

量子信息技术

◎戴葵 宋辉 刘芸 谭明峰 编著◎

引论

国防科技大学出版社

量子信息技术引论

戴葵 宋辉 刘芸 谭明峰 编著

国防科技大学出版社
湖南·长沙

内 容 摘 要

本书全面详细介绍了量子信息技术的基本原理和应用。全书共分八章,分别介绍了量子计算中非常重要的量子力学概念,构成量子系统的基本单位——量子位和量子状态的测量以及著名的 EPR 量子关联,计算复杂性、量子图灵机和量子电路模型,基本量子门和量子门阵列,量子纠错,量子通信技术,以及典型的量子算法,最后论述了经典计算机上的量子计算模拟技术。

本书内容丰富,并且配有实际的程序模拟实例,适合于作为高等院校的研究生教材,也可用做量子信息技术研究的入门参考书。

图书在版编目(CIP)数据

量子信息技术引论/戴葵,宋辉等编著. —长沙:国防科技大学出版社,2001.3
ISBN 7-81024-726-3

I. 量… II. ①戴…②宋… III. 量子信息技术 IV. 0413

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2001)第 13188 号

国防科技大学出版社出版发行
电话:(0731)4572640 邮政编码:410073
E-mail: gfkdebs@public.cs.hn.cn
责任编辑:张 静 责任校对:石少平
新华书店总店北京发行所经销
国防科技大学印刷厂印装

*

787×1092 1/16 印张:12.75 字数:295 千
2001 年 3 月第 1 版第 1 次印刷 印数:1—3000 册

*

定价:18.00 元

前言

计算机是 20 世纪最重大的发明,给我们的世界带来了巨大的变化。计算机充分显示了人类的智慧。但是传统的计算机体系结构在人类探索世界奥妙的雄心壮志面前却显得力不从心。于是从冯诺曼结构出发,人类就不断地提出各种新型结构的计算机。量子计算机在这个“角逐”中脱颖而出。

1996 年,量子计算机的先驱之一,IBM 研究实验室的 Charles. H. Bennett 在英国的《自然》杂志新闻与评论栏声称,量子计算机将进入工程时代。同年,美国《科学》周刊科技新闻中报道,量子计算机引起了计算机领域的革命。

量子计算机的概念起源于对可逆计算机的研究。在计算机的发展中,小型化和高度集成化是一个重要的目标,但是随着芯片体积的缩小和集成度的提高,计算机的能耗对芯片的影响越来越大。能耗制约着集成度,也限制着计算机的运行速度。

20 世纪 60 年代,IBM 公司 Thomas. J. Watson 研究实验室的 Rolf Landauer 考察了能耗问题。他指出:能耗产生于计算过程中的不可逆操作。例如,对两位进行异或操作,输出的结果只有一位,这个过程损失了一个自由度,因此是不可逆的。按照热力学定律,必然会产生一定的热量。但是不可逆操作并非不可避免。例如对异或门的操作加以改进,保留一个无用的位,这个操作就变成了可逆的。因此从物理原理上讲,只要把所有的不可逆操作改造为可逆操作,就可以实现无能耗的计算。

后来,Bennett 在严格地考虑了这个问题后证明:所有经典不可逆计算机都可以改造成可逆计算机,而不影响计算能力。在量子力学中,可逆操作可以使用一个幺正矩阵来表示。Argonne 国家实验室的 Paul Benioff 最早使用量子力学来描述可逆计算机。在量子可逆计算机中,使用一个二能级的量子体系来表示一位,这个量子体系处在量子态 0 和 1 上。

量子可逆计算机是使用量子力学语言表述的经典计算机,它没有利用量子力学的本质特性。美国著名物理学家 Richard P. Feynman 指出,这些量子特性可能在未来的量子计算机中起到本质的作用。牛津大学的理论物理学家 David Deutsch 找到了一类问题。对该类问题,量子计算机存在多项式算法,而经典计算机却需要指数算法。1994 年 Shor 给出了关于大数质因子分解的量子算法,这个算法可以在量子计算机上用多项式时间解决问题,轰动了世界,掀起了研究量子计算机的热潮。

目前,世界各个先进国家都在努力发展量子技术。美国的 Los Alamos 国家实验室、麻省理工学院、加州大学等已经开展了使用核磁共振技术构造量子计算机的实验研究;英国国防研究部最早使用光纤实现了量子密钥分发的实验;欧盟委员会与欧洲量子信息物理协会签订了为期 4 年的项目研究合同。目前我国也有不少学者研究量子信息技术,但是和国际水平还有差距,有待加强。

量子计算机是实现量子计算的机器,但是它与经典计算机的关系要比与其他结构的

计算机密切。经典计算机在物理上可以描述成对输入信号序列按一定算法进行变换的机器,其算法由计算机内部逻辑电路来实现。经典计算机的所有的输入态相互正交,不会处于叠加态。经典计算机内部的每一步变换对应一类特殊的变换:从正交态演化为正交态。量子计算机的输入和输出通常是叠加态;计算中的变换是所有可能的么正变换。量子计算对经典计算作了极大的扩充。经典计算是一类特殊的量子计算。

量子计算的本质特征是量子叠加性。在一般情况下,微观粒子的状态是不可确定的。它可以同时以不同的概率处于多个状态。一旦进行了测量,它的状态就会塌陷到一个确定状态。如果一个量子系统有 n 个特征状态 $|\psi_0\rangle, |\psi_1\rangle, \dots, |\psi_{n-1}\rangle$, 那么它的叠加态就是

$$|\psi\rangle = \sum_{i=0}^{n-1} \omega_i |\psi_i\rangle$$

量子计算机对叠加态进行计算时,相当于对每一个叠加分量同时进行计算,并把结果按一定的概率振幅叠加起来,就得到输出结果,这就是量子并行计算。如果,一个量子系统有 2^n 个状态,那么对叠加态进行一次计算,相当于同时进行了 2^n 次计算。量子并行处理极大地提高了量子计算的效率,使其可以完成经典计算机无法完成的工作。

但是,量子计算存在的一个重大问题是:虽然量子系统可以实现大规模并行计算,但是对计算结果的读取却受到一定的限制。读取量子系统的计算结果相当于对量子系统中的量子位状态进行测量,根据量子理论,我们只能从原来保存在系统中的多个计算结果中以概率的形式读取到其中一个计算结果,而其他的结果都被这种测量操作破坏了。另外,由于量子测量的不确定性,我们甚至没有选择读取哪个计算结果的权利。

但是在过去的几年中,人们找到了一些从量子并行计算中获取有用信息的方法。一种技术是确定所有输出值的公共特性,如对称性或某函数的周期等,这就是 Shor 在大数质因子分解中使用的技术。另外一种则是通过状态变换提高期望输出被测量的概率, Grover 的搜索算法就用到了这种类似的技术。

近年来,随着量子计算技术研究的深入,人们又发现了很多新的应用领域。这些应用不再局限于纯粹的计算领域,而是利用量子的特性,进入了信息处理领域。在这些应用中,比较典型就是量子隐形传态(quantum teleportation)、量子密码和量子编码等。

量子隐形传态是一个非常有趣的研究课题。它使用了量子力学一种奇妙特性。也就是说,有一对相距非常遥远的关联粒子,如果改变粒子 A 状态,那么粒子 B 也会在瞬间改变状态,并且这种改变是同时发生的。也就是说关联粒子之间具有非局域性。

1993 年, Bennett 等 4 个国家的 6 位科学家联合在《Phys. Rev. Lett.》发表了一篇题为《经由经典和 EPR 通道传送未知量子态》的文章,引发了一系列富有成果的研究。1997 年 12 月,奥地利学者在《自然》上报道了量子隐形传态的实验结果。虽然隐形传态无法像科幻小说那样实现宏观物体的隐形传送,但是它在量子计算和通讯中却存在巨大的应用前景。

另外一个已经在实验上取得突破的量子技术就是量子密码。现有的密码通信的安全性无法得到绝对的保证。由于经典密码通信使用的载体是经典信道,密码本身被复制时,合法用户是无法识破的。而量子密码术则能够确保密钥传输的安全性,它的安全性是由

量子力学中的量子态无法克隆定律保证。量子密码属于对称密码体系,与现有的密码体系不同,它可实现不可破译、不可窃听的保密通信。采用光纤传输已经实现了 30 千米的密钥传输。

量子稠密编码实现了用一个量子位来完成两位信息的通信。这是一个令人惊讶的结果,因为一个量子位的信息和一个经典位的信息是完全等价的。它之所以能够具有这种强大的功能,就在于它利用了量子关联的特性。

量子信息技术是物理学研究成果和信息处理技术相结合的产物,当前从事该项研究的人员绝大多数都是物理学方面专家。为了更好地推动量子计算在国内的发展,使当前从事信息技术的工作者能够尽快迈入量子信息技术研究领域,这里以我们近年来对量子信息技术研究为基础编著了该书,试图从一个计算机研究者的角度,对量子信息技术进行全面的介绍。

全书共八章。第一章介绍一些量子计算中非常重要的量子力学概念。主要是给读者提供一些数学形式工具和记号,使读者比较容易理解量子计算的基本理论和应用。

第二章介绍量子位的有关知识。量子位和经典位不同。一个量子位能够处于一种同时对 0 和 1 进行编码的叠加状态中。当多个量子位构成量子系统后,就会具有强大的能力。一个 n 位的量子寄存器可以处于所有 2^n 个可能取值的叠加状态。另外我们还将介绍量子状态的测量和著名的 EPR 量子关联。

第三章介绍关于计算复杂性方面的知识。讲述在计算机科学中占有重要地位的图灵机概念,然后讲述量子图灵机和量子电路模型以及量子计算精度等问题。

第四章首先介绍量子计算中用到的基本量子门。然后介绍将这些量子门按照一定要求构成量子门阵列完成特定的计算。我们还将讲述量子计算的一个重要特性:量子并行性,这是量子计算机具有强大计算能力的基础。Feynman 在 20 世纪 80 年代提出了一个量子计算机模型,推动了量子计算的发展,我们也将对这个模型作介绍。

第五章介绍量子纠错。研制量子计算机的最大问题就是退相干(Decoherence)问题,量子计算机的状态很容易受外部环境的干扰而发生畸变。由于在物理实现上人们很难将量子计算机与环境隔离,使得量子计算实现的可行性一直受到怀疑。但是 Shor 却给出了一个新颖的编码技术,利用 9 个量子位来编码一位信息,解决了退相干问题。

第六章介绍量子通信技术。首先讲述量子稠密编码的思想和实现技术。然后介绍量子密码体系,以及两个协议。最后还介绍量子的隐形传态的基本原理、实现思想。

第七章介绍典型的量子算法。在这一章,我们将介绍量子算法的基本原理,然后讲解著名的大数质因子分解算法和快速搜索算法。

第八章介绍在经典计算机上模拟量子算法。由于目前量子计算机的硬件技术仅仅处于实验阶段,因此创建和发展量子算法,就必须在经典计算机系统上模拟运行。构造一个合乎实际的量子算法模拟器能够使我们深入了解量子计算机的工作情况,真实地模拟已知的量子算法,也能够保证研究的新型量子算法的正确性。量子算法模拟器也可以说是一种新型的并行处理技术。我们将介绍量子模拟技术,以及我们在量子模拟中的一些研究成果。

量子计算机,作为一种新的计算技术,不仅仅是在现有计算机上向前迈进了一步,而

且使整个计算的概念焕然一新。量子计算机除了能够解决一些经典计算机无法解决的问题之外,量子计算的思想对物理学的基础也有深远的意义。Landauer 在 1985 年说:不仅仅是物理决定了计算机能做什么,而且计算机能够做什么,反过来也将限定物理定律最终的性质。Deutsch 指出:宇宙的富于逻辑合理性的结构不能独立于它所遵从的法则,量子宇宙的整体可以由它的部分来模拟。也就是说,量子计算机有能力模拟出一个与实在原型无法区别的虚拟世界。

由于作者长期从事计算机的研究工作,为了能够以通俗易懂的方式向从事信息技术的工作者介绍量子信息处理技术,该书通俗化了许多量子力学的概念,难免有不妥之处,在此敬请读者批评指正。在书稿的撰写过程中,得到了国防科技大学量子信息技术研究中心的李承祖教授、景宁教授、毛友安副教授、陈平彤博士等专家的指导和大力支持,在此一并表示衷心的感谢。

作者

2000 年 11 月

目 录

第一章 量子力学基础	(1)
第一节 光子的偏振	(1)
§ 1.1.1 偏振实验	(1)
§ 1.1.2 实验解释	(2)
第二节 状态空间和狄拉克表示法	(3)
§ 1.2.1 状态空间	(3)
§ 1.2.2 狄拉克表示法	(4)
§ 1.2.3 算符	(5)
§ 1.2.4 向量空间的直和	(6)
§ 1.2.5 向量空间的直积	(8)
第三节 基本原理	(8)
§ 1.3.1 微观粒子的波粒二象性	(9)
§ 1.3.2 概率波	(10)
§ 1.3.3 概率幅	(10)
§ 1.3.4 量子态叠加原理	(13)
§ 1.3.5 测不准原理	(14)
§ 1.3.6 Schrödinger 方程	(15)
第二章 量子系统	(17)
第一节 量子位	(17)
第二节 多量子位系统	(18)
第三节 测量	(19)
第四节 量子关联	(20)
第三章 可计算性	(24)
第一节 问题、算法和复杂性	(24)
第二节 确定型图灵机	(25)
第三节 非确定型图灵机	(27)
第四节 量子图灵机	(28)
第五节 多项式时间算法和难解问题	(29)
第六节 量子电路模型	(33)

第四章 量子计算	(35)
第一节 基本量子门	(35)
第二节 量子门阵列	(38)
第三节 量子编译器	(40)
§ 4.3.1 CS 分解	(40)
§ 4.3.2 基本概念	(41)
第四节 量子并行性	(47)
第五节 Feynman 量子计算机	(49)
第五章 量子纠错	(51)
第一节 经典纠错技术	(51)
第二节 量子系统出错的特征	(52)
第三节 量子编码	(52)
第四节 量子态的恢复	(54)
第五节 错误校正实例	(55)
第六节 冗余纠错	(56)
第七节 量子纠错模拟	(57)
第六章 量子信息技术	(60)
第一节 量子稠密编码	(60)
第二节 量子密钥	(62)
§ 6.2.1 无噪声的 BB84 协议	(63)
§ 6.2.2 有噪声的 BB84 协议	(64)
§ 6.2.3 量子密钥分配(QKD)——B92 协议	(65)
第三节 隐形传态	(67)
§ 6.3.1 隐形传态	(67)
§ 6.3.2 隐形传态的量子电路	(69)
第七章 典型量子算法	(71)
第一节 量子黑盒问题	(71)
§ 7.1.1 Deutsch 问题	(71)
§ 7.1.2 Deutsch-Jozsa 问题	(73)
§ 7.1.3 Simon 问题	(74)
第二节 量子傅立叶变换	(75)
§ 7.2.1 离散傅立叶变换	(75)
§ 7.2.2 量子傅立叶变换	(76)
第三节 大数质因子分解算法	(77)

§ 7.3.1	RSA 密钥系统	(77)
§ 7.3.2	RSA 安全性	(78)
§ 7.3.3	分解质因子的经典算法	(79)
§ 7.3.4	分解质因子的数论定理	(79)
§ 7.3.5	分解质因子的量子算法	(80)
§ 7.3.6	分解实例	(84)
第四节	量子搜索算法	(84)
§ 7.4.1	非结构化问题的量子搜索	(85)
§ 7.4.2	对概率幅的求反放大	(86)
§ 7.4.3	概率符号的改变	(87)
§ 7.4.4	Grover 迭代算法	(88)
§ 7.4.5	Grover 算法效率	(91)
§ 7.4.6	Grover 算法实例	(93)
第五节	改进的量子搜索算法	(95)
§ 7.5.1	Grover 量子算法存在的问题	(95)
§ 7.5.2	改进的量子搜索算法	(96)
§ 7.5.3	改进的量子搜索算法性能分析	(97)
§ 7.5.4	解个数未知时的量子搜索算法	(99)
第六节	结构化问题的量子搜索算法	(100)
§ 7.6.1	Walsh-Hadamard 变换的另一种表示	(100)
§ 7.6.2	Hogg 算法	(101)
§ 7.6.3	结构化问题量子搜索复杂度分析	(103)
第七节	求列表极小值的量子算法	(106)
§ 7.7.1	算法描述	(106)
§ 7.7.2	算法的性能分析	(106)
第八章	量子算法模拟	(108)
第一节	模拟器研究现状	(108)
§ 8.1.1	设计目的	(108)
§ 8.1.2	功能和特性需求	(110)
§ 8.1.3	量子计算模拟器现状	(110)
第二节	系统表示法	(112)
§ 8.2.1	BDD	(112)
§ 8.2.2	量子寄存器状态	(113)
§ 8.2.3	量子门	(115)
§ 8.2.4	运算	(115)
第三节	量子计算语言	(116)
§ 8.3.1	语言特点	(116)

§ 8.3.2 量子寄存器	(116)
§ 8.3.3 量子表达式	(118)
§ 8.3.4 量子语句	(118)
第四节 通用量子开发模拟调试环境	(120)
§ 8.4.1 总体结构	(120)
§ 8.4.2 基本系统结构和 workflow	(121)
§ 8.4.3 基本系统模块	(122)
§ 8.4.4 模拟库结构	(123)
§ 8.4.5 通用量子开发模拟环境使用	(124)
第五节 模拟复杂性分析	(126)
第六节 量子计算的并行模拟	(127)
§ 8.6.1 并行计算技术	(127)
§ 8.6.2 量子计算并行模拟技术	(128)
参考文献	(132)
附录 A 量子密钥分配	(134)
附录 B Shor 质因子分解算法	(153)
附录 C Grover 搜索算法	(164)
附录 D API(应用程序接口)	(185)

第一章 量子力学基础

由于量子力学描述的是微观世界的一些现象,所以它非常难以理解。这里我们并不打算对量子力学和量子世界做更多深层次的解释,只是希望读者能够从本章的内容中获得一些量子力学的感性认识,并给出一些理解量子计算所必需的量子力学基础知识。

第一节 光子的偏振

光子是我们可直接观测到的唯一微观粒子。这里我们将通过光子及其偏振的简单实验说明量子力学的某些原理。实验所需要的器材有:一台激光光源(或其他强光源),三个偏振片 A 、 B 和 C ,其偏振方向分别是水平、 45° 和垂直。

§ 1.1.1 偏振实验

如图 1.1 所示,将一束光照射到投影屏上,并假设入射光的偏振方向是随机的。首先在光源和投影屏之间插入水平偏振片 A ,可以看到透过 A 后的出射光光强只有其入射光光强的一半,而且射出的光子现在都变成了水平偏振。

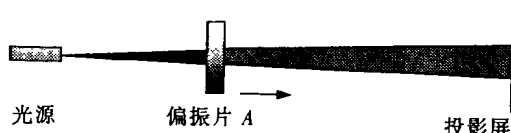


图 1.1 光子偏振实验 1

上述现象似乎说明偏振片 A “过滤”掉了那些不是水平偏振方向的光子,而让那些偏振方向是水平方向的光子通过。从经典意义上说,由于偏振片 A 的入射光的偏振方向是随机的,所以入射光中偏振方向是水平的光子数目极少,如果偏振片 A 起到的是“过滤”作用,那么出射光的光强应该非常弱,而不会是入射光光强的一半。

现在将垂直偏振片 C 插入到偏振片 A 和投影屏之间,如图 1.2 所示,可以看到偏振

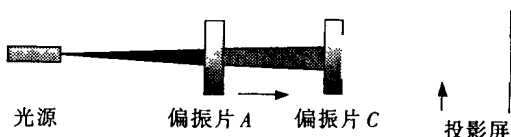


图 1.2 光子偏振实验 2

片 C 的出射光光强为零。似乎“过滤”可以解释这一现象,因为“没有偏振方向为水平方向的光子能够通过偏振方向为垂直的偏振片”。

最后,我们在偏振片 A 和 C 之间插入偏振方向为 45° 偏振片 B ,如图 1.3 所示,可以在投影屏上看到一些微弱的光,它的光强正好是光源光强的 $1/8$ 。

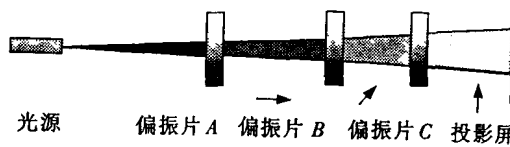


图 1.3 光子偏振实验 3

§ 1.1.2 实验解释

如果我们使用两个基向量 $|\uparrow\rangle$ 和 $|\rightarrow\rangle$ 分别表示垂直偏振方向和水平偏振方向,那么任意一个随机的偏振方向可以用这两个基向量的线性组合形式表示为:

$$a|\uparrow\rangle + b|\rightarrow\rangle \quad (1.1.1)$$

其中, a 和 b 表示复数,而且 $|a|^2 + |b|^2 = 1$ 。两个基向量 $|\uparrow\rangle$ 和 $|\rightarrow\rangle$ 被称为被测力学量的本征态。

我们感兴趣的是光子的偏振方向,所以可以将一个光子的偏振状态表示为上述形式。其实,任意两个相互正交的非零单位向量都可以作为状态空间的基。

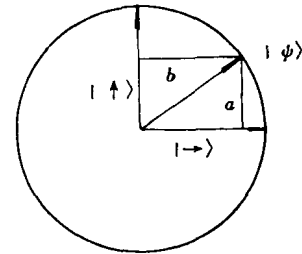


图 1.4 对量子状态 $|\psi\rangle$ 的测量

对量子状态的测量要求把该状态分别投影到其对应的正交基上,见图 1.4。对该状态进行测量的时候,观测到状态 $|\uparrow\rangle$ 的概率为 $|a|^2$,而观测到状态 $|\rightarrow\rangle$ 的概率为 $|b|^2$ 。由于测量总是在相互正交的基上进行的,所以在后面论述中的所有的基均是正交的。不同的测量设备对应不同的正交基。

另外,对量子态的测量还将使被测量的量子态改变为测量结果所表示的态。也就是说,如果我们对量子态 $|\psi\rangle = a|\uparrow\rangle + b|\rightarrow\rangle$ 进行测量所得到的结果是 $|\uparrow\rangle$,那么量子态 $|\psi\rangle$ 就变成了 $|\uparrow\rangle$,如果再用相同的基进行测量,测量结果一定还是态 $|\uparrow\rangle$ 。由此可以看出,除非被测量的量子态是被测力学量的一个本征态,否则任何测量都会改变量子态,而且不能由改变后的量子态推知原来的量子态。

现在我们用上述原理对前面的偏振实验进行解释。插入偏振片可以看成是对光子的量子态进行一次测量。在测量的两个正交基中,一个与偏振片的偏振方向相同,而另一个与偏振片的偏振方向垂直。该测量将改变光子的偏振方向。只有那些测量后的偏振方向与偏振片偏振方向一致的光子才能通过偏振片,而其他光子被偏振片反射回去了。例如,偏振片 A 用基 $|\rightarrow\rangle$ 来测量光子的量子态,那么有的光子的量子态在测量后变成了 $|\rightarrow\rangle$,有的光子的量子态在测量后变成了 $|\uparrow\rangle$,只有偏振方向为 $|\rightarrow\rangle$ 的光子才能通过偏振片 A ,而所有偏振方向为 $|\uparrow\rangle$ 的光子则全被反射回去了。

假设光源产生的光子的偏振方向是随机的,各种偏振方向的光子出现概率相同,那么,这些光子的量子态经过偏振片 A 测量后,光子状态被偏振片 A 、 B 和 C 改变的的概率为 50%。所以,偏振方向变为水平方向的光子占有所有光子的 50%,这些光子的量子态为 $| \rightarrow \rangle$,它们通过偏振片 A 。而偏振片 C 用基 $| \uparrow \rangle$ 来对量子态为 $| \rightarrow \rangle$ 的光子进行测量,光子状态改变的的概率是 0,其量子态仍然保持 $| \rightarrow \rangle$ 。所以没有任何光子通过偏振片 C ,所以偏振片 C 的出射光强为 0。

在偏振片 A 和 C 之间插入偏振片 B 时,由于偏振片 B 的正交基可以表示为:

$$\left\{ \frac{1}{\sqrt{2}}(| \uparrow \rangle + | \rightarrow \rangle), \frac{1}{\sqrt{2}}(| \uparrow \rangle - | \rightarrow \rangle) \right\} \quad (1.1.2)$$

我们可以将它们分别写为: $| \nearrow \rangle$ 和 $| \nwarrow \rangle$ 。量子态为 $| \nearrow \rangle$ 的光子将通过偏振片 B 。因此,通过偏振片 A 后量子态为 $| \rightarrow \rangle$ 的光子被偏振片 B 测量,光子状态改变的的概率是 50%,其中有 50% 的光子状态变成 $| \nearrow \rangle$,也就是说通过偏振片 A 的光子中有 50% 可以通过偏振片 B 。同样,通过偏振片 B 的光子被偏振片 C 测量后,其中 50% 的光子状态会变成态 $| \uparrow \rangle$ 。所以,能够通过偏振片 A 、 B 和 C ,最终到达投影屏的光子数量是光源产生的光子数量的 $1/8$,因此投影屏的光强是光源的 $1/8$ 。

从这个实验中我们可以看到,量子态可以是本征态,也可以是叠加态。如果把通过偏振片看做测量,那么就会发现,量子态经过测量就会发生状态塌陷,由最初的状态塌陷到测量给出的状态上。

第二节 状态空间和狄拉克表示法

一个系统的量子状态由各种粒子的位置、动量、偏振、自旋等组成,并且随时间的演化过程遵循薛定谔(Schrödinger)方程,而它的状态空间可以用波函数的 Hilbert 空间来描述,见图 1.5。

§ 1.2.1 状态空间

向量空间就是一组元素 $\{u, v, w, \dots\}$ 的集合 L ,并且满足:

- ① L 对加法运算是封闭的;
- ② 域 F 的任意一个数与 L 的任一元素相乘结果仍是 L 中的元素;
- ③ 对于 $u, v \in L, a, b \in F$,满足

$$\begin{aligned} a(u + v) &= au + av \in L \\ (a + b)u &= au + bu \in L \\ a(bu) &= (ab)u \end{aligned} \quad (1.2.1)$$

则称 L 为域 F 上的向量空间。当 F 为复数域,相应的向量空间就是复向量空间。

我们称定义了内积的向量空间为内积空间。内积的定义如下:对于每一对元素 $u, v \in L$,都有域 F 中的一个数与之对应,记为 (u, v) ,称为 u 和 v 的内积。内积具有如下性质:

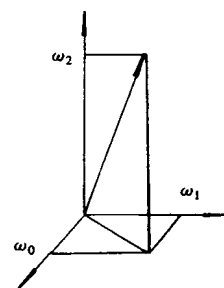


图 1.5 量子状态空间

$$\begin{aligned}
(u, u) &\geq 0 \\
(u, v) &= (v, u)^* \\
(w, au + bv) &= a(w, u) + b(w, v)
\end{aligned} \tag{1.2.2}$$

其中“ $*$ ”表示复共轭。 $(u, u) = |u|^2$ 的非负平方根为向量 u 的模。

一个完备的内积空间就是 Hilbert 空间。在 Hilbert 空间中取 m 个向量 $u_1, u_2, \dots, u_m$, 同时取域 F 中的 m 个数 $a_1, a_2, \dots, a_m$; 如果 $a_1 u_1 + a_2 u_2 + \dots + a_m u_m = 0$, 当且仅当对所有的 $a_i = 0 (i = 1, 2, \dots, m)$ 时才成立, 那么称向量 $u_1, u_2, \dots, u_m$ 是线性无关的。在一个 Hilbert 空间中, 如果最多只有 N 个线性无关的向量, 则称该向量空间是 N 维的。

§ 1.2.2 狄拉克表示法

量子力学系统由 Hilbert 空间中的向量表示, 表示量子态的向量称状态向量。通常量子状态空间和作用在其上的变换可以使用向量、矩阵来描述, 但是物理学家狄拉克 (Dirac) 提出了一套更为简洁的符号表示状态向量。使用称为右矢的符号 $|\psi\rangle$ 表示量子态, 使用称为左矢的符号 $\langle\psi|$ 表示右矢 $|\psi\rangle$ 的共轭转置。

例如, 一个二维复向量空间的正交基 $\{(1, 0)^T, (0, 1)^T\}$ 可以表示为 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ 。任意向量 $(a, b)^T$ 就可以表示为 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 的线性组合 $a|0\rangle + b|1\rangle$ 。需要注意的是: 基向量表示顺序的选择是任意的, 我们也可以用 $|0\rangle$ 表示 $(0, 1)^T$, 用 $|1\rangle$ 表示 $(1, 0)^T$ 。

两个向量 $|\psi_1\rangle$ 和 $|\psi_2\rangle$ 的内积记为 $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$, 而它们的外积则记为 $|\psi_1\rangle\langle\psi_2|$ 。例如, $\langle 0|0\rangle = 1$, 而 $\langle 0|1\rangle = 0$ 。

由于

$$|0\rangle\langle 1|1\rangle = |0\rangle\langle 1|1\rangle = |0\rangle \tag{1.2.3}$$

$$|0\rangle\langle 1|0\rangle = |0\rangle\langle 1|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{1.2.4}$$

所以, $|0\rangle\langle 1|$ 是将 $|1\rangle$ 转换为 $|0\rangle$, 而将 $|0\rangle$ 转换成 $(0, 0)^T$ 的一个变换。

如果, $|0\rangle = (1, 0)^T$, $|1\rangle = (0, 1)^T$, 那么:

$$\langle 0| = (1, 0)$$

$$\langle 1| = (0, 1)$$

则

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

同样, $|1\rangle\langle 0|$ 可以将 $|0\rangle$ 转换为 $|1\rangle$, 而将 $|1\rangle$ 转换为 $(0, 0)^T$ 。因为

$$|1\rangle\langle 0|0\rangle = |1\rangle\langle 0|0\rangle = |1\rangle \tag{1.2.5}$$

$$|1\rangle\langle 0|1\rangle = |1\rangle\langle 0|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{1.2.6}$$

而

$$|1\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (1 \ 0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{1.2.7}$$

可以看到, 狄拉克表示法为构造量子态的变换 (transformation) 带来了极大的方便, 所

有这些变换都是以基向量的形式表示的。例如,对应于经典的一位非门,就可以利用上边的两个变换将一个量子非门的变换构造为:

$$X = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.2.8)$$

现在我们用狄拉克表示法来描述 Hilbert 空间的一些性质。任意两个向量 $|\psi\rangle$ 和 $|\varphi\rangle$ 的内积为 $\langle\psi|\varphi\rangle$ 。它们具有如下属性:

$$\begin{aligned} \langle\psi|\psi\rangle &\geq 0 \\ \langle\varphi|(a|\psi_1\rangle + b|\psi_2\rangle) &= a\langle\varphi|\psi_1\rangle + b\langle\varphi|\psi_2\rangle \\ \langle\varphi|\psi\rangle &= \langle\psi|\varphi\rangle^* \\ \|\psi\| &= \langle\psi|\psi\rangle^{1/2} \end{aligned} \quad (1.2.9)$$

一个自转置操作在 Hilbert 空间中有特殊的表示法。它的特征态形成了 Hilbert 空间的一组完备的正交基。我们可以将自转置操作 A 写作如下形式:

$$A = \sum_n a_n P_n \quad (1.2.10)$$

a_n 是 A 的特征值, P_n 是对应 a_n 的特征向量空间的正交投影。 P_n 满足下面性质:

$$\begin{aligned} P_n P_m &= \delta_{n,m} P_n \\ P_n^\perp &= P_n \end{aligned} \quad (1.2.11)$$

§ 1.2.3 算符

算符是向量空间中的一个重要概念。规定一个具体的对应关系,用 A 表示,使得右矢空间中的某些右矢与其中另一些右矢相对应,例如使 $|\varphi\rangle$ 与 $|\psi\rangle$ 相对应,记为

$$|\varphi\rangle = A|\psi\rangle$$

这样的对应关系 A 称为算符。我们说算符 A 作用于右矢 $|\psi\rangle$, 得到右矢 $|\varphi\rangle$ 。

在算符的定义中,被算符 A 所用的右矢全体,称为 A 的定义域;得出的右矢全体称为值域。两者可以不同,也可一部分或完全重合。

一个算符 A , 其定义域是一个矢量空间,而又满足下列条件的称为线性算符:

$$\begin{aligned} A(|\psi\rangle + |\varphi\rangle) &= A|\psi\rangle + A|\varphi\rangle \\ A(|\psi\rangle a) &= (A|\psi\rangle) a \end{aligned}$$

其中 a 是任意复数。在量子力学中出现的算符,绝大多数都是线性算符。

线性算符具有下列性质:

- (1) 线性算符的值域也是一个右矢空间;
- (2) 若定义域是有限维空间,则值域空间的维数等于或小于定义域空间的维数;
- (3) 在定义域中,那些受 A 的作用得到零矢量的右矢全体,也构成一个右矢空间。

复数对右矢的数乘,可以看成算符对右矢的作用,每一个复数都可以看成一个算符。其中有两个特殊的算符:

$$0|\psi\rangle = |0\rangle, 1|\psi\rangle = |\psi\rangle$$

对一切 $|\psi\rangle$ 成立;前者称为零算符,后者称为单位算符。

两个算符 A, B 的和 $A + B$ 及乘积 BA 的定义是:

$$(A+B)|\psi\rangle = A|\psi\rangle + B|\psi\rangle$$

$$BA|\psi\rangle = B(A|\psi\rangle)$$

如果两个算符 A, B 满足

$$AB = BA$$

则说这两个算符是可对易的,各个算符之间不都是可对易的。我们规定用对易式

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

表示两个算符的对易关系。

上面我们在右矢空间中定义了算符 A , 由于每一个右矢在左矢空间中都有一个左矢与之对应, 所以算符 A 也就规定了左矢空间中一定范围内的左矢 $\langle\psi|$ 与左矢 $\langle\varphi|$ 的对应关系。也就是说, 在右矢空间中的每一个算符 A , 都对应着左矢空间中的某一个算符, 这个左矢空间中与 A 对应的算符, 我们记做 A^+ , 称为算符 A 的伴算符:

$$|\varphi\rangle = A|\psi\rangle \equiv |A\psi\rangle \rightarrow \langle\varphi| = \langle A\psi| \equiv \langle\psi|A^+$$

• 厄米算符

厄米算符是伴算符与本身相等的算符, 又称为自伴算符。如果算符 H 满足

$$H^+ = H$$

H 就是厄米算符。

• 幺正算符

幺正算符是满足下列条件的算符:

$$U^+U = UU^+ = 1$$

• 幺正变换

将一个幺正算符作用于一个矢量空间的全部矢量, 对其中的每个矢量 $|\psi\rangle$ 和 $|\varphi\rangle$, 各得到一个新矢量 $|\psi'\rangle$ 和 $|\varphi'\rangle$, 这一操作称为矢量的幺正变换。幺正变换不改变矢量的模, 也不改变两矢量的内积, 从而不改变正交关系。

• 投影算符

在空间中取一组基矢 $\{|v_i\rangle\}$, 投影算符是

$$P_i = |v_i\rangle\langle v_i|$$

P_i 作用到右矢 $|\psi\rangle$ 上得到

$$P_i|\psi\rangle = |v_i\rangle\langle v_i|\psi\rangle$$

这是基右矢 $|v_i\rangle$ 乘以矢量 $|\psi\rangle$ 在 $|v_i\rangle$ 上的分量 $\langle v_i|\psi\rangle$, 若沿用三维空间的术语, 这就是右矢 $|\psi\rangle$ 在 $|v_i\rangle$ 上的投影。 P_i 称为投向 $|v_i\rangle$ 子空间的投影算符。

§ 1.2.4 向量空间的直和

向量空间的直和是由已知的向量空间 R_1 和 R_2 构造一个更大的向量空间时常用的构造方法。

设向量空间 R_1 中的向量是 $|\alpha\rangle, |\beta\rangle, \dots$, 算符是 $A, B, \dots$; 而向量空间 R_2 中的向量为 $|\psi\rangle, |\varphi\rangle, \dots$, 算符为 $L, M, \dots$ 。现在构造它们两者的直和空间。

从 R_1 空间中取一个向量, 从 R_2 空间中取一个向量放在一起(不考虑次序), 例如 $|\alpha\rangle$ 与 $|\psi\rangle$ 放在一起, 根据一定的运算规则构成双向量, 我们用下列特殊记号表示: