

# 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）
$\Psi$	$\psi$	psi	sai（赛）
$\Phi$	$\phi, \varphi$	phi	fai（fei）
$\Theta$	$\theta$	theta	sita（西塔）
$\Lambda$	$\lambda$	lambda	lamuda（兰姆达）
$\Sigma$	$\sigma$	sigma	xigema（西格玛）
$\Omega$	$\omega$	omega	omiga（欧米伽）
$\Delta$	$\delta$	delta	delta（德尔塔）
$\Gamma$	$\gamma$	gamma	gama（伽玛）
$\Pi$	$\pi$	pi	pai（派）
—	$\alpha$	alpha	aerfǎ（阿尔法）
—	$\beta$	beta	beita（贝塔）
—	$\gamma$	gamma	gama（伽玛）
—	$\epsilon, \varepsilon$	epsilon	yipuxilóng（伊普西龙）
—	$\eta$	eta	yita（伊塔）
—	$\kappa$	kappa	kapa（卡帕）
—	$\mu$	mu	miù（谬）
—	$\nu$	nu	niǔ（纽）
—	$\rho$	rho	ròu（肉）
—	$\tau$	tau	tao（涛）
—	$\chi$	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”
- $\lambda$ ：本征值（eigenvalue），读作“兰姆达”
- $\sigma$ ：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

<b>1</b>	<b>【背】复数 (Complex Numbers)</b>	<b>4</b>
1.1	【背】定义与基本运算	4
<b>2</b>	<b>【背】向量空间与 Dirac 记号</b>	<b>5</b>
2.1	【背】向量与矩阵	5
2.2	【背】线性空间的基本概念	7
2.3	【背】厄米共轭 (Hermitian Conjugate)	8
2.4	【背】内积 (Inner Product)	9
2.5	【背】外积 (Outer Product) 与投影	10
2.6	【背】正交归一基 (Orthonormal Basis)	11
2.7	【背】基变换与酉矩阵	13
2.8	【了解】离散谱与连续谱 (Dirac $\delta$ 归一化)	15
<b>3</b>	<b>【背】线性算符 (Linear Operators)</b>	<b>15</b>
3.1	【了解】基本概念	15
3.2	【背】厄米算符 (Hermitian Operators)	17
3.3	【背】酉算符 (Unitary / 么正 Operators)	17
3.4	【背】算符的矩阵表示 (Matrix Elements)	18
3.5	【背】算符矩阵表示的基变换	21
3.6	【了解】用算符矩阵表示理解向量的基变换	22
3.7	【背】期望值与演化的矩阵形式	23
3.8	【背】厄米算符的矩阵性质	24
3.9	【了解】连续基中的矩阵表示	26
3.10	【背】Pauli 矩阵	27
<b>4</b>	<b>【背】本征值与本征向量 (Eigenvalues &amp; Eigenvectors)</b>	<b>28</b>
4.1	【背】定义与几何意义	28
4.2	【背】厄米算符的谱定理	30
4.3	【背】 $2 \times 2$ 厄米矩阵的本征值公式	34
<b>5</b>	<b>【背】张量积 (Tensor Product)</b>	<b>35</b>
5.1	【背】定义与维度	35
5.2	【背】运算规则	36
5.3	【背】量子比特系统	37
5.4	【了解】Bell 态 (纠缠态例子)	38
<b>6</b>	<b>【背】对易子 (Commutators)</b>	<b>38</b>
6.1	【背】定义	38
6.2	【背】同时对角化定理	38
6.3	【背】重要例子	38

<b>7</b>	<b>【背】重要不等式</b>	<b>39</b>
7.1	【背】Cauchy-Schwarz 不等式	39
7.2	【了解】三角不等式	39
<b>8</b>	<b>【背】量子力学基本假设 (Postulates)</b>	<b>39</b>
8.1	【背】公设一 (假设一): 状态空间与量子态	39
8.2	【背】公设二 (假设二): 演化 (Unitary Evolution)	42
8.3	【背】公设三 (假设三): 测量 (Measurement)	42
8.4	【背】公设四 (假设四): 复合系统 (Composite Systems)	44
<b>9</b>	<b>【了解】波函数与连续表象</b>	<b>45</b>
<b>10</b>	<b>【了解】定态薛定谔方程与典型模型</b>	<b>47</b>
10.1	【了解】定态薛定谔方程	47
10.2	【了解】本征函数性质与边界条件	47
10.3	【了解】典型模型 (速记)	47
<b>11</b>	<b>【了解】算符、对易关系与期望值演化</b>	<b>48</b>
<b>12</b>	<b>【了解】薛定谔/海森堡/相互作用表象</b>	<b>48</b>
<b>13</b>	<b>【背】态叠加与概率幅度规则</b>	<b>49</b>
<b>14</b>	<b>【背】表象与酉变换</b>	<b>49</b>
<b>15</b>	<b>【了解】位置/动量表象与傅里叶变换</b>	<b>50</b>
<b>16</b>	<b>【背】密度算子与混合态</b>	<b>50</b>
<b>17</b>	<b>【了解】测不准关系 (补充)</b>	<b>53</b>
<b>18</b>	<b>【了解】量子纠缠、EPR 佯谬与贝尔不等式</b>	<b>53</b>
18.1	【了解】纠缠态的定义	53
18.2	【了解】EPR 佯谬	55
18.3	【了解】贝尔不等式 (CHSH 形式)	55
<b>19</b>	<b>【了解】量子超密编码 (Superdense Coding)</b>	<b>55</b>
<b>20</b>	<b>【了解】量子线路与量子逻辑门</b>	<b>56</b>
20.1	【了解】线路模型	56
20.2	【背】常用单比特门	56
20.3	【背】受控运算	57
20.4	【了解】可逆性与辅助比特	59
20.5	【了解】通用门集	59
<b>21</b>	<b>【了解】量子计算概述与算法</b>	<b>59</b>
21.1	【了解】经典计算瓶颈	59
21.2	【了解】动机与基本需求	59
21.3	【了解】两类量子计算机	60
21.4	【了解】典型量子算法	60
21.5	【了解】量子计算平台概览 (常见实现)	61
21.6	【了解】量子退火与应用示例 (概览)	61

<b>22 【了解】量子通信</b>	<b>61</b>
22.1 【了解】基本概念	61
22.2 【了解】量子隐形传态 (Teleportation)	62
22.3 【了解】量子密钥分发 (QKD)	63
22.4 【了解】量子中继与网络	64
22.5 【了解】量子隐形传态研究进展 (课件提要)	66
22.6 【了解】量子通信网络进展 (课件提要)	66
<b>23 【了解】常见题型总结</b>	<b>66</b>

## 1 【背】复数 (Complex Numbers)

### 1.1 【背】定义与基本运算

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

#### 核心运算

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

#### 重要性质

$$(z^*)^* = z \quad (1)$$

$$(z + w)^* = z^* + w^* \quad (2)$$

$$(z - w)^* = z^* - w^* \quad (3)$$

$$(zw)^* = z^*w^* \quad (4)$$

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

$$|zw| = |z||w| \quad (6)$$

$$|e^{i\theta}| = 1 \quad (7)$$

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

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

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

从而

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

由此得到 De Moivre 公式:

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

### 例题

计算  $(1+i)^8$

解:

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

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

### 例题

求  $z = 3 + 4i$  的逆

解:

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

## 2 【背】向量空间与 Dirac 记号

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

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

### 2.1 【背】向量与矩阵

列向量 (ket)

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

行向量 (bra)

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

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

常用 ket (计算基与相关基) 单比特计算基:

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

Hadamard (哈达玛) 基:

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

Y 基:

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

常用两比特计算基（张量积）：

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

常用纠缠态（Bell 态）

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

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

$$([A][B])_{ij} = \sum_{k=1}^n [A]_{ik}[B]_{kj}$$

**矩阵的基本操作**

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

**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**:  $I = \text{diag}(1, 1, \dots, 1)$
- **对称矩阵**:  $[A] = [A]^T$  (实矩阵情形)
- **逆矩阵**:  $[A][A]^{-1} = [A]^{-1}[A] = I$  (并非所有矩阵都有逆)

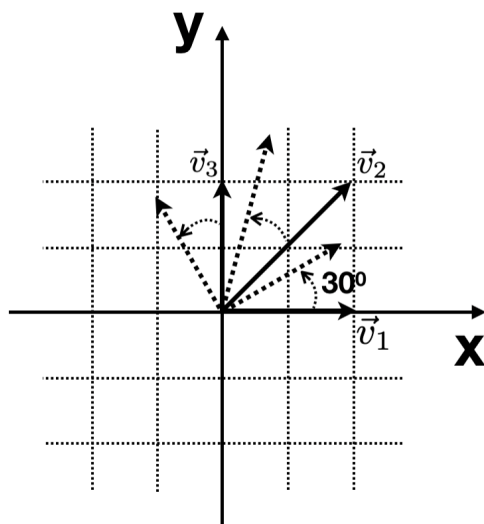


Figure 1: 二维向量旋转/线性变换的几何直观示意。

**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

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

可写成

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

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

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

因此两算符对标准基作用相同，故相等。

**数值例子：**取

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

则

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

所以

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

## 2.2 【背】线性空间的基本概念

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

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

所有线性组合的集合称为该集合的**张成** (span)。

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

**线性无关与线性相关** 若

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

则  $\{|v_j\rangle\}$  线性无关；否则线性相关。

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

**坐标表示** 在基  $\{|e_i\rangle\}$  下，任意向量可表示为

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

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

## 2.3 【背】厄米共轭 (Hermitian Conjugate)

**定义** 对于任意矩阵或算符  $A$ ，其**厄米共轭**（或称共轭转置）记作  $A^\dagger$ 。若  $[A]$  表示  $A$  在某基下的矩阵表示，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  $([A][B])^\dagger = [B]^\dagger[A]^\dagger$ 。

解:

$$[A][B] = \begin{pmatrix} 1 & i \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2+i & 3i \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$$

$$([A][B])^\dagger = \begin{pmatrix} 2-i & 1 \\ -3i & 3 \end{pmatrix}$$

另一方面:

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

$$[B]^\dagger[A]^\dagger = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -i & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2-i & 1 \\ -3i & 3 \end{pmatrix}$$

因此  $([A][B])^\dagger = [B]^\dagger[A]^\dagger$  ✓

## 2.4 【背】内积 (Inner Product)

定义

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

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

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

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

特别地, 若  $A$  为厄米算符 ( $A^\dagger = A$ ), 则

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

推导：

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

因此它等于自身的复共轭，必为实数。

### 范数 (norm) 与归一化

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

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

## 2.5 【背】外积 (Outer Product) 与投影

定义

$|u\rangle\langle v|$  是一个矩阵 (算符)

作用规则

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

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

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

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

这里的共轭来自 bra： $\langle v| = (|v\rangle)^\dagger = \sum_j v_j^* \langle j|$ ，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  $\{|e_1\rangle, \dots, |e_n\rangle\}$  称为**正交归一基**, 如果它们满足:

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

即:

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

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

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

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

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

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

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

这个公式称为**完备关系**或**单位分解**。

## 推导

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

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

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

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

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

因此  $c_k = \langle e_k|\psi\rangle$ 。

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

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

测量后态塌缩为对应本征态  $|e_j\rangle$ 。

## 例题

### 计算基展开

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

**解：**

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

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

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

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

**正交归一基与酉算符** 若将正交归一基按列排成矩阵

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

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

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

## 2.7 【背】基变换与酉矩阵

**正交归一基之间的变换** 设  $\{|e_i\rangle\}$  与  $\{|f_j\rangle\}$  是同一希尔伯特空间中的两组正交归一基, 定义

$$[U]_{ij} = \langle e_i | f_j \rangle$$

则  $[U]$  为酉矩阵, 且

$$|f_j\rangle = \sum_i [U]_{ij} |e_i\rangle$$

若向量在基  $\{|e_i\rangle\}$  下坐标为  $\vec{c}$ , 在基  $\{|f_j\rangle\}$  下坐标为  $\vec{c}'$ , 则

$$\vec{c}' = [U]^\dagger \vec{c}$$

直观上,  $[U]$  的第  $j$  列就是新基向量  $|f_j\rangle$  在旧基  $\{|e_i\rangle\}$  下的坐标; 基变换必须保持内积与长度, 因此对应的坐标变换矩阵必为酉矩阵。

### 推导

**由完备关系得到展开与酉性:**

1) **展开公式** 由于  $\{|e_i\rangle\}$  为正交归一基, 有完备关系

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

因此

$$|f_j\rangle = I|f_j\rangle = \sum_i |e_i\rangle\langle e_i|f_j\rangle = \sum_i [U]_{ij} |e_i\rangle$$

这就得到  $|f_j\rangle = \sum_i [U]_{ij} |e_i\rangle$ 。

2)  $[U]$  为酉矩阵计算

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

因此  $[U]^\dagger [U] = I$ 。同理也可用  $\sum_j |f_j\rangle\langle f_j| = I$  验证  $[U][U]^\dagger = I$ , 故  $[U]$  酉。**含义:**  $[U]$  恰好是“旧基  $\rightarrow$  新基”的坐标变换矩阵, 正交归一基之间的变换必保持内积与范数, 这正是酉矩阵的定义。

3) **坐标变换公式** 令  $c_i = \langle e_i | \psi \rangle$ ,  $c'_j = \langle f_j | \psi \rangle$ , 则

$$c'_j = \sum_i \langle f_j | e_i \rangle c_i = \sum_i [U]_{ji}^\dagger c_i$$

即矩阵形式  $\vec{c}' = [U]^\dagger \vec{c}$ 。

**例：Hadamard（哈达玛）基 定义**

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

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

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

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

$$|f_j\rangle = \sum_i [U]_{ij} |e_i\rangle$$

因此矩阵  $[U]$  的**第  $j$  列**就是  $|f_j\rangle$  在旧基下的坐标。

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$HZH = X$$

这表示“先变基再测量”等价于直接测量另一方向。

### 例题

**示例：用  $H$  将  $Z$  基测量变为  $X$  基测量**

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

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

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

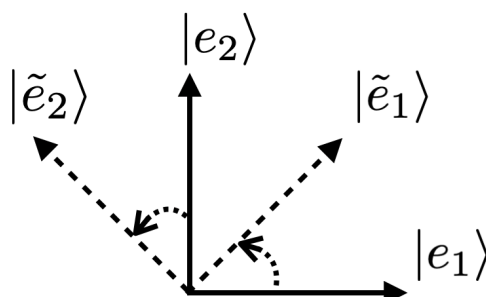


Figure 2: 不同正交基之间的基变换示意 ( $\{|e_i\rangle\}$  与  $\{|\tilde{e}_i\rangle\}$ )。

## 2.8 【了解】离散谱与连续谱 (Dirac $\delta$ 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  $\delta$  函数。两者都是“正交归一”的广义形式。

**连续完备性** 连续基的完备关系写成积分形式：

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

**波函数与归一化**

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

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

**离散与连续的统一表述 (补充)** 常将求和与积分统一写作

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

其中对离散谱该符号代表求和，对连续谱代表积分。

## 3 【背】线性算符 (Linear Operators)

### 3.1 【了解】基本概念

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

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

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

**线性性** 线性算符满足

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

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

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

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

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

若在  $A$  的本征基下 (本征值/本征向量定义见后文**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

$$\langle A \rangle = \sum_j a_j |c_j|^2$$

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

$$[P]^{-1}[A][P] = [D]$$

其中  $[D]$  为对角矩阵，则称  $A$  **可对角化**，也可写成

$$[A] = [P][D][P]^{-1}$$

**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

$$[U]^\dagger[A][U] = [D]$$

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:

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

其中  $[U]$  的列向量为正交归一的本征态。

#### 推导

**证明期望值为实数:**

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

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

#### 例题

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

**解:**

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

因此  $\sigma_z$  是厄米算符。

### 3.3 【背】酉算符 (Unitary / 么正 Operators)

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

### 关键性质

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

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

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

其中  $H$  为厄米算符。

### 推导

证明保持内积:

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

### 例题

验证 Hadamard 门是酉算符

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)

**从向量坐标到算符矩阵: 核心思想** 在上一节, 我们知道给定正交归一基  $\{|e_i\rangle\}$  后, 任意态矢  $|\psi\rangle$  可以用坐标  $c_i = \langle e_i|\psi\rangle$  唯一表示为列向量:

$$|\psi\rangle \longleftrightarrow \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad c_i = \langle e_i|\psi\rangle$$

**本节的核心:** 算符作为线性映射  $A: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ , 在给定基下也有类似的表示——用一个矩阵来完全刻画。思路是:

1. 算符  $A$  作用在基矢  $|e_j\rangle$  上得到新的态矢  $A|e_j\rangle$

2.  $A|e_j\rangle$  可在基  $\{|e_i\rangle\}$  下展开, 其坐标  $([A]_{1j}, [A]_{2j}, \dots)^T$  构成矩阵的第  $j$  列

3.  $n$  个基矢  $\{|e_1\rangle, \dots, |e_n\rangle\}$  对应  $n$  列, 合起来得到  $n \times n$  矩阵  $[A]$

这完全类比于: 向量由其在基下的坐标表示, 算符由其对每个基矢的作用 (表示为坐标) 来表示。

**矩阵元的定义** 设  $\{|e_i\rangle\}$  是正交归一基 ( $\langle e_i|e_j\rangle = \delta_{ij}$ )。

**回顾:** 列向量的坐标是如何定义的? 对任意态矢  $|\psi\rangle$ , 其第  $i$  个坐标定义为

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

**类比延伸:** 算符  $A$  作用在基矢  $|e_j\rangle$  上得到新态矢  $A|e_j\rangle$ , 这个新态矢的第  $i$  个坐标自然应该是

$$\langle e_i|A|e_j\rangle$$

因此, 我们直接定义算符  $A$  在该基下的**矩阵元**为:

$$[A]_{ij} = \langle e_i|A|e_j\rangle$$

其几何意义:

- $[A]_{ij}$  是矩阵  $[A]$  的第  $i$  行第  $j$  列元素
- 第  $j$  列  $([A]_{1j}, [A]_{2j}, \dots, [A]_{nj})^T$  就是  $A|e_j\rangle$  在基  $\{|e_i\rangle\}$  下的坐标向量  
矩阵形式地写:

$$[A] = \begin{pmatrix} [A]_{11} & [A]_{12} & \cdots & [A]_{1n} \\ [A]_{21} & [A]_{22} & \cdots & [A]_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ [A]_{n1} & [A]_{n2} & \cdots & [A]_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} | & | & & | \\ A|e_1\rangle & A|e_2\rangle & \cdots & A|e_n\rangle \\ | & | & & | \end{pmatrix} \text{坐标}$$

即: 矩阵的每一列就是算符作用在对应基矢上的结果的坐标。

**验证定义的合理性:** 利用完备性  $I = \sum_k |e_k\rangle\langle e_k|$ , 可将  $A|e_j\rangle$  展开:

$$A|e_j\rangle = \left( \sum_i |e_i\rangle\langle e_i| \right) A|e_j\rangle = \sum_i |e_i\rangle \langle e_i|A|e_j\rangle = \sum_i [A]_{ij} |e_i\rangle$$

这证实了  $[A]_{ij}$  确实是  $A|e_j\rangle$  的第  $i$  个坐标分量。

## 例题

### 例: 二维算符的矩阵表示

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

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

**步骤 1:** 求第 1 列, 即  $A|e_1\rangle$  的坐标:

$$[A]_{11} = \langle e_1|A|e_1\rangle = 2, \quad [A]_{21} = \langle e_2|A|e_1\rangle = 3$$

**步骤 2:** 求第 2 列, 即  $A|e_2\rangle$  的坐标:

$$[A]_{12} = \langle e_1|A|e_2\rangle = -i, \quad [A]_{22} = \langle e_2|A|e_2\rangle = 5$$

因此矩阵表示为

$$[A] = \begin{pmatrix} 2 & -i \\ 3 & 5 \end{pmatrix}$$

**验证:** 第 1 列  $(2, 3)^T$  确实是  $A|e_1\rangle$  的坐标, 第 2 列  $(-i, 5)^T$  是  $A|e_2\rangle$  的坐标。

**算符对任意态矢的作用** 有了矩阵表示, 算符  $A$  对任意态  $|\psi\rangle = \sum_j c_j |e_j\rangle$  的作用就转化为矩阵乘法。

设  $|\psi\rangle$  的坐标为列向量  $\vec{c} = (c_1, c_2, \dots, c_n)^T$ , 则  $A|\psi\rangle$  的坐标为  $\vec{c}' = [A]\vec{c}$ , 即

$$c'_i = \sum_j [A]_{ij} c_j$$

### 推导

**推导:** 利用线性性和基的展开

$$\begin{aligned} A|\psi\rangle &= A\left(\sum_j c_j |e_j\rangle\right) = \sum_j c_j A|e_j\rangle \\ &= \sum_j c_j \sum_i [A]_{ij} |e_i\rangle \quad (\text{用 } A|e_j\rangle = \sum_i [A]_{ij} |e_i\rangle) \\ &= \sum_i \left(\sum_j [A]_{ij} c_j\right) |e_i\rangle \end{aligned}$$

因此  $A|\psi\rangle$  的第  $i$  个坐标为

$$c'_i = \sum_j [A]_{ij} c_j$$

这正是矩阵乘法  $\vec{c}' = [A]\vec{c}$  的定义。

### 例题

**例: 算符作用的矩阵计算**

沿用上一例, 设  $|\psi\rangle = |e_1\rangle + 2|e_2\rangle$ , 坐标  $\vec{c} = (1, 2)^T$ , 则

$$A|\psi\rangle \text{ 的坐标} = \begin{pmatrix} 2 & -i \\ 3 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 - 2i \\ 13 \end{pmatrix}$$

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:

$$A = \sum_{i,j} [A]_{ij} |e_i\rangle\langle e_j|$$

其中  $[A]_{ij} = \langle e_i | A | e_j \rangle$ 。

### 推导

**推导：**在  $A$  左右两侧插入完备性关系：

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

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， $[A]_{ij}$  是其系数。

### 3.5 【背】算符矩阵表示的基变换

**正交归一基之间的变换** 设  $\{|e_i\rangle\}$  与  $\{|f_j\rangle\}$  是同一希尔伯特空间中的两组正交归一基，定义

$$[U]_{ij} = \langle e_i | f_j \rangle$$

则

$$|f_j\rangle = \sum_i [U]_{ij} |e_i\rangle$$

并且  $[U]^\dagger [U] = I$  (同 2.7 节推导)，因此  $[U]$  是酉矩阵。

**算符矩阵元的定义** 算符  $A$  在两组基下的矩阵元分别为

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

### 推导

**由完备关系得到相似变换：**

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

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

因此

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

这就是同一算符在不同基下矩阵表示的基变换公式。

### 例题

**例：对角化与基变换**

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 【了解】用算符矩阵表示理解向量的基变换

回顾：算符矩阵的“列”是什么 在基  $\{|e_i\rangle\}$  下, 算符矩阵元

$$[A]_{ij} = \langle e_i | A | e_j \rangle$$

的含义是：第  $j$  列就是向量  $A|e_j\rangle$  在旧基下的坐标。

把“换基”看成一个算符 定义酉算符  $U$  把旧基变为新基：

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

于是

$$[U]_{ij} = \langle e_i | U | e_j \rangle = \langle e_i | f_j \rangle$$

这说明：基变换矩阵  $[U]$  的第  $j$  列，就是新基向量  $|f_j\rangle$  在旧基下的坐标。这完全沿用“算符矩阵表示”的思路。

由此得到向量坐标的变换公式 同一个态  $|\psi\rangle$  可以写成

$$|\psi\rangle = \sum_j c_j^{(e)} |e_j\rangle = \sum_j c_j^{(f)} |f_j\rangle = \sum_j c_j^{(f)} U |e_j\rangle$$

在旧基下比较坐标, 得到

$$\vec{c}^{(e)} = [U] \vec{c}^{(f)} \implies \vec{c}^{(f)} = [U]^\dagger \vec{c}^{(e)}$$

也就是说：向量的基变换就是“由算符  $U$  给出的坐标变换”。

### 3.7 【背】期望值与演化的矩阵形式

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

**期望值的矩阵计算** 设态  $|\psi\rangle$  在正交归一基  $\{|e_i\rangle\}$  下的坐标为列向量  $\vec{c} = (c_1, c_2, \dots, c_n)^T$ ，算符  $A$  的矩阵表示为  $[A]$ ，则可观测量  $A$  的期望值可写成矩阵形式：

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \vec{c}^\dagger [A] \vec{c}$$

#### 推导

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

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

其中最后一步就是矩阵乘法  $\vec{c}^\dagger [A] \vec{c}$  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  $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ ，则期望值

$$\langle \sigma_x \rangle = \vec{c}^\dagger \sigma_x \vec{c} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = 1$$

**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  $\vec{c}(t) = (c_1(t), \dots, c_n(t))^T$ ，哈密顿量  $H$  的矩阵表示为  $[H]$ ，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：

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

## 推导

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

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

在两侧左乘  $\langle e_k|$ ：

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

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

$$i\hbar \dot{\vec{c}}(t) = [H] \vec{c}(t)$$

**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：

$$\vec{c}(t) = e^{-i[H]t/\hbar} \vec{c}(0)$$

其中矩阵指数定义为

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

## 例题

**例：二能级系统的演化**

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

演化算符

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

因此

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

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

## 3.8 【背】厄米算符的矩阵性质

厄米算符在量子力学中扮演可观测量的角色，其矩阵表示具有特殊性质。



**厄米矩阵的定义** 若算符  $A = A^\dagger$  (厄米算符), 则在任何正交归一基下, 其矩阵元满足

$$[A]_{ij} = [A]_{ji}^*$$

即矩阵  $[A]$  是厄米矩阵 ( $[A] = [A]^\dagger$ )。

### 推导

**推导矩阵元关系:**

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

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**

$$\begin{aligned} \sigma_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}: \text{显然 } \sigma_x^\dagger = \sigma_x, \text{ 满足 } [A]_{12} = 1 = [A]_{21}^*, [A]_{11} = 0 = [A]_{11}^*, [A]_{22} = 0 = [A]_{22}^*. \\ \sigma_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}: \text{ 对角矩阵且元素为实数, 显然厄米。} \end{aligned}$$

**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  $A|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$ ), 使得在该基下矩阵为对角形式:

$$[A] = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_n \end{pmatrix}$$

主对角元即为本征值  $a_i$  (均为实数)。

### 推导

**验证:** 在本征基下, 矩阵元为

$$[A]_{ij} = \langle a_i | A | a_j \rangle = \langle a_i | (a_j | a_j \rangle) = a_j \langle a_i | a_j \rangle = a_j \delta_{ij}$$

因此只有对角元  $[A]_{ii} = a_i$  非零, 矩阵为对角矩阵。

**谱分解** 利用本征基, 厄米算符可写成谱分解形式:

$$A = \sum_i a_i |a_i\rangle \langle a_i|$$

这在矩阵形式下对应对角化: 在任意基  $\{|e_i\rangle\}$  下, 可通过相似变换对角化

$$[A]_{(e)} = [U] \begin{pmatrix} a_1 & & \\ & a_2 & \\ & & \ddots \end{pmatrix} [U]^\dagger$$

其中  $[U]$  的列向量是本征矢在该基下的坐标。

### 例题

**例：对角化 Pauli  $\sigma_x$**

$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$  的本征值为  $\pm 1$ ，本征矢为

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

变换矩阵  $[U] = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ ，则

$$[U]^\dagger \sigma_x [U] = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

### 3.9 【了解】连续基中的矩阵表示

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

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

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

这是一个二元函数，称为**积分核**（integral kernel）。

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

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

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

### 推导

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

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

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

### 例题

**例：位置算符**

位置算符  $X$  在位置表象下的矩阵元为

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

因此作用在波函数上：

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

即位置算符在位置表象下就是“乘以  $x$ ”。

### 例题

#### 例：动量算符

动量算符  $P$  在位置表象下的矩阵元为

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

因此作用在波函数上：

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

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

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

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

两个表象通过傅里叶变换联系：

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

### 3.10 【背】Pauli 矩阵

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

#### 性质

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

**2×2 厄米矩阵展开** 任意  $2 \times 2$  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)

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

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

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  $\lambda$  使得

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

则称:

- $\lambda$  为  $A$  的**本征值** (eigenvalue, 特征值)
- $|\phi\rangle$  为  $\lambda$  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  $\lambda$  倍) 的特殊向量。

**前置概念 (引用)** 正交归一基与完备关系见[正交归一基](#); 离散/连续谱见[离散谱与连续谱](#)。

**求解方法** 要找本征值, 需要解方程:

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

这要求  $\det(A - \lambda I) = 0$  (特征方程, 也称久期方程), 解出的  $\lambda$  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 $\lambda$ 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  $\lambda$  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  $\frac{1}{\sqrt{2}}(1, -1)^T$ 。

#### 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。

对角化与酉对角化（引用） 见[对角化与酉对角化（定义）](#)。

#### 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。

## 例题

### 简单的本征值问题

求对角矩阵  $[D] = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$  的本征值和本征向量。

**解：** 对角矩阵的本征值就是对角元素：  $\lambda_1 = 2, \lambda_2 = 3$ 。

对应的本征向量：

$$[D] \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad [D] \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 3 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

所以  $|\phi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  对应  $\lambda_1 = 2$ ,  $|\phi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  对应  $\lambda_2 = 3$ 。

## 4.2 【背】厄米算符的谱定理

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

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

这称为  $H$  的谱分解 (spectral decomposition)。

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

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

其中  $[\Lambda]$  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  $\lambda_1$  及对应本征向量  $|\phi_1\rangle$ 。将其归一化, 使  $\langle \phi_1 | \phi_1 \rangle = 1$ 。考虑正交补空间

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

对任意  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_1$ ,

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

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

**关键结论 4: 谱分解的构造**

由前文正交归一基与酉矩阵可知, 令

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

则  $[U]$  为酉矩阵。因为

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

把各列“并排拼成矩阵”即可得到矩阵等式: 矩阵乘法按列作用满足

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

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

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

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

$$[H][U] = [U][\Lambda]$$

两边左乘  $[U]^\dagger$ , 得到

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

其中  $[\Lambda]$  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:

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

**简并** 若存在  $\lambda_i = \lambda_j$  ( $i \neq j$ ), 则称为**简并**; 对应本征态可在该子空间内任意正交变换。

**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  $\lambda$  的简并子空间为

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

其中  $\text{span}\{\dots\}$  的含义见[线性组合与张成](#); 这里  $\lambda$  为固定本征值,  $\lambda_k$  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“ $\lambda$  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

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

再由谱分解按相同本征值分组:

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

因此谱分解等价写为

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

这在量子测量中尤其常用:  $P_\lambda$  就是测量结果  $\lambda$  的投影算符。



## 例题

### 简并谱的谱分解与投影算符

设

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

解：取标准正交基

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

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

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

对应的矩阵形式为

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

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

$$H = 2P_2 + 3P_3$$

为了更直观，取具体态

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

则

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

并且

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

在  $P_2$  的子空间内，可用任意  $2 \times 2$  的西矩阵重新组合基向量，但  $P_2$  不变。**例：**取

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

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

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

得到

$$|\tilde{e}_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\tilde{e}_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

但

$$|\tilde{e}_1\rangle\langle\tilde{e}_1| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad |\tilde{e}_2\rangle\langle\tilde{e}_2| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

相加得到

$$|\tilde{e}_1\rangle\langle\tilde{e}_1| + |\tilde{e}_2\rangle\langle\tilde{e}_2| = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = [P_2]$$

### 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:

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

## 4.3 【背】 $2 \times 2$ 厄米矩阵的本征值公式

对  $[H] = \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & d \end{pmatrix}$  ( $a, d \in \mathbb{R}$ ), 本征值为

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

### 例题

求  $\sigma_x$  的本征值与本征向量

$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ , 这里  $a = d = 0$ ,  $b = 1$ ,  $|b|^2 = 1$ 。

本征值:

$$\lambda_{\pm} = 0 \pm \sqrt{0+1} = \pm 1$$

本征向量:

对  $\lambda_+ = 1$ , 解  $(\sigma_x - I)|v\rangle = 0$ :

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow -x + y = 0 \Rightarrow x = y$$

取  $|v_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = |+\rangle$

对  $\lambda_- = -1$ , 解  $(\sigma_x + I)|v\rangle = 0$ :

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow x + y = 0 \Rightarrow x = -y$$

取  $|v_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = |- \rangle$

验证正交:  $\langle + | - \rangle = \frac{1}{2}(1 - 1) = 0 \checkmark$

谱分解:  $\sigma_x = (+1)|+\rangle\langle +| + (-1)|-\rangle\langle -|$

## 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:  $[H]^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & -(-i)^* \\ i^* & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 3 \end{pmatrix} = [H] \checkmark$

2. 计算本征值 ( $a = 1, d = 3, b = i, |b|^2 = 1$ ):

$$\lambda_{\pm} = \frac{1+3}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{1-3}{2}\right)^2 + 1} = 2 \pm \sqrt{1+1} = 2 \pm \sqrt{2}$$

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

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

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

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

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

### 标量相乘

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

### 内积规则

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

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

### 算符作用规则

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

### 算符复合

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

特别地,

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

### 共轭与迹 (补充)

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

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

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

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

### 5.3 【背】量子比特系统

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

两比特计算基

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

#### 例题

展开张量积

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

解：利用双线性性：

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

#### 例题

算符作用

计算  $(\sigma_x \otimes I)|01\rangle$

解：

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

或用矩阵形式：

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

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

## 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

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

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

## 6.3 【背】重要例子

Pauli 矩阵

- $[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$ （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:

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

## 7 【背】重要不等式

### 7.1 【背】Cauchy-Schwarz 不等式

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

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

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

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

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

$(\theta, \varphi)$  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。

### 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  $|\phi\rangle$ ,

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



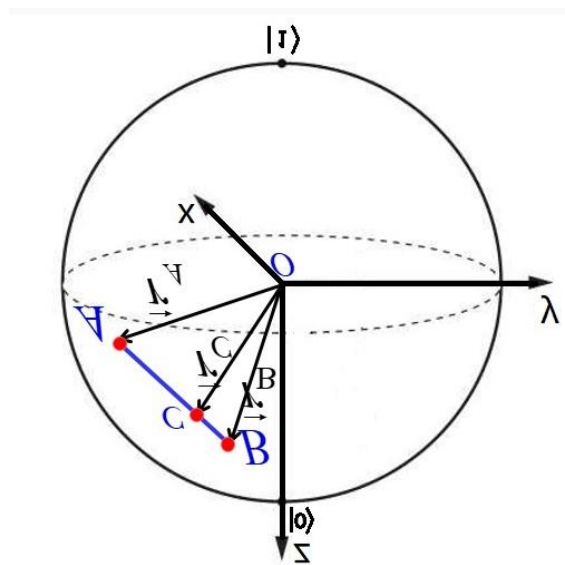


Figure 3: Bloch 球：单比特纯态对应球面点，混态对应球内点。

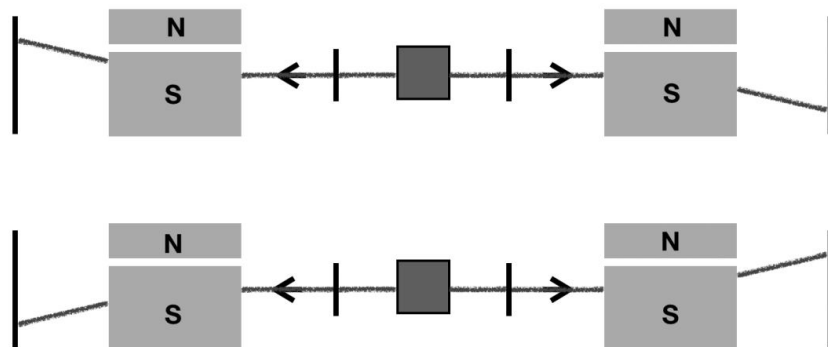


Figure 4: 施特恩-盖拉赫实验装置示意：非均匀磁场导致自旋分束。

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：

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

定义 POVM 元素  $E_m = M_m^\dagger M_m$ 。

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

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

**【了解】POVM 小例子（补充）** 任意满足  $0 \preceq E \preceq I$  的算符都可构成二元 POVM:  $\{E, I - E\}$ 。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。

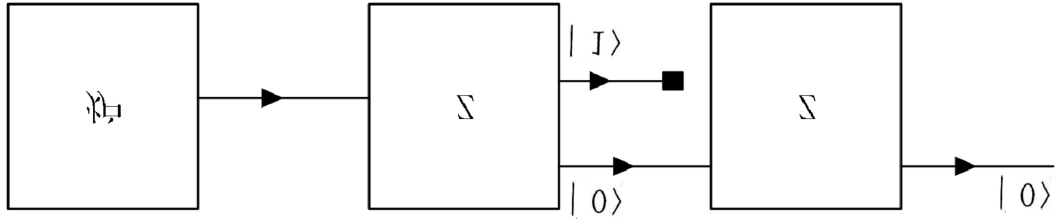


Figure 5: 测量的间接模型：系统与辅助体系经酉演化后进行读出。

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  $\text{tr}(\rho)$  不变。更一般的开放系统演化也可写成 Kraus 形式： $\rho' = \sum_k E_k \rho E_k^\dagger$ （完全正、保迹映射）。

对密度算子  $\rho$ ，有

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

并可写成

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

若不记录测量结果（**非选择性测量**），测后态为

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

**【背】投影测量（可观测量）** 若测量由厄米算符  $M$  描述，其谱分解为

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

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

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

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

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

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

【了解】期望值与概率 测量可观测量  $M$  的期望值为

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

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

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

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

### 例题

对  $|+\rangle$  做  $Z$  测量

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

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

测量后态分别塌缩为  $|0\rangle$  或  $|1\rangle$ 。

### 例题

对  $|0\rangle$  做  $X$  测量

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

【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:  $|000\rangle, \dots, |111\rangle$  (共  $2^3$  个)。一般  $n$  比特系统维度为  $2^n$ , 基可用二进制索引表示。因此多比特态是  $2^n$  个基态的线性叠加, 但测量只能读出有限经典结果。

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

二进制索引与次序 (补充) 通常约定

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

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

**部分迹的矩阵直观 (补充)** 对两比特密度矩阵  $\rho_{AB}$ , 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  $2 \times 2$  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

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

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 × 密度”的直觉。对全空间积分可得  $\frac{d}{dt} \int |\psi(x, t)|^2 dx = 0$ , 说明归一化随时间保持。三维情况下

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

**位置与动量算符**

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

其中  $\hat{x}$  也称坐标算符。因此

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

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

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

**一维谐振子** 能级为

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

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

**氢原子（中心势问题）** 在球坐标中分离变量，能级

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

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

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

其中  $a_0$  为**波尔半径**。

## 11 【了解】算符、对易关系与期望值演化

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

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

**基本对易关系** 位置与动量满足

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

**角动量算符**

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

其对易关系为

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

**算符函数 (提示)** 对算符  $A$  的函数可用泰勒级数定义, 例如

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

当算符不对易时需注意乘法顺序不可交换。

**Ehrenfest/海森堡型公式** 若  $A$  不显含时间, 则

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

若  $A$  显含时间, 则

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

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

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

这体现了 Ehrenfest 定理与经典牛顿方程的对应关系。

## 12 【了解】薛定谔/海森堡/相互作用表象

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

**薛定谔表象** 态矢随时间演化, 算符 (若无显含时间) 不随时间变:

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



**海森堡表象** 态矢固定，算符随时间演化：

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

若  $U(t) = e^{-iHt/\hbar}$ ，则

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

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

$$|\psi_I(t)\rangle = U_0^\dagger(t)|\psi_S(t)\rangle, \quad A_I(t) = U_0^\dagger(t)A_S U_0(t), \quad U_0(t) = e^{-iH_0 t/\hbar}$$

**三种表象的等价性（补充）** 无论采用哪种表象，物理预测一致：

$$\langle A \rangle = \langle \psi_S(t) | A_S | \psi_S(t) \rangle = \langle \psi_H | A_H(t) | \psi_H \rangle$$

只是“时间依赖”分配在态矢还是算符上不同。

## 13 【背】态叠加与概率幅度规则

**叠加原理** 若  $\psi_1, \psi_2$  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  $\psi_1, \psi_2$ ，则

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

最后一项即干涉项。若引入**路径信息**使两路径可区分，则干涉项消失，概率退化为  $|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$ 。

## 14 【背】表象与酉变换

**基与表象** 设  $\{|a_i\rangle\}$ 、 $\{|b_j\rangle\}$  是两组正交归一基，定义

$$[U]_{ji} = \langle b_j | a_i \rangle$$

则  $[U]$  为酉矩阵，系数在两基之间变换为

$$c'_j = \sum_i [U]_{ji} c_i \iff \vec{c}' = [U] \vec{c}$$

**算符的表象变换** 若算符在  $a$  表象中矩阵为  $[A]_{(a)}$ , 在  $b$  表象中矩阵为  $[A]_{(b)}$ , 则

$$[A]_{(b)} = [U][A]_{(a)}[U]^\dagger$$

酉变换不改变算符的本征值。

**例：计算基与 Hadamard 基变换 (补充)** 设  $a$  表象为计算基  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ ,  $b$  表象为  $|+\rangle, |-\rangle$ , 则

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

例如  $|0\rangle$  的系数  $\vec{c} = (1, 0)^T$ , 在  $b$  表象中为  $\vec{c}' = (\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}})^T$ 。算符也满足  $[A]_{(b)} = [U][A]_{(a)}[U]^\dagger$ , 因此  $Z$  在 Hadamard 基下变为

$$[U][Z][U]^\dagger = [X]$$

**术语对照** 课件中常写“么正变换”，即**么正/酉变换**的同义说法。

**连续完备基** 位置表象满足完备性：

$$\int |x\rangle\langle x| dx = I, \quad \psi(x) = \langle x|\psi\rangle$$

动量表象同理：  $\int |p\rangle\langle p| dp = I$ 。

## 15 【了解】位置/动量表象与傅里叶变换

**傅里叶变换对** 位置与动量波函数互为傅里叶变换：

$$\begin{aligned} \phi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \psi(x) dx \\ \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar} \phi(p) dp \end{aligned}$$

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  $\delta$  函数。

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

## 16 【背】密度算子与混合态

**定义** 若系统以概率  $p_k$  处于纯态  $|\psi_k\rangle$ , 则其密度算子为

$$\rho = \sum_k p_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k|, \quad p_k \geq 0, \quad \sum_k p_k = 1$$

**纯态特例：**若系统确定处于  $|\psi\rangle$ , 则

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$$

### 性质

- $\rho^\dagger = \rho$  (厄米)
- $\rho \succeq 0$  (半正定)
- $\text{tr}(\rho) = 1$
- 纯态判据:  $\rho^2 = \rho$  或  $\text{tr}(\rho^2) = 1$

混态满足  $\text{tr}(\rho^2) < 1$ 。

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

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

**谱分解与概率 (补充)** 密度算子可在其本征基中写成

$$\rho = \sum_k p_k |k\rangle\langle k|$$

其中  $p_k \in [0, 1]$  且  $\sum_k p_k = 1$ 。这些  $p_k$  可解释为处于本征态  $|k\rangle$  的概率。

**【了解】相干与经典混合 (补充)** 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**  $\rho_{\text{mix}} = \frac{1}{2}(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) = \frac{1}{2}I$  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

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

Bloch 向量可由

$$r_i = \text{tr}(\rho \sigma_i)$$

直接求得。

**【了解】Bloch 球中的混态** 单比特纯态位于 Bloch 球面, 混态对应球内点; 密度矩阵可写为

$$\rho = \sum_n p_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|$$

其中  $p_n$  为系统处于纯态  $|\psi_n\rangle$  的概率。若仅混合两个纯态  $|\psi_A\rangle, |\psi_B\rangle$ , 其 Bloch 向量位于两点连线段上, 体现混态是纯态的**凸组合**。

## 期望值与演化

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

若  $U = \exp(-\frac{i}{\hbar} H t)$ , 则满足冯诺依曼方程

$$i\hbar \frac{d\rho}{dt} = [H, \rho]$$

**测量概率 (补充)** 在正交基  $\{|e_i\rangle\}$  上投影测量时, 结果  $i$  的概率为

$$p_i = \langle e_i | \rho | e_i \rangle$$

即密度矩阵在该基下的对角元。

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

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

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:

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

说明偏迹保留了子系统的全部可观测统计信息。

**张量积的迹公式 (补充)** 对可分态  $\rho_{AB} = \rho_A \otimes \rho_B$ , 有

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

### 例题

**Bell 态的约化密度矩阵**

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

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

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

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

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

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

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

若且仅若只有一个非零  $\lambda_k$ , 则态为可分态; 否则为纠缠态。

【了解】Schmidt 数（补充） 非零 Schmidt 系数的个数称为 Schmidt 数。Schmidt 数为 1 当且仅当态可分。

【了解】纠缠熵（补充） 纯态的纠缠可用冯诺依曼熵刻画：

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

对纯态  $|\psi\rangle_{AB}$ ，有  $S(\rho_A) = S(\rho_B)$ ，且  $S = 0$  当且仅当可分。

【了解】熵的最大值（补充） 对  $d$  维系统， $S(\rho) \leq \log d$ ，最大值在  $\rho = I/d$ （完全混态）时取得。

## 17 【了解】测不准关系（补充）

一般形式 对任意厄米算符  $A, B$ ,

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|$$

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

不确定度的含义（补充）  $\Delta A$  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）。

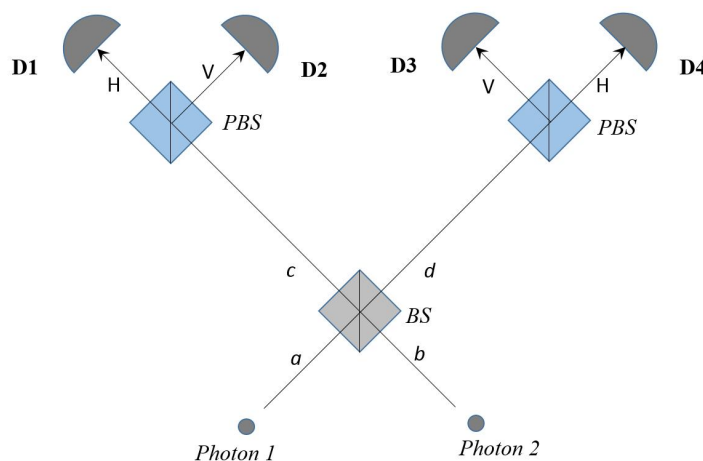


Figure 6: Bell 态测量的光学干涉装置示意（分束器 + 偏振分束器 + 探测器）。

### 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  $\pm 1$ ）， $B, B'$  为 Bob 的两种测量，则

$$\hat{B} = A \otimes (B + B') + A' \otimes (B - B')$$

**算符形式** 定义 Bell 算符  $\hat{B}$ ，则

$$-2 \leq \langle \hat{B} \rangle \leq 2$$

是经典定域隐变量的上界；量子力学可给出更大的  $\langle \hat{B} \rangle$ 。

**Tsirelson 上界（补充）** 量子力学对 CHSH 算符的上界为

$$\langle \hat{B} \rangle \leq 2\sqrt{2}$$

表明量子相关性强于经典，但仍受量子力学限制。

## 19 【了解】量子超密编码（Superdense Coding）

**核心思想** 利用纠缠作为共享资源，实现“发送 1 个量子比特传递 2 个经典比特”。**提出者**：Bennett 与 Wiesner（1992）。**对比**：经典信道中发送 1 个物理比特只能传递 1 个经典比特。又称**量子密集编码**。

**协议步骤**

1. 共享  $|\Phi^+\rangle$ ：Alice 和 Bob 各持一半纠缠对。
2. Alice 编码两比特信息，对自己量子比特施加幺正操作。
3. Alice 发送该量子比特给 Bob（只发送 1 个 qubit）。
4. Bob 对两比特做 Bell 基测量（Bell State Measurement, BSM），得到 2 个经典比特。

**Bell 基测量实现（补充）** 对两比特先施加 CNOT（第 1 控制第 2），再对第 1 比特施加  $H$ ，随后在计算基测量即可完成 BSM（理想情况下）。

**【了解】编码映射（以  $|\Phi^+\rangle$  为初态）**

经典比特	Alice 操作	
00	$I$	$\Rightarrow$ 得到四个 Bell 态之一
01	$X$	
10	$Z$	
11	$iY = ZX$	

对应关系为：

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

**要点** 纠缠是核心资源；单独截获一个粒子无法读取信息；测量会破坏纠缠，具有安全性潜力。

## 20 【了解】量子线路与量子逻辑门

### 20.1 【了解】线路模型

量子算法以**线路**表示：量子比特为线路，西门为方块，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）**  $R_\phi$  仅改变  $|1\rangle$  的**相对相位**： $|0\rangle \mapsto |0\rangle$ ,  $|1\rangle \mapsto e^{i\phi}|1\rangle$ 。全局相位对测量概率无影响，但**相对相位**会影响干涉结果。

**【了解】S/T 门与旋转门关系（补充）**  $S = R_z(\pi/2)$ ,  $T = R_z(\pi/4)$ （均忽略全局相位）。

**【了解】旋转门（补充）** 绕 Bloch 球坐标轴的旋转门定义为

$$R_x(\theta) = e^{-i\theta X/2}, \quad R_y(\theta) = e^{-i\theta Y/2}, \quad R_z(\theta) = e^{-i\theta Z/2}$$

它们在单比特空间中对**应空间旋转**，是构造任意单比特门的基础。当  $\theta = \pi$  时， $R_x(\pi) \sim X$ 、 $R_y(\pi) \sim Y$ 、 $R_z(\pi) \sim Z$ （忽略全局相位）。



【了解】旋转门的矩阵形式（补充）

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

### 20.3 【背】受控运算

控制比特为  $|1\rangle$  时对目标比特施加门  $U$ :

$$|c\rangle|t\rangle \mapsto |c\rangle U^c |t\rangle$$

等价写成算符形式:

$$U_c = |0\rangle\langle 0| \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes U$$

在矩阵上表现为**块对角**结构。

- **CNOT**: 控制为 1 时翻转目标比特。
- **Toffoli (CCNOT)**: 两个控制比特同时为 1 时翻转目标比特。
- **Fredkin (CSWAP)**: 控制为 1 时交换两个目标比特。

Toffoli/Fredkin 门可实现**可逆经典逻辑**, 是量子线路构建的基础组件。当控制比特为  $|0\rangle$  时, 受控门对目标比特不产生作用。Toffoli 门配合单比特门可构成通用量子计算门集。

【了解】Toffoli 与 Fredkin 的逻辑形式（补充）    Toffoli (CCNOT):

$$|a, b, c\rangle \mapsto |a, b, c \oplus (ab)\rangle$$

Fredkin (CSWAP):

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

【了解】Toffoli 真值表（补充）

$$\begin{aligned} |000\rangle &\rightarrow |000\rangle, |001\rangle \rightarrow |001\rangle, |010\rangle \rightarrow |010\rangle, |011\rangle \rightarrow |011\rangle, \\ |100\rangle &\rightarrow |100\rangle, |101\rangle \rightarrow |101\rangle, |110\rangle \rightarrow |111\rangle, |111\rangle \rightarrow |110\rangle \end{aligned}$$

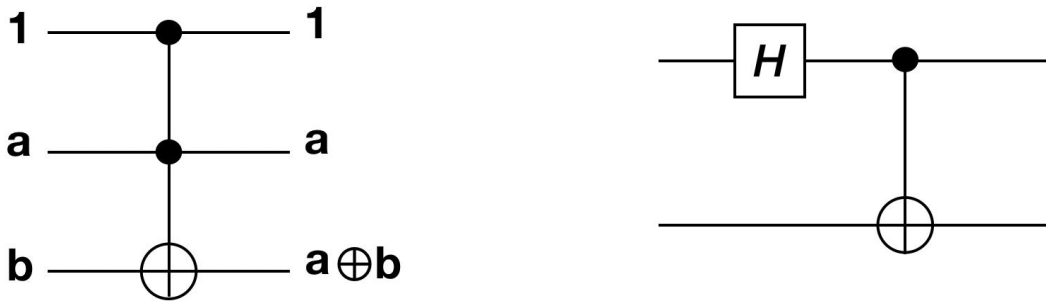


Figure 7: 受控门示意: 左为 CNOT 逻辑 ( $a \oplus b$ ), 右为  $H$ +CNOT 产生纠缠的线路。

【背】CNOT 矩阵表示

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

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

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

$$\text{CNOT}^2 = I \quad (\text{自逆})$$

若控制比特处于叠加态，CNOT 可产生纠缠（例如  $|+\rangle|0\rangle \mapsto |\Phi^+\rangle$ ）。

【了解】SWAP 门 交换两个量子比特的状态：

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

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

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

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

【了解】SWAP 真值表（补充）

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

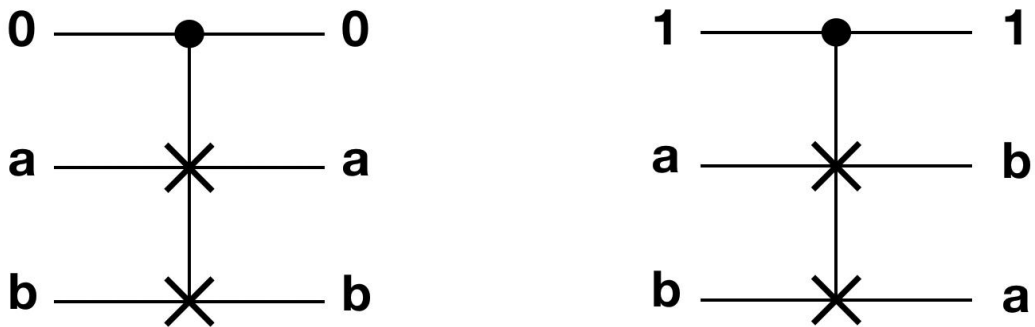


Figure 8: Fredkin（受控 SWAP）门：控制为 1 时交换两条线，控制为 0 时保持不变。

例题

制备 Bell 态电路

对  $|00\rangle$ ，先对第 1 比特施加  $H$ ，再施加 CNOT（第 1 控制第 2）：

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

对  $|\Phi^+\rangle$  在计算基测量，只会得到 00 或 11，且概率各为 1/2。

## 20.4 【了解】可逆性与辅助比特

量子门必须可逆；经典不可逆运算（如擦除、AND）需要引入辅助比特与可逆门实现。

### 例题

#### 二进制个位数相加（思路）

为避免不可逆映射，需引入辅助比特。一个常见流程（与课件思路一致）：

1. 初始化  $|0; x_2; x_1\rangle$ （辅助比特置 0）。
2. 以第 2 比特为控制、辅助比特为目标，施加 CNOT。
3. 以辅助比特为控制，施加 Fredkin 门。
4. 以第 2 比特为控制、第 1 比特为目标，施加 CNOT。
5. 测量前两个比特得到加法结果（进位与和）。

## 20.5 【了解】通用门集

任意单比特酉门 + CNOT 组成**通用门集**；常见实现为  $\{H, S, T, \text{CNOT}\}$ 。任意单比特酉算符可分解为欧拉角形式（例如  $U = e^{i\alpha} R_z(\beta) R_y(\gamma) R_z(\delta)$ ），因此只需有限基本门即可逼近任意量子电路。

## 21 【了解】量子计算概述与算法

### 21.1 【了解】经典计算瓶颈

- **摩尔定律放缓**：器件尺寸逼近纳米尺度，量子隧穿与热效应使性能提升受限。
- **量子系统难模拟**：经典资源随系统规模指数爆炸。

#### 经典计算机发展简述（课件要点）

- 1946 年：第一台经典电子计算机 ENIAC。
- 1982 年：286 时代的集成电路计算机。
- 现代芯片已集成**数十亿**晶体管（例：智能手机 SoC）。

### 21.2 【了解】动机与基本需求

- **动机**：经典计算资源随量子系统规模指数爆炸（Feynman 模拟观点）。
  - **基本需求**：可控物理比特、初始化、长相干时间、通用门集、测量读出与可扩展性。
- 可概括为常见的 DiVincenzo 判据：可扩展量子比特、初始化、通用门集、长相干、可靠测量等。

**量子计算概念的提出** Richard Feynman 提出：用量子系统模拟量子系统可避免经典计算资源的指数爆炸。

**经典比特 vs 量子比特** 经典比特只能处于 0/1；量子比特可处于叠加态  $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ ，并能体现相干与干涉效应。

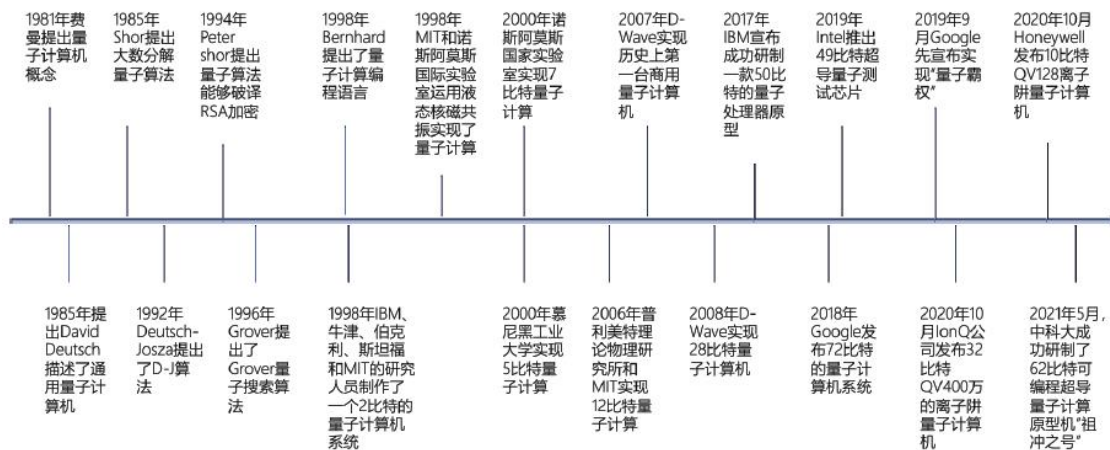


Figure 9: 量子计算发展里程碑时间线（课件示意）。

### 21.3 【了解】两类量子计算机

- 量子退火/绝热计算：专注优化问题（如 QUBO/Ising）。
- 通用门电路量子计算：可执行任意量子算法。

### 21.4 【了解】典型量子算法

- Shor 算法：大整数分解，指数级加速（威胁 RSA）。
- Grover 算法：无结构搜索，平方加速。
- 量子模拟：直接模拟量子系统的动力学与性质。

**量子计算应用（概览）** 优化、量子化学与材料模拟、密码学与安全分析、机器学习加速等是常见应用方向。

#### Grover 算法核心流程

初始化 → Hadamard 叠加 → Oracle 标记 → 扩散算子放大 → 测量

**Oracle 的相位翻转（补充）** 常用相位 Oracle 的作用为

$$O_f|x\rangle = (-1)^{f(x)}|x\rangle$$

其中  $f(x) = 1$  的目标态获得相位  $-1$ 。

**Grover 扩散算子（补充）** 扩散算子可写为

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

其作用可理解为“关于平均幅度的反射”，与 Oracle 一起形成幅度放大。

$$G = D O_f$$

Grover 迭代次数约为  $\left\lceil \frac{\pi}{4} \sqrt{N} \right\rceil$ 。若设目标态幅度角  $\sin \theta = 1/\sqrt{N}$ ，则第  $k$  次迭代后的成功概率为

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

若存在  $M$  个目标态，则近似迭代次数为  $\left\lceil \frac{\pi}{4} \sqrt{N/M} \right\rceil$ 。

**量子算法通用套路** 初始化（多比特置  $|0\rangle$ ） $\rightarrow$  量子门序列/线路  $\rightarrow$  测量得到**概率分布**；测量输出为经典比特，需重复多次以统计结果。Grover 搜索将无结构搜索的复杂度从  $O(N)$  降至  $O(\sqrt{N})$ 。

**Shor 算法要点（补充）** Shor 算法核心是将整数分解转化为**周期查找**问题，利用量子傅里叶变换（QFT）高效提取周期，从而得到因子。QFT 在计算基上的作用为

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

在电路实现中，QFT 可用  $O(n^2)$  个受控相位门构成（ $n = \log_2 N$ ）。其逆变换为

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

因此  $\text{QFT}_N$  是酉算符，且  $\text{QFT}_N^{-1} = \text{QFT}_N^\dagger$ 。实际实现中需构造模指数函数并在经典端用连分数法提取周期。

## 21.5 【了解】量子计算平台概览（常见实现）

**量子计算体系** 现有量子计算体系主要包括核磁共振（NMR）、光子、离子阱、超导芯片、金刚石 NV 色心等。以 NMR 为例，核自旋在外磁场中发生**塞曼能级劈裂**，可用两能级作为量子比特。

- 超导量子比特（约瑟夫森结）
- 离子阱（激光操控）
- 光子量子计算
- 核磁共振（NMR）
- NV 色心与半导体量子点
- 拓扑量子计算（准粒子编织）

**关键性能指标（补充）** 量子比特的相干时间（ $T_1, T_2$ ）需显著长于门操作时间，且门/测量误差率需低于容错阈值。连接度、读出保真度与可扩展性也是平台比较的核心指标。

## 21.6 【了解】量子退火与应用示例（概览）

量子退火将问题转化为 Ising/QUBO 优化，通过量子涨落寻找最优解；在物流路径、组合优化、机器学习等领域被探索应用（如 D-Wave 平台示例）。

# 22 【了解】量子通信

## 22.1 【了解】基本概念

量子通信利用**叠加**与**纠缠**传递信息，其安全性来自**不确定性**、**测量塌缩**与**不可克隆定理**。典型任务包括：**量子隐形传态**、**量子密钥分发（QKD）**、**量子超密编码**、**量子中继**。

**【背】不可克隆定理（要点）** 不存在一个固定的酉变换能将任意未知态克隆：

$$|\psi\rangle|0\rangle \not\rightarrow |\psi\rangle|\psi\rangle \quad (\text{对所有 } |\psi\rangle)$$

这是量子通信安全性的根基之一。

**不可克隆定理的线性性证明（补充）** 设某酉算符满足  $U|0\rangle|0\rangle = |0\rangle|0\rangle$ 、 $U|1\rangle|0\rangle = |1\rangle|1\rangle$ ，则对叠加态  $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ ，

$$U|\psi\rangle|0\rangle = \alpha|0\rangle|0\rangle + \beta|1\rangle|1\rangle \neq (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) \otimes (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)$$

因此不存在能克隆任意未知态的线性（酉）操作。

**内积证明（补充）** 若  $U|\psi\rangle|0\rangle = |\psi\rangle|\psi\rangle$  且  $U|\phi\rangle|0\rangle = |\phi\rangle|\phi\rangle$ ，则

$$\langle\psi|\phi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^2$$

除非  $|\langle\psi|\phi\rangle| = 0$  或  $1$ ，否则矛盾，故不能克隆任意非正交态。

**量子密集编码** 量子密集编码与超密编码同义，本质是**纠缠 + 局域操作 + 联合测量**实现容量提升。**要点：**单独截获一个量子比特无法读出信息，因为信息编码在**整体 Bell 态**上。

### 典型任务速记

- **隐形传态：**传输量子态本身（需纠缠 + 经典信道）。
- **QKD：**生成安全密钥而非直接传消息。
- **超密编码：**1 个量子比特传 2 个经典比特。
- **量子中继：**基于纠缠交换延伸距离。

**不可克隆与安全性（补充）** 未知量子态无法被完美复制，任何窃听尝试都会改变状态并可被检测，这是量子通信安全的核心原理之一。

### 量子通信的几类技术

- **隐形传态：**传送量子态
- **QKD：**分发密钥
- **超密编码：**提升信道容量
- **量子中继：**延伸距离

**信道损耗与距离（补充）** 光纤与自由空间信道存在指数衰减与噪声，直接传输距离受限，因此需要中继、纠缠交换与量子存储器等技术扩展通信距离。

**可信中继 vs 量子中继（补充）** 可信中继依赖中继节点的**可信任假设**；量子中继基于纠缠交换与量子存储器，目标是实现端到端的量子安全。

## 22.2 【了解】量子隐形传态（Teleportation）

**提出** 1993 年 Bennett 等提出量子隐形传态方案。

### 协议步骤

1. Alice 与 Bob 共享 Bell 态  $|\Phi^+\rangle$ 。
2. Alice 对待传态量子比特与自己的一半纠缠比特做 CNOT。
3. Alice 对其第一个比特做  $H$ ，并在 Bell 基下测量两个比特（BSM），得到 2 个经典比特。
4. Alice 通过经典信道发送测量结果；Bob 据此施加校正  $I, X, Z, XZ$  之一。

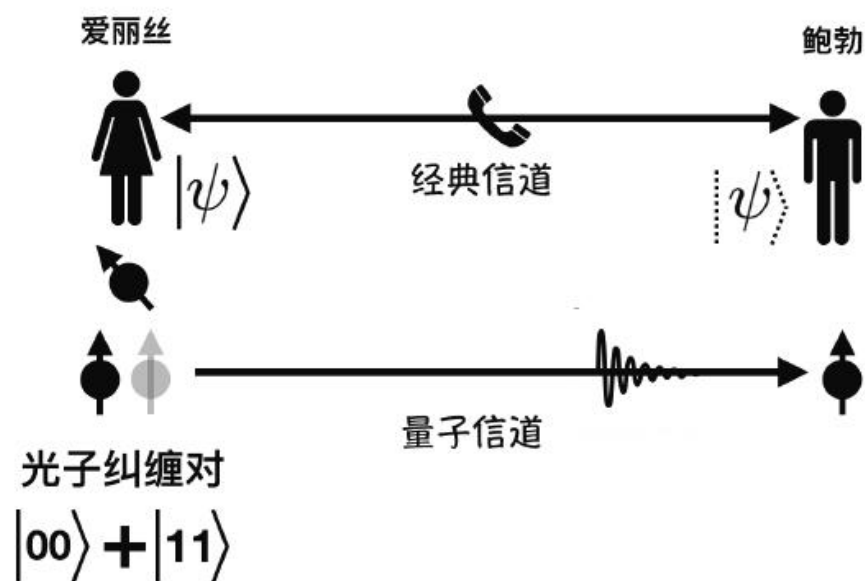


Figure 10: 量子隐形传态示意：纠缠对 + 经典信道共同完成态的传输。

### 【了解】纠正映射

Alice 测量结果	Bob 操作
00	$I$
01	$X$
10	$Z$
11	$XZ$

**重要说明** 传输的是量子态而非物质本体；需要经典信道，**不能超光速**；测量破坏原态，不违背不可克隆定理。发送者与接收者对该未知量子态的具体参数可以始终一无所知。

## 22.3 【了解】量子密钥分发 (QKD)

QKD 只生成共享密钥，不直接传输消息。任何窃听测量都会扰动量子态并引入可检测错误（如 BB84/E91 思想）。其安全性来自测量不可避免地引入扰动与不可克隆原理。

### 典型协议

- **BB84**：发送方在两组互补基中随机制备单光子态，接收方随机测量后进行**基筛选**。
- **E91**：基于纠缠分发密钥，可结合 Bell 不等式进行安全性验证。

**基本流程（要点）** 制备与测量 → 基筛选 → 误码率估计 → 纠错 → 隐私放大。

**BB84 安全性直觉（补充）** 窃听者若在错误基测量，会**扰动**量子态并引入额外误码；通过抽样估计误码率可检测窃听并决定是否丢弃密钥。

**基筛选效率（补充）** 在 BB84 中双方随机选择基，只有**基一致**的测量结果被保留，平均保留比例约为  $1/2$ 。

**拦截-重发攻击（补充）** 若窃听者随机选择基测量并重发（intercept-resend），会在筛选后的密钥中引入显著误码（典型约 25%），因此可被误码率检测到。

**纠错与隐私放大（补充）** 纠错用于消除信道噪声导致的不一致；隐私放大通过哈希压缩密钥，降低窃听者可能掌握的信息。

**经典信道认证（补充）** QKD 仍需要认证的**经典信道**完成基筛选与纠错，否则可能遭遇“中间人”攻击。

## 22.4 【了解】量子中继与网络

**量子中继** 基于**纠缠交换**与**纠缠纯化**延伸通信距离，需要**量子存储器**支持。

**纠缠交换示意（补充）** 若  $A-B$  与  $B-C$  共享 Bell 态（如  $|\Phi^+\rangle_{AB}$  与  $|\Phi^+\rangle_{BC}$ ），在  $B$  处做 Bell 基测量可使  $A$  与  $C$  纠缠，从而实现“远距离纠缠”。

**纠缠纯化（补充）** 纠缠在传输中会退化，可通过 LOCC（局域操作 + 经典通信）对多对低保真纠缠态进行处理，以获得较高保真度的纠缠对，但会牺牲成功率。

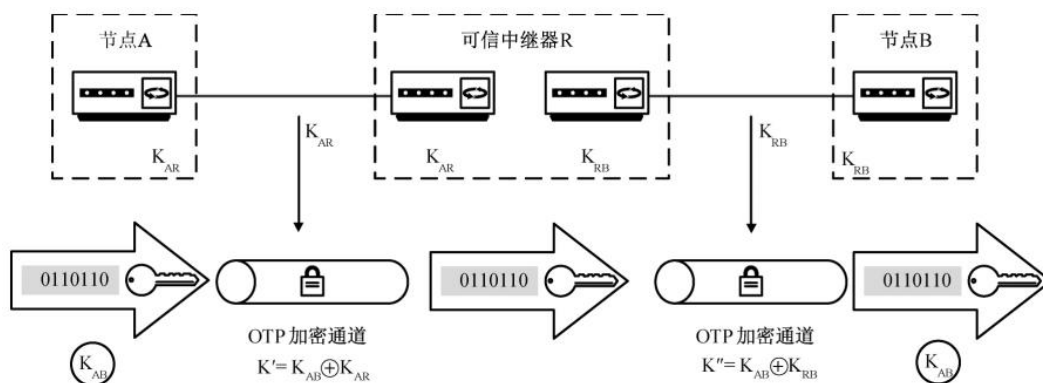


Figure 11: 可信中继（Trusted Relay）量子网络的示意。

### 网络架构

1. 主动光交换的不可信网络（光开关）
2. 被动光学器件网络（分束器、WDM）
3. 可信节点中继网络
4. 量子中继纯量子网络

基于纠缠交换的**量子中继**难度较高，工程上常以**可信中继**作为过渡方案。基于光开关/无源器件的多用户 QKD 复用方案可扩展性有限，仍受信道损耗约束。

**常见拓扑** 星形、环形、总线型。

**典型网络示例** 美国 DARPA 量子网络、欧洲 SECOQC、日本东京量子通信网络、中国天地一体量子通信网络与 500 公里无中继光纤 QKD 示范。

**关键节点设备（示意）** 纠缠源/单光子源、量子存储器、贝尔态测量模块、单光子探测器、时间同步与经典控制/通信模块等。



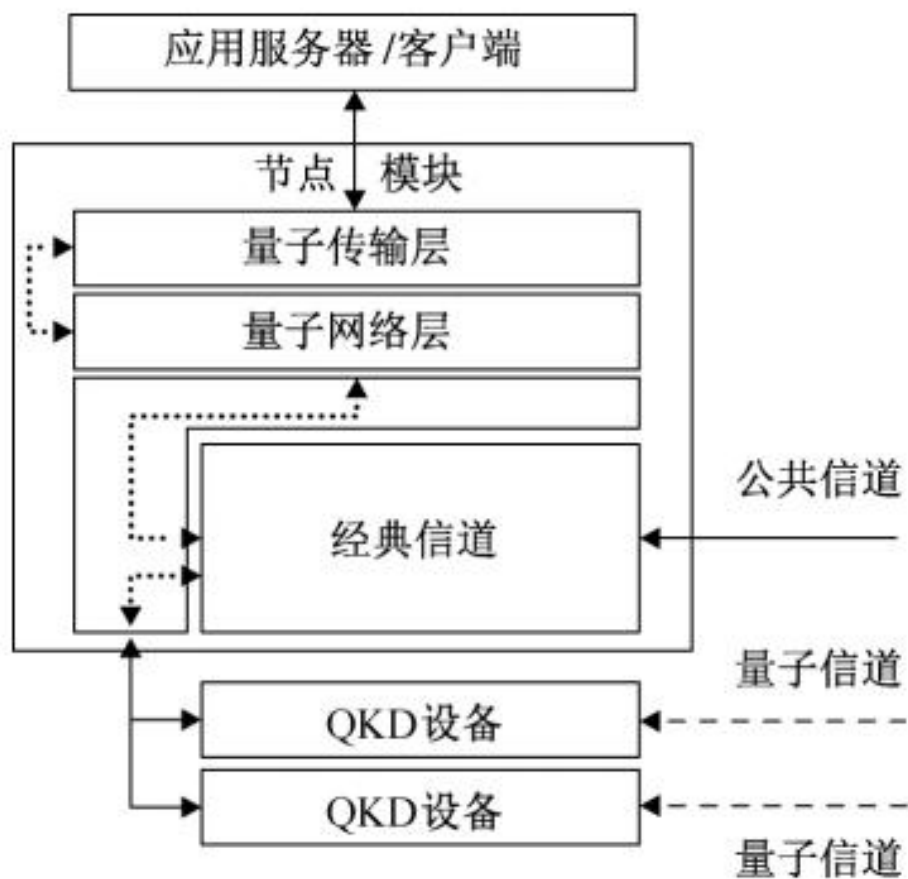


Figure 12: 量子通信协议栈与 QKD 设备位置（课件示意）。

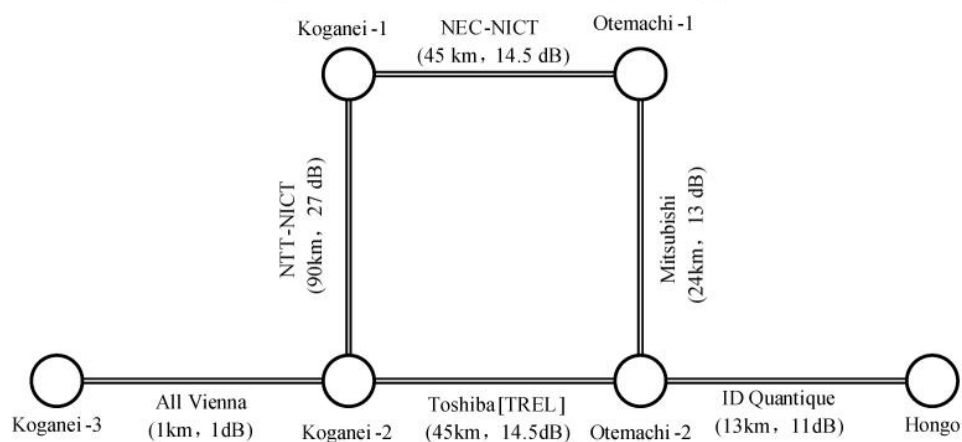


Figure 13: 量子通信网络拓扑示例（东京 QKD 网络示意）。

## 22.5 【了解】量子隐形传态研究进展（课件提要）

- 2010：自由空间 16 km 量子隐形传态实验。
- 2015：光纤中超过 100 km 的传态实验（高效探测器）。
- 2017：“墨子号”卫星实现地到星超过 1400 km 传态。

## 22.6 【了解】量子通信网络进展（课件提要）

- 2002–2007：美国 DARPA 量子保密通信网络（多节点、光纤/自由空间）。
- 2004/2008：欧洲 SECOQC 项目启动并建成 QKD 网络。
- 2010：日本东京 6 节点城域 QKD 网络。
- 2021：中国天地一体广域量子通信网络（京沪干线 + “墨子号”）。
- 2021：中国 500 km 级无中继光纤 TF-QKD 现场示范。

## 23 【了解】常见题型总结

1. 复数运算：求模、共轭、逆、指数形式
2. 向量归一化：计算  $\langle\psi|\psi\rangle$  并归一化
3. 内积与正交性：计算内积，判断是否正交
4. 线性无关与基：判断是否线性无关，写出基与维数
5. 展开系数：在给定正交归一基下展开向量
6. 矩阵基本操作：求转置、共轭、迹、行列式与逆
7. 判断厄米/酉性：验证  $H = H^\dagger$  或  $U^\dagger U = I$
8. 本征值问题：求本征值、本征向量、谱分解
9. 张量积展开：用双线性性完全展开
10. 算符作用：计算  $(A \otimes B)|v \otimes w\rangle$
11. 对易子/反对易子：计算  $[A, B]$  与  $\{A, B\}$
12. 量子比特与 Bloch 球：将态写成  $\cos \frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2}|1\rangle$
13. 酉演化/量子门：由  $U|\psi\rangle$  计算演化后态
14. 测量与塌缩：用  $P_m$  或  $M_m$  求测量概率与测后态
15. 密度矩阵：判断纯/混态，计算期望值与偏迹
16. 测不准关系：计算  $\Delta A$  并应用  $\Delta A \Delta B$  下界
17. 纠缠态判定：判断可分/纠缠，写出 Bell 态
18. EPR/Bell：写出 CHSH 不等式并解释物理含义
19. 超密编码：给出编码映射与解码步骤
20. 量子线路：分析门序列并计算输出态
21. 隐形传态：写出 CNOT + H + 测量 + 纠正的流程
22. 量子通信：解释 QKD/中继/网络架构的基本思路

## 【了解】学习建议

- 掌握这些数学工具需要大量练习，建议每个概念至少手算 2-3 个例子
- 重点关注从定义出发的推导过程，而不是死记公式
- 遇到复杂计算时，写出完整步骤，避免跳步导致错误
- 理解物理意义：厄米算符  $\rightarrow$  可观测量，酉算符  $\rightarrow$  演化，张量积  $\rightarrow$  复合系统
- 将四大公设与计算习惯绑定：写清“态—演化—测量—复合系统”的链条
- 练习密度矩阵与偏迹：用  $|\Phi^+\rangle$  等纠缠态练手
- 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  $\rightarrow$  演化  $\rightarrow$  测量  $\rightarrow$  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**:

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

- $[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$ ,  $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}I$ 。
- **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**:  $|\langle \phi | \psi \rangle| \leq \| \phi \| \| \psi \|$ 。
- **量子比特态**:  $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ ,  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ 。
- **薛定谔方程与酉演化**:  $i\hbar \partial_t |\psi\rangle = H|\psi\rangle$ ,  $U = \exp(-\frac{i}{\hbar} H \Delta t)$ 。
- **测量公式**:  $p(m) = \langle \psi | M_m^\dagger M_m | \psi \rangle$ ,  $|\psi_m\rangle = \frac{M_m |\psi\rangle}{\sqrt{p(m)}}$ ; 投影测量  $p(m) = \langle \psi | P_m | \psi \rangle$ 。
- **复合系统**:  $\mathcal{H}_{AB} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ ,  $|\psi\rangle = \sum_{ij} c_{ij} |i\rangle |j\rangle$ 。
- **密度算子**:  $\rho = \sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|$ ,  $\text{tr}(\rho) = 1$ ,  $\langle A \rangle = \text{tr}(\rho A)$ ,  $\rho_A = \text{tr}_B(\rho_{AB})$ 。
- **CNOT 矩阵**:

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