量子信息导论

主讲：李军

Email：junli01@mail.xidian.edu.cn
办公室：新科技楼1718室

五、量子信息基本概念

1. 数学基础

相对于经典力学和旧的量子理论，由海森堡和薛定谔等建立的新量子理论不但在概念上有颠覆性的变化，而且它的整个理论框架需要利用经典力学中很少用到的数学，**复数和线性代数**。在本章我们简单介绍复数和线性代数。

1. 数学基础

- 复数
- 线性代数
  - 线性空间
  - 希尔伯特空间
  - 矩阵
  - 本征态和本征值
  - 直积空间
  - 对易式和非对易式
- 量子符号及其运算

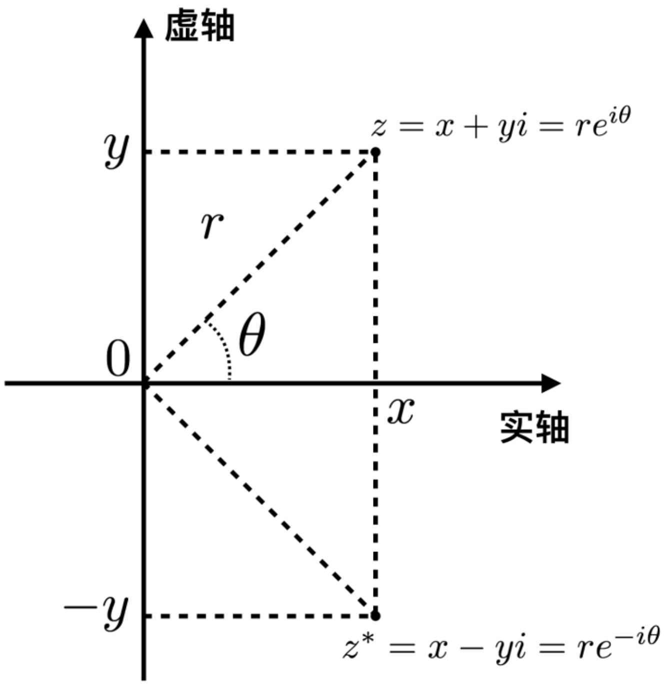
复数

虚数的发现来自理性的思考。古希腊数学家和工程师亚历山大的希罗在思考诸如方程 $x^2+1=0$的根时发现了虚数。可能是因为社会进步了，希罗没有为此受到任何不公正待遇。但是在非常长的一段时间内不但普通人就连数学家都认为虚数没有任何意义和用途。虚数这个名字正是反映了人们对它的长期蔑视态度：这种数是虚构的。

直到大数学家欧拉对它深入研究后, 人们才开始重视它。欧拉用i来标记 $\sqrt{-1}$，也就是$i^2=-1$，这个符号沿用至今。对于任意的实数x和y, 我们把yi叫做虚数，把$x+yi$叫做**复数**。在后面的章节，我们会看到**量子力学就是用复数或成组的复数来描述我们这个五彩缤纷的世界**。伟大的希罗和欧拉虽然才能出众、思想活跃，但他们一定没有想到自然界就是由复数描述的。

复数

任意一个复数$z = x + yi$可以形象地表示成复平面上的一个向量(x, y)。按照惯例，复平面的横轴是实数轴，竖轴是虚数轴。一个复数$z = x + yi$的实部x就是横轴的坐标，虚部y就是竖轴的坐标。和其它向量一样，复数z不但具有**长度**还有**方向**。复数z的长度是$r = \sqrt{x^2 + y^2}$，它的角度θ满足 $tan\theta = \frac{y}{x}$。我们称r为复数z的**模**，记作$r = |z|$；θ为复数z的**幅角**，记作$\theta = arg(z)$。



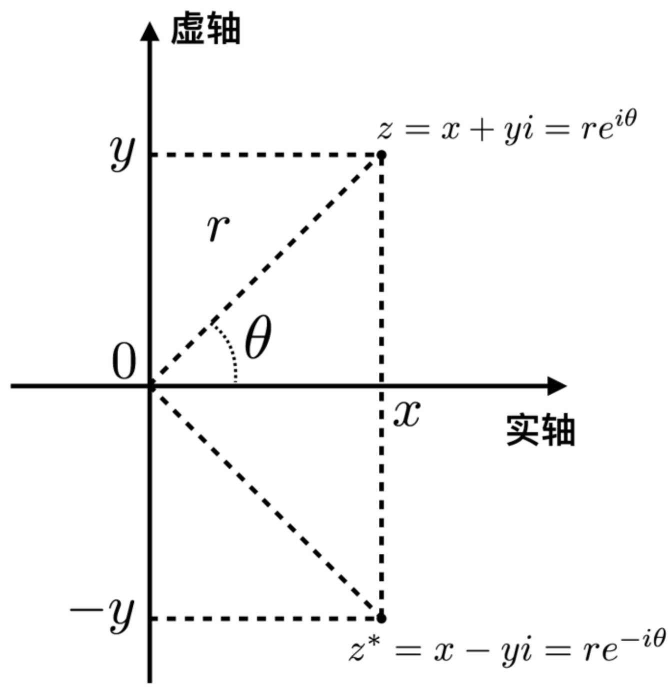
复数

复数有一个实数没有的运算——**共轭**。

复数$z = x + yi$的共轭是$z^* = (x + yi)^* = x - yi$。

从图中可以看出，**复数z和它的共轭z^*关于实轴是对称的**。显然，

$zz^* = |z|^2$。



复数

我们介绍一个特殊但非常有用的复数$e^{i\theta}=cos\theta+isin\theta$，其中实数$\theta$是一个角度。对于一个任意的复数，我们总是有

$$z=x+yi=\sqrt{x^2+y^2}\left(\frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}}+\frac{y}{\sqrt{x^2+y^2}}i\right)$$

令$r=\sqrt{x^2+y^2}$，$cos\theta=\frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}}$，则$z=re^{i\theta}$。

其中r就是前面已经提到的z的模$|z|$，而θ则是z的幅角。物理学家喜欢把θ称作相角或相位。

上面这个公式可以看作复数的另外一种表示方法。利用这种方式很容易计算复数z的倒数或逆，$z^{-1}=\frac{1}{z}=\frac{e^{-i\theta}}{r}$。而$z$的复共轭则可以写成$z^*=re^{-i\theta}$。

复数

我们后面会有很多机会看到复数在量子力学中的应用。这里提两个简单的复数在数学里的运用。

- 利用$e^{i\theta}=cos\theta+isin\theta$和$e^{i(\theta_1+\theta_2)}=e^{i\theta_1}e^{i\theta_2}$可以推导出大家熟悉的三角函数公式

$$sin(\theta_1+\theta_2)=sin(\theta_1)cos(\theta_2)+cos(\theta_1)sin(\theta_2)$$

$$cos(\theta_1+\theta_2)=cos(\theta_1)cos(\theta_2)-sin(\theta_1)sin(\theta_2)$$

- 我们都知道一元二次方程$ax^2+bx+c=0$的根是

$$x_\pm=\frac{-b\pm\sqrt{b^2-4ac}}{2a}$$

中学老师会告诉你如果$b^2<4ac$，这个方程没有解。

有了复数以后，我们看到当$b^2<4ac$时，这个方程**有两个复数解。**希罗正是在解这类方程时发现了复数。

■ 线性空间

假设有一组 “点” 的集合，每个点有两个分量，我们把它记成列向量的形式

$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

这样的 “点” 和常数a间的乘法定义为

$$a\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} ax \\ ay \end{bmatrix}$$

“点” 和 “点” 之间的加法定义为

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 + x_2 \\ y_1 + y_2 \end{bmatrix}$$

所有满足以上两种关系的具有两个分量的 “点” 就构成了一个二维线性空间，而空间中的每个 “点” 被称作向量，常数a则被称作标量。

■ 内积

两个向量间的“**点乘**” 被定义为，**先将其中一个变为对应的行向量，然后按上式相乘。**数学家还为 “点乘” 取了另外一个名字，**内积。**

利用内积，我们可以**计算一个向量的长度** r，

$$r^2 = \begin{bmatrix} x & y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = x^2 + y^2$$

■ 维度推广

考虑有n个分量的向量，并类似地定义相关的乘法和加法，这样就会得到一个n维线性空间。比如，对于有3个分量的向量，我们可以类似地定义它们间的**加法和内积**。

$$\begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \\ c_1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 + a_2 \\ b_1 + b_2 \\ c_1 + c_2 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \\ c_2 \end{bmatrix} = a_1 a_2 + b_1 b_2 + c_1 c_2$$

■ 复数推广

在前面的讨论中，无论是向量的每个分量还是标量都是实数。我们将它们推广为复数，这样就得到了一类非常重要的线性空间——**希尔伯特空间**。**量子力学认为整个大自然就是生活在希尔伯特空间里。**

■ 希尔伯特空间

为了简单起见，我们先考虑**二维希尔伯特空间**。组成这个空间的向量有两个分量，我们把它记成如下形式

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$$

这里a和b都是复数。

- ◆ **狄拉克符号，把希尔伯特空间中的向量表示成了$|\psi\rangle$**。符号$|\ \rangle$读作ket。
- ✓ **简洁**，因为高维度希尔伯特空间里向量有很多个分量，绝大多数情况下，没有必要把它的分量一一列出。
- ✓ **可以和后面量子力学里的符号自然衔接。**
- ◆ **向量$|\psi\rangle$和一个常数的相乘为**

$$c|\psi\rangle = c\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} ca \\ cb \end{bmatrix}$$

这里c是一个复数。

线性代数——希尔伯特空间

◆ 两向量相加

对于二维希尔伯特空间中的两个向量

$$|\psi_1\rangle = \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix}, \quad |\psi_2\rangle = \begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \end{bmatrix}$$

它们的**相加**定义为

$$|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle = \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 + a_2 \\ b_1 + b_2 \end{bmatrix}$$

◆ 共轭行向量

定义为 $\langle\psi| = [a^* \quad b^*]$，符号$\langle\ |$读作bra。

注意这个行向量的两个分量分别是其对应的列向量的复共轭。

◆内积

对于前面给出的两个向量$|\psi_1\rangle$，$|\psi_2\rangle$，它们之间的内积被定义为

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = [a_1^* \quad b_1^*]\begin{bmatrix}a_2\\b_2\end{bmatrix} = a_1^*a_2 + b_1^*b_2$$

注意，**还有一种可能的内积**

$$\langle\psi_2|\psi_1\rangle = [a_2^* \quad b_2^*]\begin{bmatrix}a_1\\b_1\end{bmatrix} = a_2^*a_1 + b_2^*b_1 \neq \langle\psi_1|\psi_2\rangle$$

两个向量$|\psi_1\rangle$和$|\psi_2\rangle$的**内积次序是重要的**，它们间两种可能的内积$\langle\psi_1|\psi_2\rangle$和$\langle\psi_2|\psi_1\rangle$**一般情况下不相等，而是互为复共轭**

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle^*$$

当两个向量的**内积是实数**时，我们会有$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle$。

如果$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$，我们说$|\psi_1\rangle$和$|\psi_2\rangle$**正交**。一个向量$|\psi\rangle$的**长度**$r$定义为这个向量和自己内积的平方根，即

$$r^2 = \langle\psi|\psi\rangle = |a|^2 + |b|^2$$

◆ 线性空间的基

我们在回顾二维向量的时候，提到要先建立坐标系，然后才能给出一个向量的分量。在一般的线性空间包括希尔伯特空间里，我们也需要先建立 “坐标系”，然后才能确定向量的分量。这个 “坐标系” 就是线性空间的基。**二维希尔伯特空间有两个基**。我们前面写$|\psi\rangle$的分量时其实隐含着在使用如下两个基

$$|e_1\rangle=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix},\ |e_2\rangle=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$$

利用这两个基，向量$|\psi\rangle$可以写成

$$|\psi\rangle=a|e_1\rangle+b|e_2\rangle$$

直接计算可以验证如下关系

$$\langle e_1|e_1\rangle=\langle e_2|e_2\rangle=1,\ \langle e_1|e_2\rangle=\langle e_2|e_1\rangle=0$$

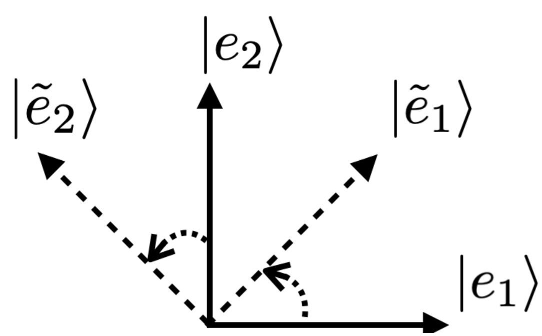
所以这两个基的长度是 1，还互相正交。我们把这种基叫做**正交归一基**。

◆ 坐标系的选择

不是唯一的，一个坐标系经过旋转以后会成为另外一个坐标系。同样道理，我们可以通过某种“旋转”得到另外一套正交归一基。比如下面这套二维希尔伯特空间的正交归一基$|\tilde{e}_1\rangle$和$|\tilde{e}_2\rangle$

$$|\tilde{e}_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_1\rangle + i|e_2\rangle), \quad |\tilde{e}_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_1\rangle - i|e_2\rangle)$$

它们可以看成是由$|e_1\rangle$和$|e_2\rangle$“旋转”而得，但上面的表达式里有复数，所以这种“旋转”和实空间中旋转并不完全一样，内容更丰富。通过直接计算，我们可以验证$\langle\tilde{e}_1|\tilde{e}_1\rangle = \langle\tilde{e}_2|\tilde{e}_2\rangle = 1$，$\langle\tilde{e}_1|\tilde{e}_2\rangle = \langle\tilde{e}_2|\tilde{e}_1\rangle = 0$



在这套新的正交归一基下，我们有

$$|\psi\rangle = a|e_1\rangle + b|e_2\rangle = \frac{a-ib}{\sqrt{2}}|\widetilde{e_1}\rangle + \frac{a+ib}{\sqrt{2}}|\widetilde{e_2}\rangle$$

任意两个正交归一的向量都可以用作二维希尔伯特空间的基。

推广到n维希尔伯特空间。考虑n维希尔伯特空间里两个向量

$$|\phi\rangle = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}, \quad |\psi\rangle = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

向量$|\phi\rangle$和常数c的乘积是

$$c|\phi\rangle = c\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} ca_1 \\ ca_2 \\ ca_3 \\ \vdots \\ ca_n \end{bmatrix}$$

这两个向量的和是

$$|\phi\rangle+|\psi\rangle=\begin{bmatrix}a_1\\a_2\\a_3\\\vdots\\a_n\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}b_1\\b_2\\b_3\\\vdots\\b_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}a_1+b_1\\a_2+b_2\\a_3+b_3\\\vdots\\a_n+b_n\end{bmatrix}$$

向量$|\phi\rangle$和向量$|\psi\rangle$的内积是

$$\langle\phi|\psi\rangle=\begin{bmatrix}a_1^* & a_2^* & a_3^* & \dots & a_n^*\end{bmatrix}\begin{bmatrix}b_1\\b_2\\b_3\\\vdots\\b_n\end{bmatrix}=a_1^*b_1+a_2^*b_2+a_3^*b_3+\cdots+a_n^*b_n$$

n维希尔伯特空间的正交归一基有n个，最自然的取法是

$$|e_1\rangle=\begin{bmatrix}1\\0\\0\\\vdots\\0\end{bmatrix},\quad |e_2\rangle=\begin{bmatrix}0\\1\\0\\\vdots\\0\end{bmatrix},\quad |e_3\rangle=\begin{bmatrix}0\\0\\1\\\vdots\\0\end{bmatrix},\quad \cdots,\quad |e_n\rangle=\begin{bmatrix}0\\0\\0\\\vdots\\1\end{bmatrix}$$

用这套正交归一基表达$|\phi\rangle$，我们有

$$|\phi\rangle = a_1|e_1\rangle + a_2|e_2\rangle + a_3|e_3\rangle + \cdots + a_n|e_n\rangle = \sum_{j=1}^{n} a_j|e_j\rangle$$

$|\phi\rangle$的共轭向量可以表达为

$$\langle\phi| = \sum_{j=1}^{n} a_j^*\langle e_j|$$

$|\phi\rangle$和$|\psi\rangle$的内积是

$$\langle\phi|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{n} a_j^*\langle e_j|\sum_{k=1}^{n} b_k|e_k\rangle = \sum_{i=1}^{n} a_i^* b_i$$

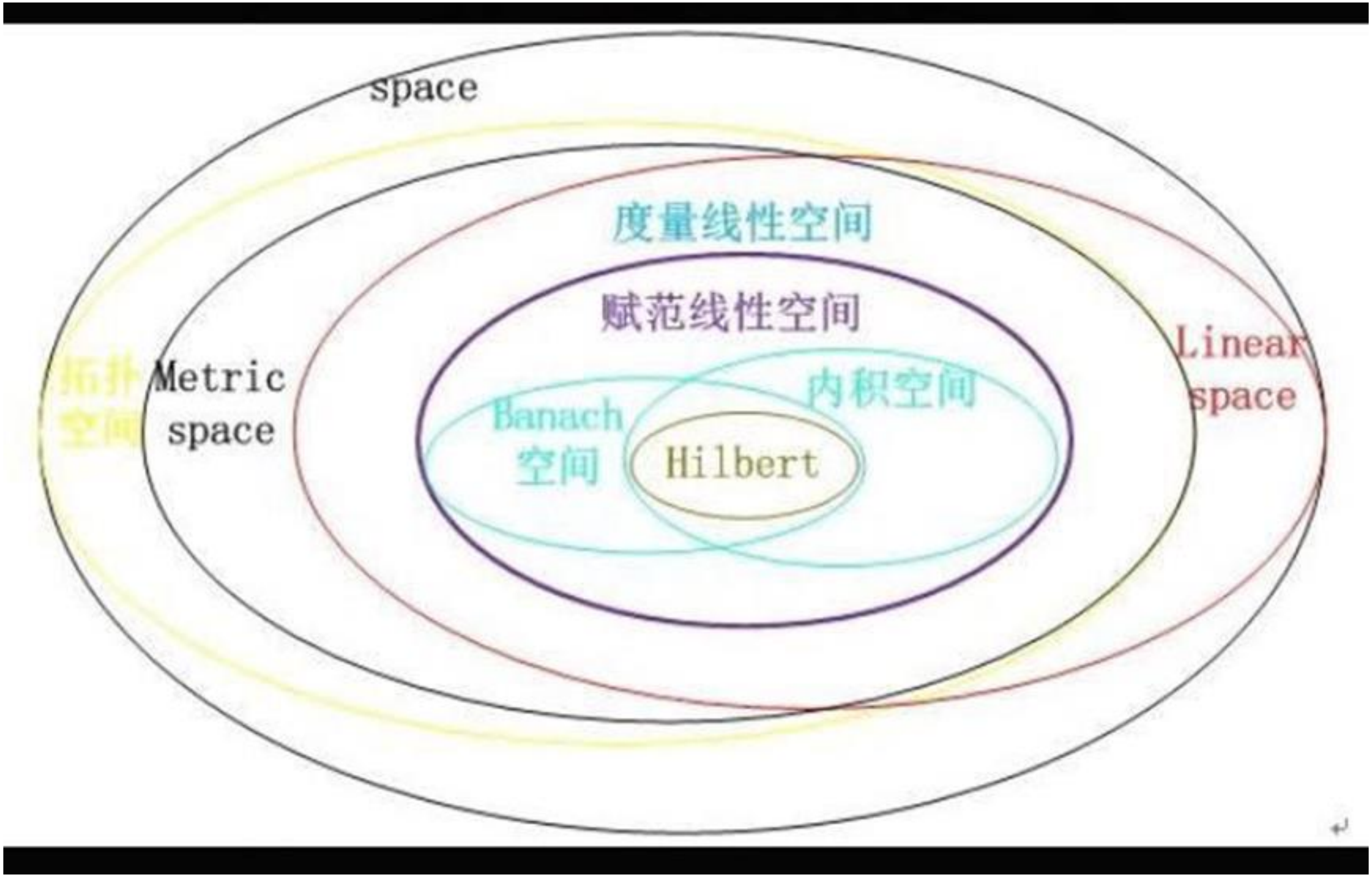
为了得到上式中的第二个等号，我们运用了

$$\langle e_j|e_j\rangle = 1,\ \langle e_j|e_k\rangle = 0(j \neq k)$$

■ 不同的空间

名称	数域与集的元素	由数学运算建立的元素间相互联系的基本模式	元素间亲疏关系的度量方式	所讨论的基本问题
向量空间	数域，数值向量	线性关系	无	基的识别
线性空间	数域，抽象向量	线性关系	无	基的识别
度量空间（距离空间）	非空集合	无	抽象度量（距离）	亲疏判定
完备度量空间	非空集合	无	抽象的完备度量（基本点列收敛）	亲疏判定
赋范线性空间	数域，抽象向量	线性关系	抽象范数	线性度量
巴拿赫空间（Banach）	数域，抽象向量	线性关系	由抽象的范数诱导出的完备度量	【注】无“角”的概念
内积空间	数域，抽象向量	线性关系	抽象内积，由内积诱导出的范数，夹角和距离	基的正交规范化
希尔伯特空间（Hilbert）	数域，抽象向量	线性关系	由抽象的内积诱导出范数的完备度量	
欧几里得空间	实数域，抽象向量	线性关系	正定对称双线性型（内积），由此诱导出的长度，夹角和距离	基的正交规范化
酉空间	复数域，抽象向量	线性关系	正定 Hermite 型（内积），由此诱导出的长度，夹角和距离	基的正交规范化
几何空间	实数域，数值向量	线性关系	向量内积（数量积），由此诱导出的向量长度，夹角和距离	几何体的性质
线性算子空间	在两个赋范线性空间之间定义的抽象线性运算（算子）构成的线性空间			
共轭空间	赋范线性空间 X 上的全体连续线性泛函 f 构成的赋范线性空间（线性同构空间）			

不同空间的关系


space
度量线性空间
赋范线性空间
拓扑空间
Metric space
Banach 空间
内积空间
Hilbert
Linear space

■ **矩阵-**向量间的变换，经常被称为**线性变换**或**线性算符**

◆ **旋转变换**

$$R_\theta = \begin{bmatrix} cos\theta & -sin\theta \\ sin\theta & cos\theta \end{bmatrix}$$

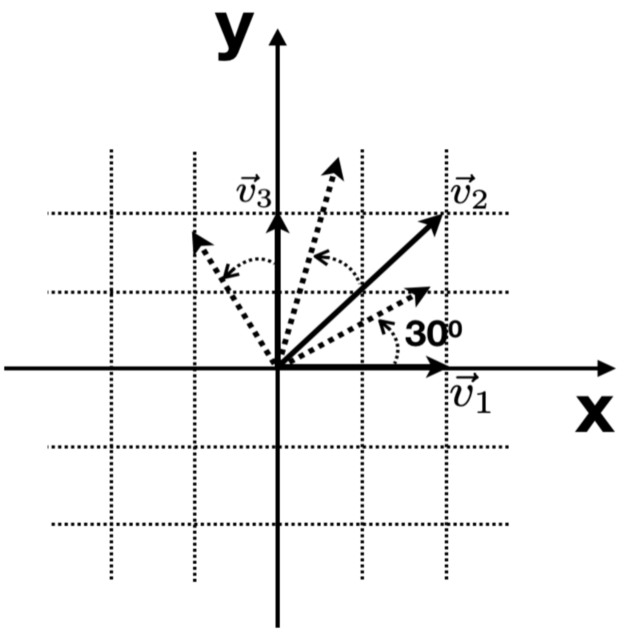
在图中有三个向量，$\vec{v_1}$、$\vec{v_2}$ 和$\vec{v_3}$。我们先考虑$\vec{v_1}$和$\vec{v_3}$。写成列向量的形式，

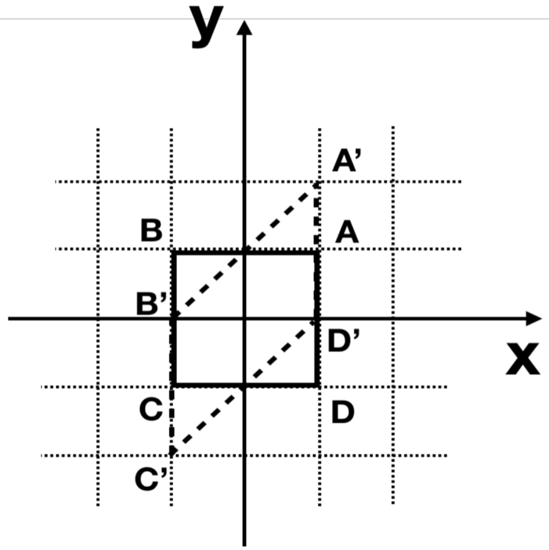
$$\vec{v_1} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \ \vec{v_3} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

将这两个向量逆时针旋转30°，得到旋转后

的新向量$R_{30}\vec{v_1} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix}$，$R_{30}\vec{v_3} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{bmatrix}$。

这里R_{30}表示逆时针旋转30°。





◆ 剪切变换

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

表示一个沿y轴的剪切变换。我们具体看一下Q的作用

$$\begin{bmatrix}1 & 0\\1 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\y\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x\\x+y\end{bmatrix}$$

向量的x分量不变，y分量变成$x+y$。举个例子，对于图中的A点，它的x分量是1，y分量也是1，我们有

$$\begin{bmatrix}1 & 0\\1 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\2\end{bmatrix}$$

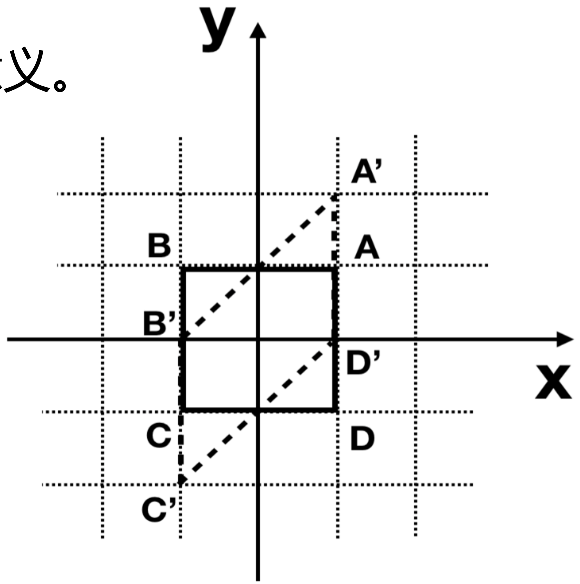
即A点在剪切变换Q的作用下变成了A'。类似地，在Q的作用下，B点会变成B'，C点会变成C',D点会变成D'。所以总体上**在Q的作用下，图中的正方形$ABCD$会被“剪切”成一个平行四边形$A'B'C'D'$**。

◆ 矩阵相乘的不可交换性几何意义

在二维实空间，矩阵相乘的不可交换性有很明确的几何意义。

让列向量绕原点逆时针旋转了一个角度θ，当$\theta = 90°$时

$$R_{90} = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$



对图中的正方形$ABCD$进行两组不同的变换：

（1）**先做旋转R_{90}，然后做剪切Q;**

（2）**先做剪切Q，后做旋转R_{90}。**

在**第一组操作**中，由于正方形的对称性，先进行的旋转R_{90}其实没有造成任何变化。这样实际效果和单个剪切变换Q一样，结果就是**图中的平行四边形$A'B'C'D'$**；

第二组操作的结果则会**将图中平行四边形$A'B'C'D'$逆时针旋转90°**。

同时我们通过矩阵乘法可以直接验证 $R_{90}Q \neq QR_{90}$。这就是**矩阵相乘不可交换性的几何意义**。

◆ 矩阵的操作

转置

一个矩阵M的转置就是将它的行和列相互调换，记作M^T，数学上有$M_{ij}^T = M_{ji}$。

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ i & 2i & 3i \\ 4 & 5 & 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & i & 4 \\ 2 & 2i & 5 \\ 3 & 3i & 6 \end{bmatrix}^T$$

厄米共轭

一个矩阵M的厄米共轭不但将它的行和列相互调换，而且还取复共轭，记作$M^\dagger$，数学上有$M_{ij}^\dagger = M_{ji}^*$。

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ i & 2i & 3i \\ 4 & 5 & 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -i & 4 \\ 2 & -2i & 5 \\ 3 & -3i & 6 \end{bmatrix}^\dagger$$

◆ 几类特殊但非常重要的矩阵

对角矩阵

一个对角矩阵的所有非对角元都等于零。对角矩阵间的乘法是可以交换的，即如果矩阵M_1和M_2是对角的，那么$M_1 M_2 = M_2 M_1$。

单位矩阵

如果一个对角矩阵的对角元都是1，这个对角矩阵就是单位矩阵，一般记作I。

逆矩阵

矩阵M的逆矩阵记作M^{-1},满足$MM^{-1} = M^{-1}M = I$。不是所有的矩阵都有逆矩阵。

对称矩阵

如果一个矩阵M满足$M = M^T$，这个矩阵被称作对称矩阵。

厄米(自伴)矩阵（Hermite，self-adjoint)

如果一个矩阵M满足$M = M^{\dagger}$，这个矩阵叫厄米矩阵。下面三个矩阵都是厄米矩阵

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

人们通常称这三个矩阵为**泡利矩阵**。

显然**实的对称矩阵（所有矩阵元都是实数）是厄米矩阵**。

幺正矩阵

如果矩阵M满足$MM^{\dagger} = M^{\dagger}M = I$，这种矩阵叫幺正矩阵。

如$U = \begin{bmatrix} cos\theta & isin\theta \\ isin\theta & cos\theta \end{bmatrix}$是一个幺正矩阵，满足$UU^{\dagger} = U^{\dagger}U = I$。

■ 本征态和本征值

对于一个矩阵M有一些特殊的向量$|\psi\rangle$，它们满足

$$M|\psi\rangle = v|\psi\rangle$$

即矩阵M作用在这些向量上等价于一个常数和这些向量相乘。在数学上，$|\psi\rangle$被称作**矩阵M的本征向量**，而v是**相应的本征值**。比如矩阵$Q=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 1 & 1\end{bmatrix}$有一个本征向量$|\alpha\rangle=\begin{bmatrix}0\\ 1\end{bmatrix}$，对应的本征值为1。

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

显然向量c$|\alpha\rangle$（c 是一个任意复数）也是Q的本征向量，这在数学上不算新的本征向量。按照这种规定，矩阵 Q 只有一个本征向量。有兴趣的同学可以证明一下。

线性代数——本征态和本征值

在量子力学里，人们主要关心厄密矩阵的本征向量和本征值。由于在量子力学中本征向量对应一个量子态，物理学家喜欢把本征向量称作为本征态。对于任意一个$n \times n$**厄米矩阵O**，它的本征态和本征值具有如下普遍性质。

（1）**O 一定有**n**个本征态**$|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, \ldots, |\phi_n\rangle$**，其相应本征值为**$v_1, v_2, \cdots, v_n$。

即$O|\phi_j\rangle = v_j|\phi_j\rangle$，$j = 1, 2, \cdots, n$。

（2）可以证明**本征值**$v_1, v_2, \cdots, v_n$**都是实的**。

（3）可以证明**本征态**$|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, \ldots, |\phi_n\rangle$**相互正交，即**$\langle\phi_i|\phi_j\rangle = 0(i \neq j)$。

（4）由于$c|\phi_j\rangle$依然是本征态，我们可以利用这个性质，通过**适当选择c使得**

$\langle\phi_j|\phi_j\rangle = 1$。**这种本征态被称作是归一的**。

有可能某两个本征值$v_i = v_j (i \neq j)$，这时我们说相应的两个本征态$|\phi_i\rangle$**和**$|\phi_j\rangle$**是简并的**。

举一个例子：考虑一个4×4的厄米矩阵

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

它有如下4个本征态

$$|\phi_1\rangle = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |\phi_2\rangle = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |\phi_3\rangle = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad |\phi_4\rangle = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

对应的本征值依次是1，1，-1，-1。

可以验证**这4个本征态是正交归一的**。而且**$|\phi_1\rangle$和$|\phi_2\rangle$简并**，**$|\phi_3\rangle$和$|\phi_4\rangle$简并**。

■ 张量积空间

如果我们有两个希尔伯特空间V_1和V_2，那么这两个空间可以构成一个新的希尔伯特空间，$\mathrm{V}=V_1\otimes V_2$，这里⊗被称为**直积**。如果$V_1$的维度是$n_1$， V_2的维度是n_2，那么**张量积空间V**的**维度是$\mathbf{n}=\boldsymbol{n_1 n_2}$**。如果$V_1$中有一个向量$|\phi\rangle$，$V_2$中有一个向量$|\varphi\rangle$，那么通过直积它们构成一个V中的向量$|\boldsymbol{\psi}\rangle=|\boldsymbol{\phi}\rangle\otimes|\boldsymbol{\varphi}\rangle$。**张量积空间V中的向量总是可以表达成$V_1$和 V_2中向量的张量积或多个张量积的线性叠加**，即

$$|\boldsymbol{\Psi}\rangle=\boldsymbol{c_1}|\boldsymbol{\phi_1}\rangle\otimes|\boldsymbol{\varphi_1}\rangle+\boldsymbol{c_2}|\boldsymbol{\phi_2}\rangle\otimes|\boldsymbol{\varphi_2}\rangle+\cdots+\boldsymbol{c_j}\left|\boldsymbol{\phi_j}\right\rangle\otimes\left|\boldsymbol{\varphi_j}\right\rangle+\cdots$$

V中的直积向量有如下简单的**运算性质**

（1）**张量积规则**。和普通乘法非常类似

$$(|\phi_1\rangle+|\phi_2\rangle)\otimes(|\varphi_1\rangle+|\varphi_2\rangle)=|\phi_1\rangle\otimes|\varphi_1\rangle+|\phi_1\rangle\otimes|\varphi_2\rangle+|\phi_2\rangle\otimes|\varphi_1\rangle+|\phi_2\rangle\otimes|\varphi_2\rangle$$

（2）**不可交换性**。

$$|\phi\rangle\otimes|\varphi\rangle \neq |\varphi\rangle\otimes|\phi\rangle$$

（3）**标量相乘**。

$$c|\phi\rangle\otimes|\varphi\rangle = |\phi\rangle\otimes c|\varphi\rangle$$

在量子力学中我们经常遇到多个系统组成的复合系统，复合系统的希尔伯特空间就是各个子系统希尔伯特空间的张量积。关于张量积空间还有一些其它的运算规则，特别是关于内积的运算规则，感兴趣的同学可以自己查阅相关文献。

■ 对易式和反对易式

◆ 两个算子A和B的对易式（commutator）定义为

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

若[A,B]=0，则说明A和B是对易的

◆ 两个算子A和B的反对易式（anti-commutator）定义为

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

如果{A,B}=0，则A和B反对易

◆ **定理（同时对角化定理）**设A和B是Hermite算子，当且仅当存在一个标准正交基，使A和B在这个基下同时是对角的，则[A,B]=0,在这种情况下，A和B称为可同时对角化。

量子符号及其运算简介

- **常见记号**

记号	含义
z^*	复数 z 的复共轭，例如：$(1+i)^*=1-i$
$\lvert\psi\rangle$	系统的状态向量（Hilbert 空间中的一个列向量）
$\langle\psi\rvert$	$\lvert\psi\rangle$ 的对偶向量（$\lvert\psi\rangle$ 的转置加复共轭）
$\langle\phi\vert\psi\rangle$	向量 $\lvert\phi\rangle$ 和 $\lvert\psi\rangle$ 的内积
$\lvert\phi\rangle\otimes\lvert\psi\rangle$	$\lvert\phi\rangle$ 和 $\lvert\psi\rangle$ 的张量积
$\lvert\phi\rangle\lvert\psi\rangle$	$\lvert\phi\rangle$ 和 $\lvert\psi\rangle$ 的张量积的缩写
A^*	矩阵 A 的复共轭
A^{T}	矩阵 A 的转置
$A^\dagger$	矩阵 A 的厄米共轭，$A^\dagger=(A^{\mathrm{T}})^*$
$\langle\phi\vert A\vert\psi\rangle$	向量 $\lvert\phi\rangle$ 和 $A\lvert\psi\rangle$ 的内积，或者 $A^\dagger\lvert\phi\rangle$ 和 $\lvert\psi\rangle$ 的内积

$\lvert\phi\rangle\langle\psi\rvert$ 称为外积

- **作业：**
- 练习2.2, 2.11, 2.20, 2.26, 2.40