **BB84**: 发送方在两组互补基中随机制备单光子态，接收方随机测量后进行基筛选。
- **E91**: 基于纠缠分发密钥，可结合 Bell 不等式进行安全性验证。

基本流程（要点） 制备与测量 → 基筛选 → 误码率估计 → 纠错 → 隐私放大。

BB84 安全性直觉（补充） 窃听者若在错误基测量，会扰动量子态并引入额外误码；通过抽样估计误码率可检测窃听并决定是否丢弃密钥。

基筛选效率（补充） 在 BB84 中双方随机选择基，只有基一致的测量结果被保留，平均保留比例约为 $1/2$ 。

拦截-重发攻击（补充） 若窃听者随机选择基测量并重发（intercept-resend），会在筛选后的密钥中引入显著误码（典型约 25%），因此可被误码率检测到。

纠错与隐私放大（补充） 纠错用于消除信道噪声导致的不一致；隐私放大通过哈希压缩密钥，降低窃听者可能掌握的信息。

经典信道认证（补充） QKD 仍需要认证的经典信道完成基筛选与纠错，否则可能遭遇“中间人”攻击。

22.4 【了解】量子中继与网络

量子中继 基于纠缠交换与纠缠纯化延伸通信距离，需要量子存储器支持。

纠缠交换示意（补充） 若 $A-B$ 与 $B-C$ 共享 Bell 态（如 $|\Phi^+\rangle_{AB}$ 与 $|\Phi^+\rangle_{BC}$ ），在 B 处做 Bell 基测量可使 A 与 C 纠缠，从而实现“远距离纠缠”。

纠缠纯化（补充） 纠缠在传输中会退化，可通过 LOCC（局域操作 + 经典通信）对多对低保真纠缠态进行处理，以获得较高保真度的纠缠对，但会牺牲成功率。

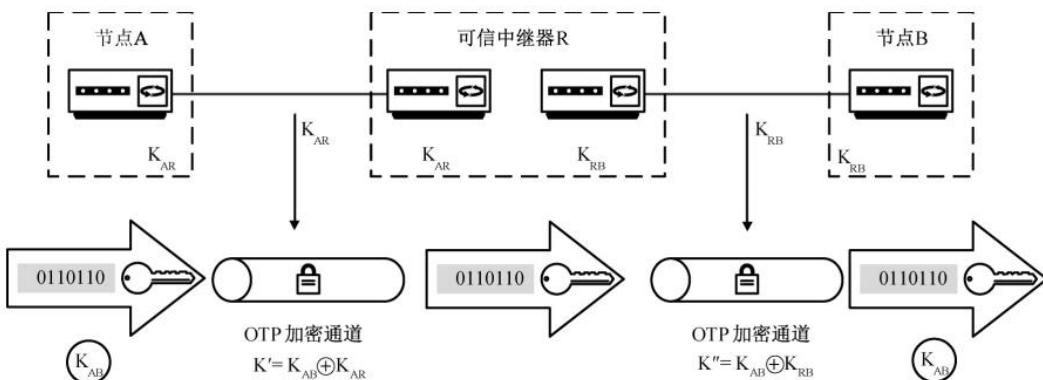


Figure 11: 可信中继（Trusted Relay）量子网络的示意。

网络架构

1. 主动光交换的不可信网络（光开关）
2. 被动光学器件网络（分束器、WDM）
3. 可信节点中继网络
4. 量子中继纯量子网络

基于纠缠交换的**量子中继**难度较高，工程上常以**可信中继**作为过渡方案。基于光开关/无源器件的多用户 QKD 复用方案可扩展性有限，仍受信道损耗约束。

常见拓扑 星形、环形、总线型。

典型网络示例 美国 DARPA 量子网络、欧洲 SECOQC、日本东京量子通信网络、中国天地一体量子通信网络与 500 公里无中继光纤 QKD 示范。

关键节点设备（示意） 纠缠源/单光子源、量子存储器、贝尔态测量模块、单光子探测器、时间同步与经典控制/通信模块等。

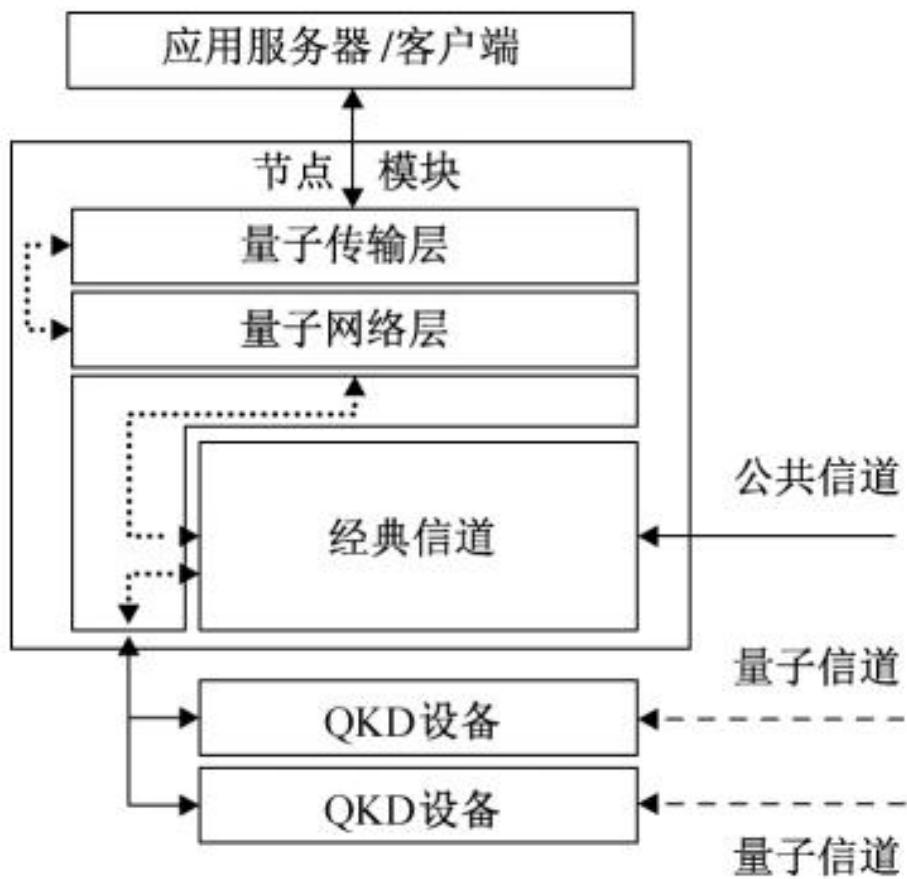


Figure 12: 量子通信协议栈与 QKD 设备位置（课件示意）。

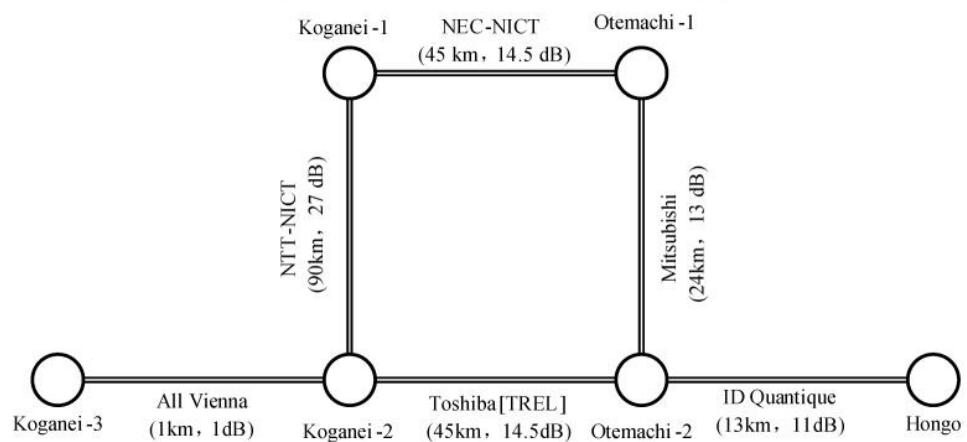


Figure 13: 量子通信网络拓扑示例（东京 QKD 网络示意）。

22.5 【了解】量子隐形传态研究进展（课件提要）

- 2010：自由空间 16 km 量子隐形传态实验。
- 2015：光纤中超过 100 km 的传态实验（高效探测器）。
- 2017：“墨子号”卫星实现地到星超过 1400 km 传态。

22.6 【了解】量子通信网络进展（课件提要）

- 2002–2007：美国 DARPA 量子保密通信网络（多节点、光纤/自由空间）。
- 2004/2008：欧洲 SECOQC 项目启动并建成 QKD 网络。
- 2010：日本东京 6 节点城域 QKD 网络。
- 2021：中国天地一体广域量子通信网络（京沪干线 + “墨子号”）。
- 2021：中国 500 km 级无中继光纤 TF-QKD 现场示范。

23 【了解】常见题型总结

1. 复数运算：求模、共轭、逆、指数形式
2. 向量归一化：计算 $\langle \psi | \psi \rangle$ 并归一化
3. 内积与正交性：计算内积，判断是否正交
4. 线性无关与基：判断是否线性无关，写出基与维数
5. 展开系数：在给定正交归一基下展开向量
6. 矩阵基本操作：求转置、共轭、迹、行列式与逆
7. 判断厄米/酉性：验证 $H = H^\dagger$ 或 $U^\dagger U = I$
8. 本征值问题：求本征值、本征向量、谱分解
9. 张量积展开：用双线性性完全展开
10. 算符作用：计算 $(A \otimes B)|v \otimes w\rangle$
11. 对易子/反对易子：计算 $[A, B]$ 与 $\{A, B\}$
12. 量子比特与 Bloch 球：将态写成 $\cos \frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2}|1\rangle$
13. 酉演化/量子门：由 $U|\psi\rangle$ 计算演化后态
14. 测量与塌缩：用 P_m 或 M_m 求测量概率与测后态
15. 密度矩阵：判断纯/混态，计算期望值与偏迹
16. 测不准关系：计算 ΔA 并应用 $\Delta A \Delta B$ 下界
17. 纠缠态判定：判断可分/纠缠，写出 Bell 态
18. EPR/Bell：写出 CHSH 不等式并解释物理含义
19. 超密编码：给出编码映射与解码步骤
20. 量子线路：分析门序列并计算输出态
21. 隐形传态：写出 CNOT + H + 测量 + 纠正的流程
22. 量子通信：解释 QKD/中继/网络架构的基本思路

【了解】学习建议

- 掌握这些数学工具需要大量练习，建议每个概念至少手算 2-3 个例子
- 重点关注从定义出发的推导过程，而不是死记公式
- 遇到复杂计算时，写出完整步骤，避免跳步导致错误
- 理解物理意义：厄米算符 \rightarrow 可观测量，酉算符 \rightarrow 演化，张量积 \rightarrow 复合系统
- 将四大公设与计算习惯绑定：写清“态—演化—测量—复合系统”的链条
- 练习密度矩阵与偏迹：用 $|\Phi^+\rangle$ 等纠缠态练习
- 画线路图并手算：Bell 态制备、超密编码、隐形传态
- 建议将常用门 (H, X, Y, Z, S, T) 与 Bloch 球旋转对应起来记忆

- 对 QKD/纠缠/测量等内容，先抓住因果链条：制备 → 演化 → 测量 → 统计

【背】必背公式清单

- 复数与欧拉公式： $z = x + iy$, $z^* = x - iy$, $|z|^2 = zz^*$, $z = |z|e^{i\theta}$, $e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$ 。
- 内积与归一化： $\langle\phi|\psi\rangle = \sum_k a_k^* b_k$, $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ 。
- 正交归一基与完备关系： $\langle e_i|e_j\rangle = \delta_{ij}$, $I = \sum_j |e_j\rangle\langle e_j|$ 。
- 外积/投影： $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$, $P_\psi^2 = P_\psi$, $P_\psi^\dagger = P_\psi$ 。
- 厄米共轭： $(A^\dagger)_{ij} = (A_{ji})^*$, $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$ 。
- 厄米/酉算符： $H = H^\dagger$, $U^\dagger U = I$, $U^{-1} = U^\dagger$ 。
- 本征值与谱分解： $A|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle$, $H = \sum_j \lambda_j |\phi_j\rangle\langle\phi_j|$ (厄米算符)。
- Pauli 矩阵与对易 (在标准基 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ 下)：

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z, \quad \{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}I$$

- 张量积运算： $\langle v_1 \otimes w_1 | v_2 \otimes w_2 \rangle = \langle v_1 | v_2 \rangle \langle w_1 | w_2 \rangle$, $(A \otimes B)(C \otimes D) = (AC) \otimes (BD)$ 。
- 对易子： $[A, B] = AB - BA$ 。
- Cauchy-Schwarz： $|\langle\phi|\psi\rangle| \leq \|\phi\| \|\psi\|$ 。
- 量子比特态： $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ 。
- 薛定谔方程与酉演化： $i\hbar \partial_t |\psi\rangle = H|\psi\rangle$, $U = \exp(-\frac{i}{\hbar}H\Delta t)$ 。
- 测量公式： $p(m) = \langle\psi|M_m^\dagger M_m|\psi\rangle$, $|\psi_m\rangle = \frac{M_m|\psi\rangle}{\sqrt{p(m)}}$; 投影测量 $p(m) = \langle\psi|P_m|\psi\rangle$ 。
- 复合系统： $\mathcal{H}_{AB} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, $|\psi\rangle = \sum_{ij} c_{ij} |i\rangle |j\rangle$ 。
- 密度算子： $\rho = \sum_k p_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k|$, $\text{tr}(\rho) = 1$, $\langle A \rangle = \text{tr}(\rho A)$, $\rho_A = \text{tr}_B(\rho_{AB})$ 。
- CNOT 矩阵：

$$[\text{CNOT}] = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$