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）

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**：$z^{-1} = \dfrac{z^*}{|z|^2} = \dfrac{x - iy}{x^2 + y^2}$
- **指数形式**：$z = |z|e^{i\theta}$，其中 $\theta = \arg(z) = \arctan(y/x)$

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

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）

$$\langle\psi|=(|\psi\rangle)^\dagger=\begin{pmatrix}a_1^* & a_2^* & \cdots & a_n^*\end{pmatrix}$$

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：

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

Hadamard（哈达玛）基：

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

Y 基：

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

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**：$\mathrm{tr}(A) = \sum_i A_{ii}$，满足 $\mathrm{tr}(AB) = \mathrm{tr}(BA)$
- **行列式**：$\det(A)$，若 $\det(A) \neq 0$ 则 A 可逆
- **不可交换性**：一般有 $AB \neq BA$

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。

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**：$I = \mathrm{diag}(1, 1, \ldots, 1)$
- **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）

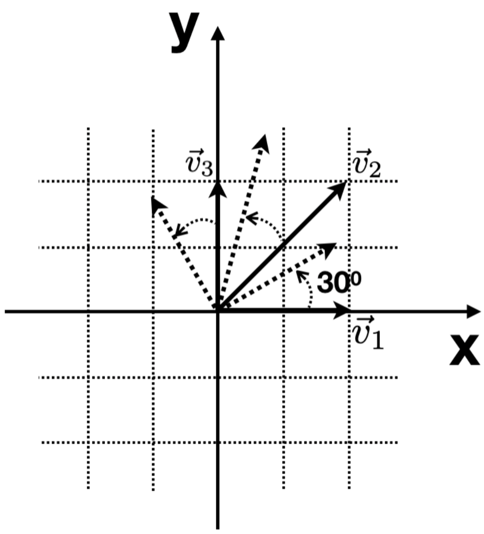

Figure 1: 二维向量旋转/线性变换的几何直观示意。

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

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

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

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

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

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

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 $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$ ✓

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**：

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

特别地，若 A 为厄米算符（$A^\dagger = A$），则

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

推导：

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

因此它等于自身的复共轭，必为实数。

范数（norm）与归一化

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

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：$\langle\tilde{\psi}|\tilde{\psi}\rangle = \frac{1}{3} \cdot 3 = 1$ ✓

2.5 【背】外积（Outer Product）与投影

定义

$$|u\rangle\langle v| \quad \text{是一个矩阵（算符）}$$

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：$\langle v| = (|v\rangle)^\dagger = \sum_j v_j^* \langle j|$，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 $\{|e_1\rangle, \ldots, |e_n\rangle\}$ 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 $\{|e_1\rangle, \ldots, |e_n\rangle\}$ 是正交归一基，则单位算符可以表示为:

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

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 $\boxed{c_k = \langle e_k|\psi\rangle}$。

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：

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

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

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

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**

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

则上述展开公式可写成

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

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

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

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：

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

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 $\vec{c} = (c_1, \ldots, c_n)^T$，在新基下展开系数为 $\vec{c}' = (c'_1, \ldots, c'_n)^T$，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 $I = \sum_i |e_i\rangle\langle e_i|$：

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

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

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

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：

$$U_{11} = \langle 0|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad U_{21} = \langle 1|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$U_{12} = \langle 0|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad U_{22} = \langle 1|-\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

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

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

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**：

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

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。

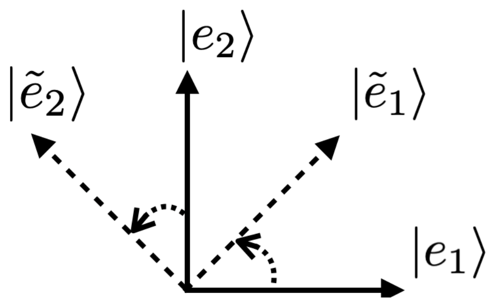

Figure 2: 不同正交基之间的基变换示意（$\{|e_i\rangle\}$ 与 $\{|\tilde{e}_i\rangle\}$）。

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：

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

波函数与归一化

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

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

$$A\left(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle\right) = c_1 A|\psi_1\rangle + c_2 A|\psi_2\rangle$$

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/本征向量定义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。

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：

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

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。

3.2 【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：

$$H = U\,\mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)\,U^\dagger$$

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：

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

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。

3.3 【背】酉算符（Unitary / 幺正 Operators）

定义 若 $U^\dagger U = UU^\dagger = I$，则称 U 为酉算符（或幺正算符）。

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 $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, \ldots, |u_n\rangle\}$ 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

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）。

3.4 【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**

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

则上述展开公式可写成

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

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

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

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：

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

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 $\vec{c} = (c_1, \ldots, c_n)^T$，$A|\psi\rangle$ 的展开系数为 $\vec{c}\,' = (c'_1, \ldots, c'_n)^T$，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

$$c_i' = \sum_j A_{ij}^{(e)} c_j \quad \Longleftrightarrow \quad \vec{c}\,' = A^{(e)}\vec{c}$$

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。

3.5 【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

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

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

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

因此

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

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。

3.6 【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 $\vec{c} = (c_1, c_2, \ldots, c_n)^T$，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

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

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 $\vec{c}(t) = (c_1(t), \ldots, c_n(t))^T$，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 $\langle e_k|$:

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

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）。

3.7 【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：

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

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。

3.8 【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：

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

3.9 【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 σ_x, σ_y, σ_z 指的就是这些矩阵。

性质

- 都是厄米的：$\sigma_i = \sigma_i^\dagger$
- 都是酉的：$\sigma_i^2 = I$
- 无迹：$\mathrm{tr}(\sigma_i) = 0$
- 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

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

Pauli 矩阵的本征态（补充）

$$\sigma_z:\ |0\rangle, |1\rangle; \qquad \sigma_x:\ |+\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}},\ |-\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

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

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

$$\boxed{A|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle}$$

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：

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

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:

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

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:

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

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

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 $|u_1\rangle$：

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

2. 从 $|u_2\rangle$ 中减去 $|e_1\rangle$ 方向的投影：
计算内积：$\langle e_1|u_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(1+0+1) = \frac{2}{\sqrt{3}}$

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

$$= \begin{pmatrix}1-2/3\\0-2/3\\1-2/3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1/3\\-2/3\\1/3\end{pmatrix}$$

3. 归一化：

$$\||u_2'\rangle\| = \sqrt{(1/3)^2+(-2/3)^2+(1/3)^2} = \sqrt{1/9+4/9+1/9} = \sqrt{6/9} = \sqrt{2/3}$$

$$|e_2\rangle = \frac{|u_2'\rangle}{\||u_2'\rangle\|} = \sqrt{\frac{3}{2}}\begin{pmatrix}1/3\\-2/3\\1/3\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix}1\\-2\\1\end{pmatrix}$$

验证正交性：

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

总结：完整的正交归一本征基为

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

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 $\{|\phi_1\rangle, \ldots, |\phi_n\rangle\}$ 和实本征值 $\{\lambda_1, \ldots, \lambda_n\}$ 使得

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

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 $\{|\phi_1\rangle,\ldots,|\phi_n\rangle\}$ 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
$$U = \big(|\phi_1\rangle\ |\phi_2\rangle\ \cdots\ |\phi_n\rangle\big)$$
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
$$H\big(|\phi_1\rangle\ \cdots\ |\phi_n\rangle\big) = \big(H|\phi_1\rangle\ \cdots\ H|\phi_n\rangle\big),$$
而 $\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1,\ldots,\lambda_n)$ 为对角矩阵，因此
$$\big(|\phi_1\rangle\ \cdots\ |\phi_n\rangle\big)\Lambda = \big(\lambda_1|\phi_1\rangle\ \cdots\ \lambda_n|\phi_n\rangle\big).$$
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
$$U^\dagger HU = \Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1,\ldots,\lambda_n)$$
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

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

其中 $\mathrm{span}\{\cdots\}$ 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 $\mathcal{I}_\lambda$（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，$P_\lambda$ 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

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

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

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

对应的矩阵形式为

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

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 $\mathrm{span}\{|e_1\rangle, |e_2\rangle\}$ 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：

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

(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：

1. 验证厄米性：$H^\dagger = \begin{pmatrix}1 & -(-i)^*\\ i^* & 3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 & i\\-i & 3\end{pmatrix} = H$ ✓
2. 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

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

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

4. 类似方法求 $|\phi_+\rangle$ 或利用正交性构造

5 【背】张量积（Tensor Product）

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。

5.2 【背】运算规则

双线性性

$$(c|v\rangle) \otimes |w\rangle = c(|v\rangle \otimes |w\rangle) = |v\rangle \otimes (c|w\rangle) \tag{9}$$
$$(|v_1\rangle + |v_2\rangle) \otimes |w\rangle = |v_1\rangle \otimes |w\rangle + |v_2\rangle \otimes |w\rangle \tag{10}$$
$$|v\rangle \otimes (|w_1\rangle + |w_2\rangle) = |v\rangle \otimes |w_1\rangle + |v\rangle \otimes |w_2\rangle \tag{11}$$

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

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

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

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

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）

$$(A \otimes B)^\dagger = A^\dagger \otimes B^\dagger, \qquad \mathrm{tr}(A \otimes B) = \mathrm{tr}(A)\,\mathrm{tr}(B)$$

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

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

$$|00\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|01\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|10\rangle = |1\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|11\rangle = |1\rangle \otimes |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

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:

$$\sigma_x \otimes I = \begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0&0&1&0\\0&0&0&1\\1&0&0&0\\0&1&0&0\end{pmatrix}$$

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

5.4 【了解】Bell 态（纠缠态例子）

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

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

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

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

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

- $[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$（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）
- $[\sigma_i, I] = 0$（任何算符与单位矩阵对易）

例题

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

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

7 【背】重要不等式

7.1 【背】Cauchy-Schwarz 不等式

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

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

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

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）。

归一化与全局相位

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

全局相位 $e^{i\gamma}$ 不影响任何测量概率；**相对相位**才是可观测的。

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。**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
若测得自旋向上的概率为 1/3、向下为 2/3，则可写

$$|\psi\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}|0\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|1\rangle$$

相对相位会影响干涉，但不改变单次测量的概率。

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

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

施特恩–盖拉赫（亦称施特恩-格拉赫实验）（直观起点） 高温银原子束穿过非均匀磁场后**分裂为两束**，而非经典预期的连续条纹。这表明自旋具有**离散**取值（如 $\pm\frac{1}{2}$），两能级系统可用二维希尔伯特空间描述，为量子比特提供物理直觉。

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。

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。

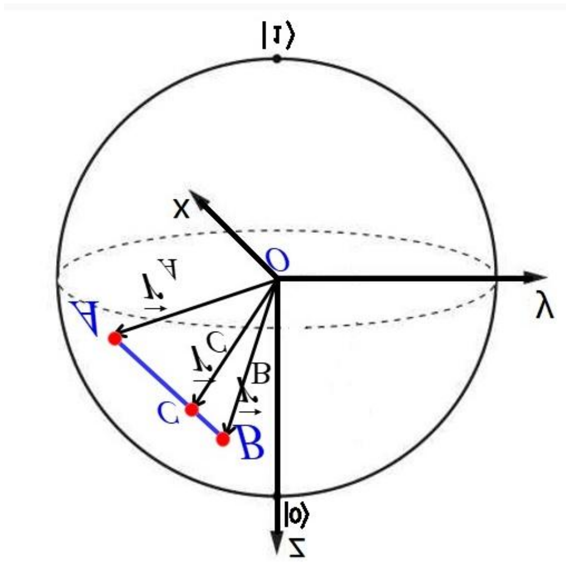

Figure 3: Bloch 球：单比特纯态对应球面点，混态对应球内点。

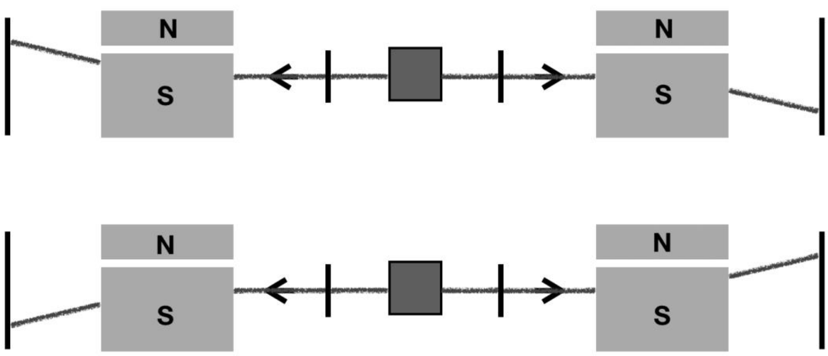

Figure 4: 施特恩–盖拉赫实验装置示意：非均匀磁场导致自旋分束。

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。

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：

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

定义 POVM 元素 $E_m = M_m^\dagger M_m$。

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

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：$\{E,\ I-E\}$。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。

【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。

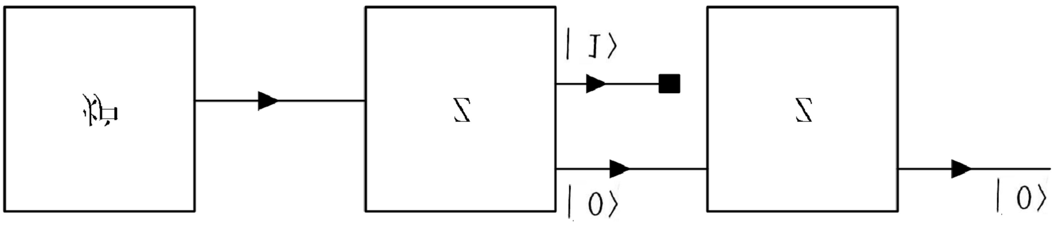

Figure 5: 测量的间接模型：系统与辅助体系经酉演化后进行读出。

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 $\mathrm{tr}(\rho)$ 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

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

并可写成

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

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

$$M=\sum_m mP_m,\quad P_mP_n=\delta_{mn}P_m,\quad \sum_m P_m=I$$

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 $P_m=|m\rangle\langle m|$，

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

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 $1/2$。

【了解】施特恩–盖拉赫测量模型（补充） 沿 z 方向的 SG 装置对应投影算符

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

对自旋态测量会将其塌缩到 $|0\rangle$ 或 $|1\rangle$。若改为沿 x 方向测量，则投影算符为 $|+\rangle\langle +|$ 与 $|-\rangle\langle -|$，可用 H 门先把 x 基旋回到 z 基再测量。

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：$|000\rangle, \ldots, |111\rangle$（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。

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

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。

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

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

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

测量其中一个自旋为 $|0\rangle$（向上），另一个必为 $|1\rangle$（向下），呈现完全反相关。

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

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

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

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

位置与动量算符

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

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 $H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$，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：

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

一维谐振子 能级为

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$P = |\psi_1 + \psi_2|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + 2\mathrm{Re}(\psi_1^*\psi_2)$$

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

$$c'_j = \sum_i U_{ji} c_i \quad \Longleftrightarrow \quad \vec{c}\,' = U\vec{c}$$

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

$$A^{(b)} = UA^{(a)}U^\dagger$$

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

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}, \qquad \vec{c}\,' = U\vec{c}$$

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 $A^{(b)} = UA^{(a)}U^\dagger$，因此 Z 在 Hadamard 基下变为

$$UZU^\dagger = X$$

术语对照 课件中常写“么正变换”，即**幺正/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。

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

16 【背】密度算子与混合态

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）
- $\mathrm{tr}(\rho) = 1$
- 纯态判据：$\rho^2 = \rho$ 或 $\mathrm{tr}(\rho^2) = 1$

混态满足 $\mathrm{tr}(\rho^2) < 1$。

迹的基不变性（补充） 对任意酉变换 U，有 $\mathrm{tr}(U\rho U^\dagger) = \mathrm{tr}(\rho)$，因此 $\mathrm{tr}(\rho) = 1$ 与基的选择无关。

纯度的不变性（补充） 纯度 $\mathrm{tr}(\rho^2)$ 在酉演化下保持不变：$\mathrm{tr}((U\rho U^\dagger)^2) = \mathrm{tr}(\rho^2)$。

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） 密度矩阵的**非对角元**描述量子相干。以单比特为例，

$$|+\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \Rightarrow \rho_+ = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

而**经典混合** $\rho_{\mathrm{mix}} = \frac{1}{2}(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) = \frac{1}{2}I$ 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

$$\mathrm{tr}(\rho^2) = \frac{1 + |\vec{r}|^2}{2}$$

Bloch 向量可由

$$r_i = \mathrm{tr}(\rho\, \sigma_i)$$

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

$$\langle A \rangle = \mathrm{tr}(\rho A), \quad \rho' = U\rho U^\dagger$$

若 $U = \exp(-\frac{i}{\hbar}Ht)$，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。

约化密度算子（偏迹） 对复合系统 AB 的密度算子 ρ_{AB}，子系统 A 的约化态为

$$\rho_A = \mathrm{tr}_B(\rho_{AB})$$

在 B 的正交归一基 $\{|b_k\rangle\}$ 下可写为

$$\rho_A = \sum_k (I \otimes \langle b_k|)\, \rho_{AB}\, (I \otimes |b_k\rangle)$$

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：

$$\langle A \rangle = \mathrm{tr}_{AB}(\rho_{AB}\, A \otimes I) = \mathrm{tr}_A(\rho_A A)$$

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

$$\mathrm{tr}(\rho_{AB} A \otimes B) = \mathrm{tr}(\rho_A A)\, \mathrm{tr}(\rho_B B)$$

例题

Bell 态的约化密度矩阵
设 $|\Phi^+\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}$，

$$\rho_{AB} = |\Phi^+\rangle\langle\Phi^+|, \quad \rho_A = \mathrm{tr}_B(\rho_{AB}) = \frac{1}{2}I$$

说明纠缠态的子系统表现为混态。

【了解】纠缠判据（纯态）（补充） 对纯态 $|\psi\rangle_{AB}$，若其约化态满足

$$\mathrm{tr}(\rho_A^2) = 1$$

则 $|\psi\rangle_{AB}$ 为可分态；若 $\mathrm{tr}(\rho_A^2) < 1$，则为纠缠态。

【了解】Schmidt 分解（补充） 任意纯态 $|\psi\rangle_{AB}$ 都可写成

$$|\psi\rangle_{AB} = \sum_k \sqrt{\lambda_k}\, |u_k\rangle_A \otimes |v_k\rangle_B, \quad \lambda_k \geq 0, \ \sum_k \lambda_k = 1$$

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:

$$S(\rho_A) = -\mathrm{tr}(\rho_A \log \rho_A)$$

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**：

$$\sum_{\mu \in \{\Phi^{\pm}, \Psi^{\pm}\}} |\mu\rangle\langle\mu| = I$$

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）。

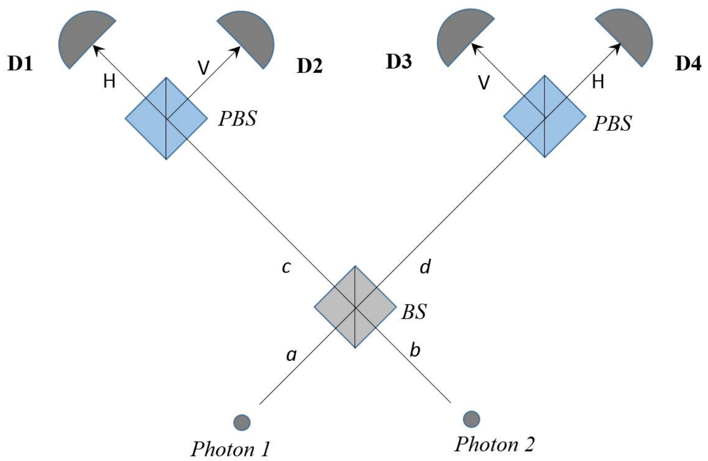

Figure 6: Bell 态测量的光学干涉装置示意（分束器 + 偏振分束器 + 探测器）。

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）

$$\begin{array}{c|c} \text{经典比特} & \text{Alice 操作} \\ \hline 00 & I \\ 01 & X \\ 10 & Z \\ 11 & iY = ZX \end{array} \quad \Rightarrow \quad \text{得到四个 Bell 态之一}$$

对应关系为:

$$00 \to |\Phi^+\rangle, \quad 01 \to |\Psi^+\rangle, \quad 10 \to |\Phi^-\rangle, \quad 11 \to |\Psi^-\rangle$$

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，再由线性性扩展到任意叠加态。

20.2 【背】常用单比特门

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

$$Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}, \quad R_\phi = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\phi} \end{pmatrix}$$

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{pmatrix}$$

【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）

$$R_z(\theta) = \begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2} \end{pmatrix}, \qquad R_x(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -i\sin\frac{\theta}{2} \\ -i\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

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）：

$$|c, a, b\rangle \mapsto |c,\ a,\ b\rangle\ (c = 0), \qquad |c, a, b\rangle \mapsto |c,\ b,\ a\rangle\ (c = 1)$$

【了解】Toffoli 真值表（补充）

$$|000\rangle \to |000\rangle,\ |001\rangle \to |001\rangle,\ |010\rangle \to |010\rangle,\ |011\rangle \to |011\rangle,$$

$$|100\rangle \to |100\rangle,\ |101\rangle \to |101\rangle,\ |110\rangle \to |111\rangle,\ |111\rangle \to |110\rangle$$

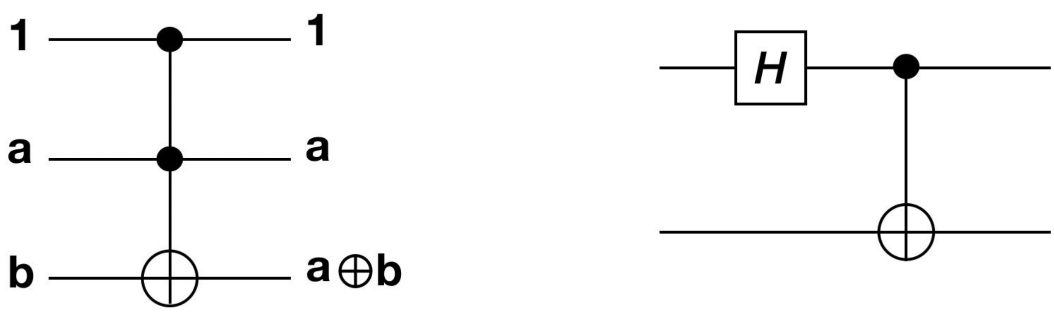

Figure 7: 受控门示意：左为 CNOT 逻辑（$a \oplus b$），右为 H+CNOT 产生纠缠的线路。

【背】CNOT 矩阵表示

$$[\mathrm{CNOT}]=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&0&1\\0&0&1&0\end{pmatrix}$$

其作用：$|00\rangle\to|00\rangle$，$|01\rangle\to|01\rangle$，$|10\rangle\to|11\rangle$，$|11\rangle\to|10\rangle$。

$$|a\rangle|b\rangle\mapsto|a\rangle|a\oplus b\rangle$$

$$\mathrm{CNOT}^2=I\quad(\text{自逆})$$

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：

$$\mathrm{SWAP}=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$$

常用分解为三次 CNOT：$\mathrm{SWAP}=(\mathrm{CNOT}_{12})(\mathrm{CNOT}_{21})(\mathrm{CNOT}_{12})$。

$$\mathrm{SWAP}=(\mathrm{CNOT}_{21})(\mathrm{CNOT}_{12})(\mathrm{CNOT}_{21})$$

$$\mathrm{SWAP}^2=I$$

【了解】SWAP 真值表（补充）

$$|00\rangle\to|00\rangle,\quad|01\rangle\to|10\rangle,\quad|10\rangle\to|01\rangle,\quad|11\rangle\to|11\rangle$$

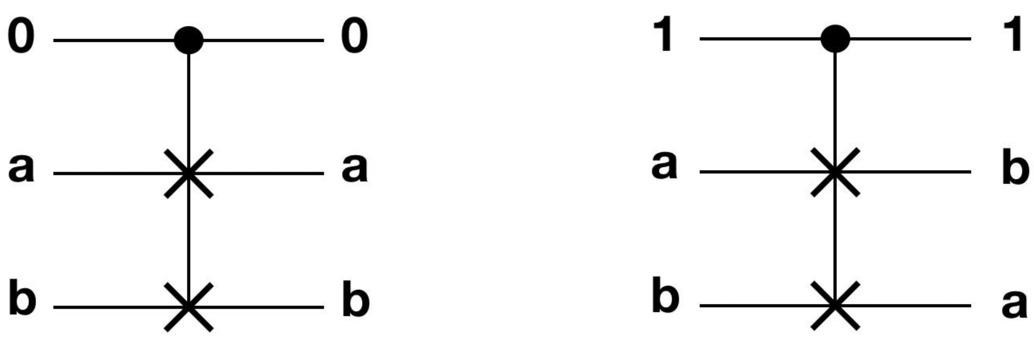

Figure 8: Fredkin（受控 SWAP）门：控制为 1 时交换两条线，控制为 0 时保持不变。

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）：

$$|00\rangle\xrightarrow{H\otimes I}\frac{|00\rangle+|10\rangle}{\sqrt{2}}\xrightarrow{\mathrm{CNOT}}\frac{|00\rangle+|11\rangle}{\sqrt{2}}=|\Phi^+\rangle$$

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 $\{H, S, T, \mathrm{CNOT}\}$。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。

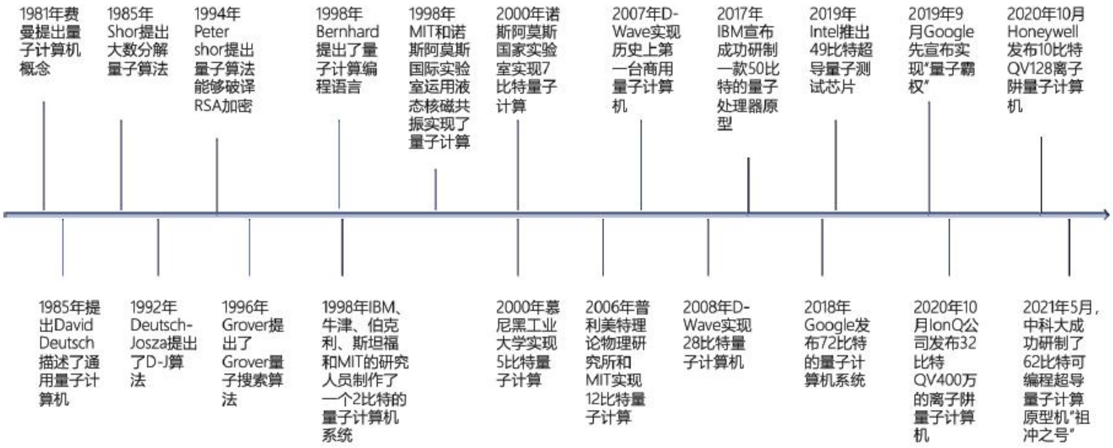

Figure 9: 量子计算发展里程碑时间线（课件示意）。

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

$$\text{初始化} \to \text{Hadamard 叠加} \to \text{Oracle 标记} \to \text{扩散算子放大} \to \text{测量}$$

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

$$D = 2|s\rangle\langle s| - I, \qquad |s\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{x=0}^{N-1}|x\rangle$$

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

$$P_k = \sin^2\big((2k+1)\theta\big)$$

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

$$\mathrm{QFT}_N|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k=0}^{N-1} e^{2\pi ixk/N}|k\rangle$$

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

$$\mathrm{QFT}_N^\dagger|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{x=0}^{N-1} e^{-2\pi ixk/N}|x\rangle$$

因此 QFT_N 是酉算符，且 $\mathrm{QFT}_N^{-1} = \mathrm{QFT}_N^\dagger$。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：

$$|\psi\rangle|0\rangle \nrightarrow |\psi\rangle|\psi\rangle \quad (\text{对所有}|\psi\rangle)$$

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。

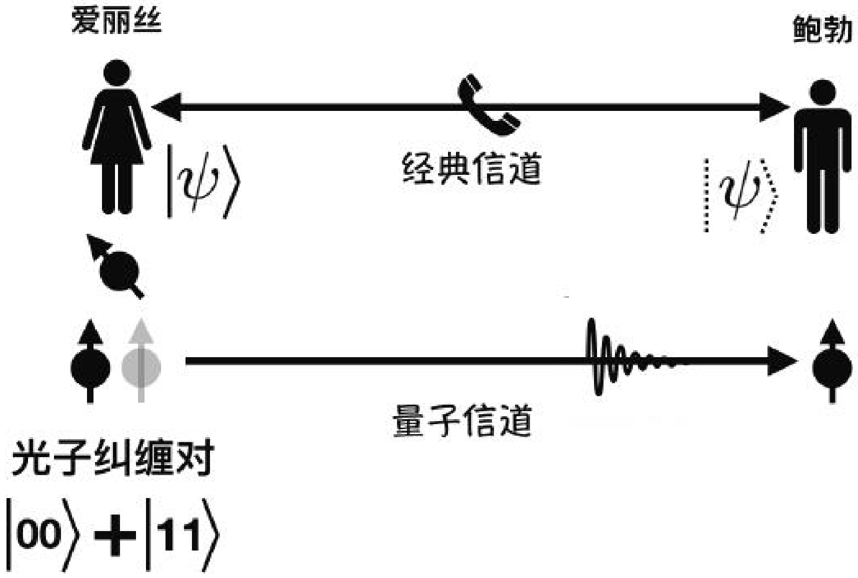

Figure 10: 量子隐形传态示意：纠缠对 + 经典信道共同完成态的传输。

【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。

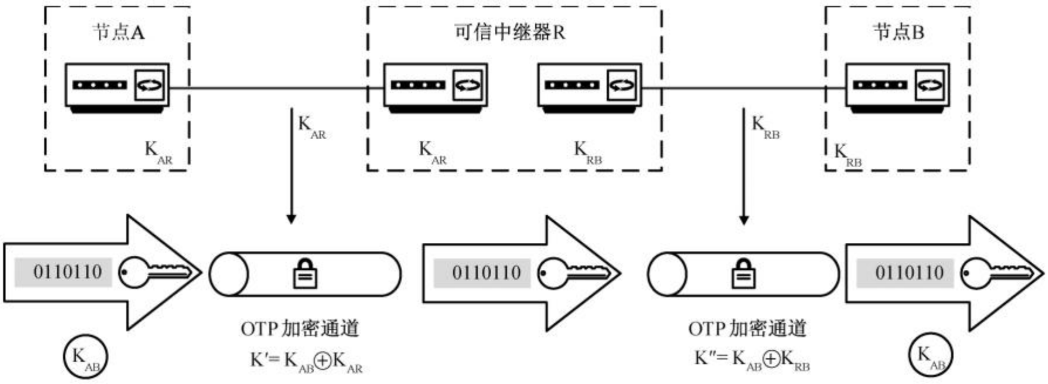

Figure 11: 可信中继（Trusted Relay）量子网络的示意。

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。

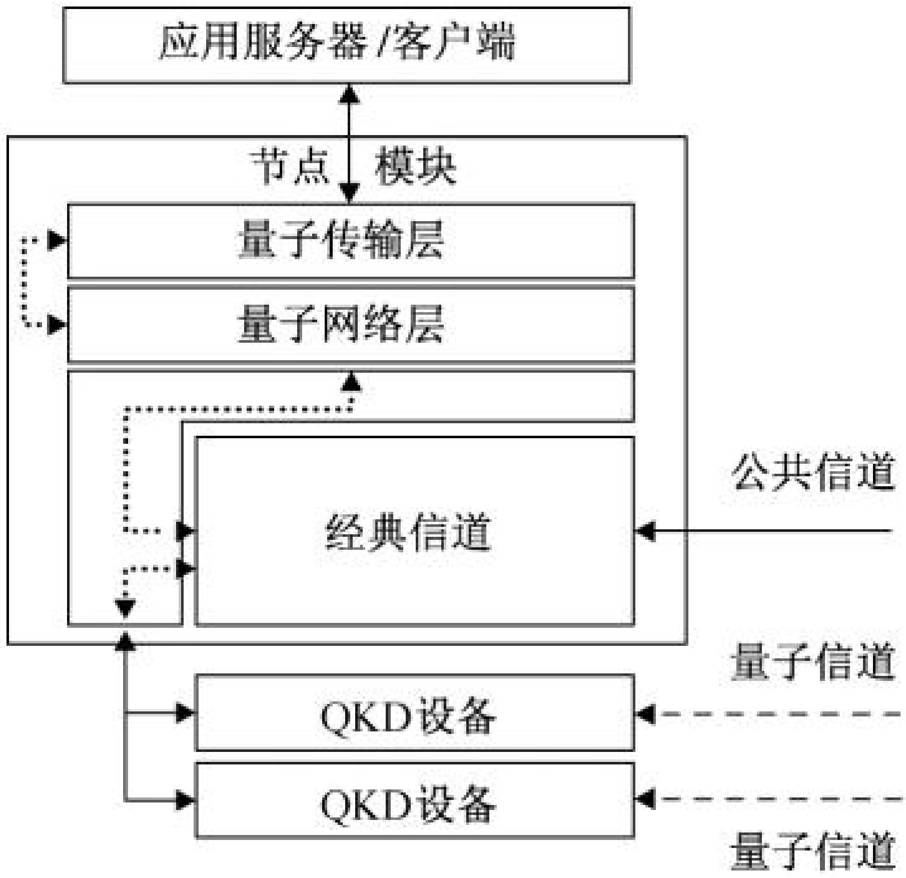

Figure 12: 量子通信协议栈与 QKD 设备位置（课件示意）。

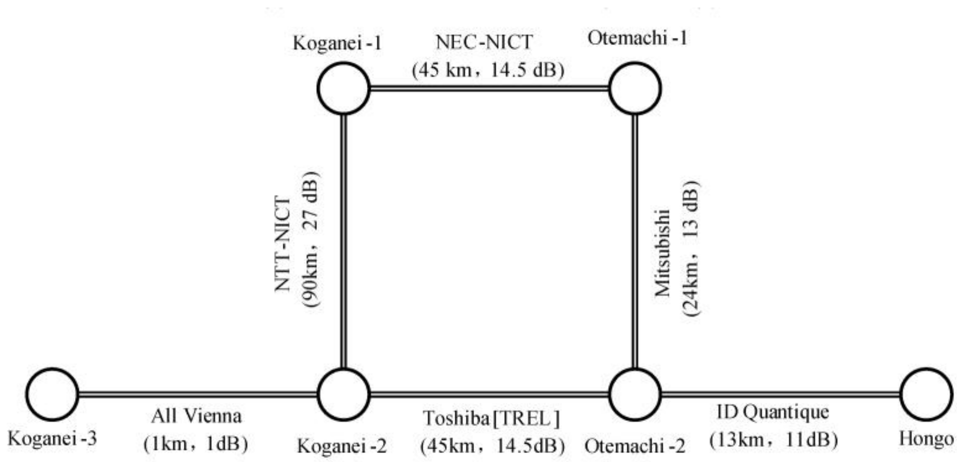

Figure 13: 量子通信网络拓扑示例（东京 QKD 网络示意）。

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 → 可观测量，酉算符 → 演化，张量积 → 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 $|\Phi^+\rangle$ 等纠缠态练手
- 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 $\to$ 演化 $\to$ 测量 $\to$ 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）：

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

  $[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$，$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij} I$。
- **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**：$|\langle\phi|\psi\rangle| \le \||\phi\rangle\|\,\||\psi\rangle\|$。
- **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**：$p(m) = \langle\psi|M_m^\dagger M_m|\psi\rangle$，$|\psi_m\rangle = \dfrac{M_m|\psi\rangle}{\sqrt{p(m)}}$；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**：$\rho = \sum_k p_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k|$，$\mathrm{tr}(\rho) = 1$，$\langle A\rangle = \mathrm{tr}(\rho A)$，$\rho_A = \mathrm{tr}_B(\rho_{AB})$。
- **CNOT 矩阵**：

$$[\mathrm{CNOT}] = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$