



量子计算 基本原理

编 著
李秀林
李 阳



世纪高等教育精品大系

浙江科学技术出版社



世纪高等教育精品大系

ISBN 7-5341-2871-4



9 787534 128714 >

ISBN 7-5341-2871-4

定价：10.50元

浙江省高等教育重点教材

量子计算 基本原理

编 著 李秀林 李 阳

世纪高等教育精品大系

浙江科学技术出版社

图书在版编目 (CIP) 数据

量子计算基本原理 / 李秀林, 李阳编著. —杭州: 浙江
科学技术出版社, 2006. 6

(世纪高等教育精品大系)

ISBN 7-5341-2871-4

I. 量... II. ①李...②李... III. 量子-计量-高等学校-
教材 IV. TB939

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2006) 第 061195 号

编 著: 李秀林 李 阳

责任编辑: 梁 峥

封面设计: 孙 菁

世纪高等教育精品大系

量 子 计 算 基 本 原 理

浙江科学技术出版社出版发行

杭州之江印刷厂印刷

开本: 880 × 1230 1/32 印张: 4.5 字数: 105 000

2006 年 6 月第 1 版

2006 年 6 月第 1 次印刷

ISBN 7-5341-2871-4

定价: 10.50 元

前 言

量子力学的诞生从根本上和观念上改变了人类对自然的认识。在 20 世纪，人们将量子理论应用于物质科学和能源科学，开拓出半导体激光、核技术等重要的高新技术。21 世纪则出现了一门新兴的量子信息科学，它是量子力学与信息科学相互融合的结果，目前已成为世界关注的热门研究领域。

信息科学与物理学的本质联系是信息需要物理载体，物理态可以储存信息；信息是编码在物理态上的知识，是对物理态时空结构的编码；信息的提取是对编码的物理态的测量，信息的传输是对编码的物理态的传输，信息的加工处理是在计算机中对编码的物理态进行的有控制的动力演化。信息的存储、提取、传输、处理需要借助物理手段，计算机是处理信息的物理实体。量子信息科学以量子力学作为物理学基础，利用量子态进行信息的编码、处理和传输。量子信息科学根据量子力学的特性，如叠加性、纠缠性、非局域性和不可克隆性等，开发出经典信息科学无法达到的新功能，在加快运算速度、确保信息安全和增大信息容量等方面突破现有信息技术的物理极限，开拓出新的信息功能，为信息科学的持续发展提供了新的原理和方法。量子信息科学的诞生使信息科学的发展从“经典”时代跃升到“量子”时代，在人类文明社会的发展历程中将带来难以估计的影响。

量子信息科学的诞生，一方面可望形成量子信息技术（QIT）新产业，另一方面也引发人们对自然界及人类自身更

深层面问题的思考。量子计算机的研究目前虽然尚处于基础阶段，却是一个非常活跃的、富有生命力的研究领域。寻找物理上可扩展的具有容错能力的“量子芯片”是世界各国科学家奋斗的方向，迄今尚未取得重要突破。目前有两个研究方向最为热门：固体量子计算和基于量子光学的量子计算。

近年来，本书作者在杭州师范学院为本科生和研究生讲授“量子计算”这门课程，本书是在教学讲义的基础上编写而成的。全书共分4章，第一章介绍量子力学基本概念及其描述，第二章介绍量子计算，第三章介绍量子计算机的物理实现，第四章介绍量子计算机实现的主要困难及其对策，在内容安排上侧重基本原理和基本知识，为进一步学习和研究奠定基础。

本书的出版得到了浙江省教育厅高等教育重点教材建设项目和杭州师范学院教材建设项目的经费资助，杭州师范学院教务处和信息工程学院领导对本书的写作出版给予了关心与支持。在写作过程中，作者与奥地利科学院通讯院士、中国科技大学博士生导师张永德教授作过多次有益的讨论，在此一并表示衷心的感谢！

作者学识有限，不当之处在所难免，敬请读者批评指正。

作 者

2006年5月

目 录

| | |
|-------------------------------|-----------|
| 第一章 量子力学基本概念及其描述 ····· | 1 |
| 1.1 波动与粒子两象性, 波函数的统计诠释····· | 1 |
| 1.2 力学量的描述, 量子测量, 不确定关系····· | 2 |
| 1.3 量子态叠加原理, 表象与表象变换····· | 4 |
| 1.4 量子态随时间的演化····· | 6 |
| 1.5 密度算符与密度矩阵····· | 8 |
| 1.6 纯态、混合态及其描述····· | 10 |
| 1.6.1 纯态及其描述····· | 10 |
| 1.6.2 混合态及其描述····· | 11 |
| 1.6.3 约化密度矩阵····· | 15 |
| 1.7 量子纠缠····· | 18 |
| 1.7.1 纠缠纯态的基本概念····· | 18 |
| 1.7.2 Schmidt 分解····· | 23 |
| 1.7.3 部分熵纠缠度····· | 27 |
| 1.8 EPR 佯谬和 Bell 不等式····· | 27 |
| 1.8.1 EPR 佯谬····· | 27 |
| 1.8.2 Bell 不等式····· | 30 |
| 第二章 量子计算 ····· | 35 |
| 2.1 量子比特····· | 36 |

| | | |
|------------|-------------------------|------------|
| 2.2 | 量子寄存器 | 39 |
| 2.3 | 量子逻辑门 | 44 |
| 2.3.1 | 量子逻辑门的可逆性 | 44 |
| 2.3.2 | 量子逻辑门 | 46 |
| 2.4 | 量子算法 | 63 |
| 2.4.1 | Deutsch 问题 | 65 |
| 2.4.2 | 大数因子分解的 Shor 量子算法 | 67 |
| 2.4.3 | Grover 的无序数据库搜索量子算法 | 80 |
| 第三章 | 量子计算机的物理实现 | 86 |
| 3.1 | 指导性原则 | 86 |
| 3.2 | 实现量子计算的技术和方案 | 88 |
| 3.2.1 | 谐振子量子计算机 | 88 |
| 3.2.2 | 光子量子计算机 | 91 |
| 3.2.3 | 离子阱量子计算机 | 96 |
| 3.2.4 | 用光学共振腔量子电动力学技术实现量子计算 | 101 |
| 3.2.5 | 量子点技术 | 108 |
| 3.2.6 | 核磁共振量子计算机的实验实现 | 111 |
| 第四章 | 量子计算机实现的主要困难及其对策 | 118 |
| 4.1 | 量子干涉与纠缠 | 118 |
| 4.2 | 纠缠和消相干 | 123 |
| 4.3 | 量子纠错码 | 125 |
| 4.4 | 稳定子 | 129 |
| | 参考文献 | 135 |

第一章 量子力学基本概念及其描述

1.1 波动与粒子两象性，波函数的统计诠释

实验证明，微观粒子具有波粒两象性。在实验观测中所展现出来的“粒子性”，只不过是微观粒子的“原子性”，即粒子是具有确切物理属性（如质量、电荷等）的一个客体，它并不意味着微观粒子在空间中的运动具有确切的轨道，因为轨道的概念是经典力学中粒子运动的特性，它与微观粒子双缝干涉实验中显示出来的微观粒子的波动性是不相容的。“which-way 实验”证明，当人们确切地知道粒子是从双缝中的哪一条缝中穿过时，双缝干涉花纹就消失了。

在实验中观测到的微观粒子的这种“波动性”只不过是波动现象最本质的特征，即波的“相干叠加性”，它并不意味着这种波动一定是某种实在的物理量的波动。

M. Born 提出“几率波”的概念，即波函数的统计诠释。它把实物粒子的“原子性”和波动的“相干叠加性”统一起来，这个概念的正确性，已为无数实验所证实。

按照波函数的统计诠释，设一个微观粒子用波函数 $\varphi(r)$ 描述，则 $|\varphi(r)|^2 dx dy dz$ 就是发现粒子位置在 r 点的体积元 $dx dy dz$ 中的几率。因此，波函数也称为“几率幅”。按几率

的含义，要求波函数满足归一化条件

$$\iiint |\varphi(r)|^2 dx dy dz = 1$$

全空间概率分布所呈现的物理的本质属性是由“相对概率分布”体现的，因此， $\varphi(r)$ 与 $c\varphi(r)$ （ c 为任意常数）所描述的“粒子”在空间不同地点的相对概率分布是完全相同的，它们描述的是同一个几率波。所以，在量子力学中，波函数总是有常数因子的不确定性，基于这种不确定性，波函数总可以要求它满足归一化条件。在保证归一化条件下，波函数还有相位不确定性，因为 $\varphi(r)$ 与 $e^{i\delta}\varphi(r)$ （ δ 为实常数）所描述的概率分布完全相同。

波函数所预言的概率分布，只是对粒子测量结果的一种预期，所预言的概率是潜在的，并非粒子已具有那样的分布而等待人们去观测它。

1.2 力学量的描述，量子测量，不确定关系

在量子力学中，力学量就其本质而言，是对量子态的某种作用，在理论的数学结构中它用 Hermite 算符描述。算符代表对量子态的某种运算，如动量算符 $\hat{p} = -i\hbar \nabla$ 的这种表示形式，其直角坐标分量与坐标各分量满足下列对易关系

$$[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = \hat{x}_j \hat{p}_k - \hat{p}_k \hat{x}_j = i\hbar \delta_{jk} \quad (1.2.1)$$

若微观粒子体系处于量子态 $\varphi(r)$ ，对它测量可观测力学量 \hat{A} ，则所得 \hat{A} 的平均值（期望值）为

$$\bar{A}_\varphi = \int \varphi^*(r) \hat{A} \varphi(r) dr \quad (1.2.2)$$

其中 $\varphi(r)$ 是归一化的。

如 $\varphi(r)$ 不是 \hat{A} 的本征函数，只要 \hat{A} 是可观察力学量，即 \hat{A}

的本征函数构成完备集，则 $\varphi(r)$ 一定可用 \hat{A} 的本征函数族 $\{\varphi_n(r)\}$ 展开

$$\varphi(r) = \sum_n c_n \varphi_n(r) \quad (1.2.3)$$

$\varphi_n(r)$ 满足本征方程

$$\hat{A}\varphi_n(r) = a_n \varphi_n(r)$$

将 (1.2.3) 式代入 (1.2.2) 式，得

$$\bar{A}_\varphi = \int (\sum_n c_n^* \varphi_n^*(r)) \hat{A} (\sum_n c_n \varphi_n(r)) dr = \sum |c_n|^2 a_n \quad (1.2.4)$$

即平均值 \bar{A}_φ 是实数本征值 a_n 的加权平均，加权系数为 $\varphi(r)$ 用 $\{\varphi_n(r)\}$ 展开时系数的模方；单次测量所得 \hat{A} 的数值必定是 \hat{A} 的本征值之一，测得某个本征值 a_n 的概率，是被测量子态 $\varphi(r)$ 的展开式 (1.2.3) 中 a_n 本征值所对应的本征态 $\varphi_n(r)$ 的系数的模方 $|c_n|^2$ 。决定概率权重的这些系数 c_n ，随着被测态 $\varphi(r)$ 的演化，也可以随时间变化。

测量使量子态 $\varphi(r)$ 受到干扰，并使它突变到该次测量所得本征值对应的本征态上，这个过程称为“波包塌缩”。这个突变过程是随机的，不可逆的，非局域的，而且消除了相干性。

可以证明，两个力学量 \hat{A} 和 \hat{B} 可以同时观测的充要条件是它们相应算符彼此对易

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0 \quad (1.2.5)$$

如果 \hat{A} 和 \hat{B} 不对易，则它们不能同时测量。

在量子力学的数学结构中的对易关系式 (1.2.1) 体现了微观世界的奇特性质，这种奇特性质的另一表现就是不确定度关系

$$\Delta x_j \Delta p_k \geq \frac{\hbar}{2} \delta_{jk} \quad (1.2.6)$$

1.3 量子态叠加原理，表象与表象变换

一个体系若处于某个力学量 \hat{F} 的本征态 φ_n ，则测量 \hat{F} 所得结果为 F_n 。如体系处于 \hat{F} 的两个本征态的叠加态

$$\varphi = c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2 \quad (1.3.1)$$

则测量 \hat{F} 所得结果不是惟一确定的，或者为 F_1 ，或者为 F_2 ，这就是量子态的叠加原理。当体系处于某个力学量的若干个本征态的叠加态时，就导致测量结果的不确定性，这完全是一种量子力学效应。当体系处于力学量 \hat{F} 的叠加态式 (1.3.1) 时，测量 \hat{F} 得到 F_1 的概率为 $|c_1|^2$ ，测得结果为 F_2 的概率为 $|c_2|^2$ ， $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$ 为归一化条件。

量子态的整体相位具有不定性，当 α 为实数时， $e^{i\alpha}(c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2)$ 与 $c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2$ 描述的是同一个量子态。叠加态的相对相位是有物理意义的，如 $c_1\varphi_1 + e^{i\alpha}c_2\varphi_2$ 与 $c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2$ 描述的量子态是不同的 ($\alpha \neq 0$ ，实数)。

设 φ_n 是体系的某一组力学量完全集的共同本征态，按量子态叠加原理，体系的任何一个量子态 φ 都可以表示成诸本征态 $\{\varphi_n\}$ 的线性叠加

$$\varphi = \sum_n c_n \varphi_n \quad (1.3.2)$$

利用 φ_n 的正交归一性，可得

$$c_n = \int \varphi_n^* \varphi dr$$

如完全集包括力学量 \hat{F} ，且 $\hat{F}\varphi_n = F_n\varphi_n$ ，则 $|c_n|^2$ 就代表在 φ 态测量 \hat{F} 得到 F_n 的概率， $\sum_n |c_n|^2 = 1$ 。

由式 (1.3.2) 可以看出, 所有的 c_n 给定, 则量子态 φ 也就随之确定了, 如 φ_n 是一组力学量完全集 \hat{F} 的共同本征态, 这组展开系数 (复数) $\{c_n\}$ 就是量子态 φ 在 \hat{F} 表象中的表示。它所包含的信息, 除了 $|c_n|^2$ 表示概率外, 各叠加系数的相对相位也有物理意义, 它们是测量除 \hat{F} 之外的其他力学量时呈现出的干涉现象的根源。人们可以选择不同的力学量完全集, 每一组力学量是完全集的共同本征态都可以作为一个表象的一组正交完备基矢, 也就是说, 体系的任一量子态都可以采用不同的表象来描述, 这些不同的描述是通过一个么正变换相联系的。

Dirac 把体系的一个量子态 φ 看成 Hilbert 空间中的一个矢量, 记作 $|\varphi\rangle$, 称为“右矢”; 在共轭空间中相应的态矢记作 $\langle\varphi|$, 称为“左矢”。这种描述方式未涉及具体表象, 当采用具体的 \hat{F} 表象时, 如 \hat{F} 的本征态记为 $|\varphi_n\rangle$ (或简记为 $|n\rangle$), 以 $\{|n\rangle\}$ 作为基矢所张的空间, 即 \hat{F} 表象, 在此表象中, 态矢 $|\varphi\rangle$ 表示成

$$|\varphi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \quad (1.3.3)$$

其中 $c_n = \langle n|\varphi\rangle$, 它表示态矢 $|\varphi\rangle$ 在基矢 $|n\rangle$ 方向的投影或分量值。这组展开系数 $\{c_n\}$ 足以刻画量子态 $|\varphi\rangle$, 由式 (1.3.3) 可得

$$|\varphi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle = \sum_n \langle n|\varphi\rangle |n\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\varphi\rangle = \sum_n P_n |\varphi\rangle \quad (1.3.4)$$

上式中的 $P_n = |n\rangle \langle n|$ 是沿基矢方向 $|n\rangle$ 的投影算符, 满足

$$\begin{aligned} \hat{p}_n \hat{p}_{n'} &= \hat{p}_n \delta_{nn'} \\ \hat{p}_n^\dagger &= \hat{p}_n \end{aligned} \quad (1.3.5)$$

由于 $|\varphi\rangle$ 是任意态, 所以

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = 1 \quad (1.3.6)$$

式 (1.3.6) 是基矢 $\{|n\rangle\}$ 的完备性的表现。

量子态 $|n\rangle$ 经过算符 \hat{L} 的运算后, 变成量子态 $|\phi\rangle$

$$\hat{L}|\phi\rangle = |\phi\rangle \quad (1.3.7)$$

采用具体表象后, 算符可表示成矩阵, 如采用 \hat{F} 表象 ($\hat{F}|n\rangle = F_n|n\rangle$), 式 (1.3.7) 可化为

$$\begin{aligned} \langle n|\hat{L}|\phi\rangle &= \langle n|\phi\rangle \\ \sum_n \langle n|\hat{L}|n'\rangle \langle n'|\phi\rangle &= \langle n|\phi\rangle \end{aligned} \quad (1.3.8)$$

令 $\langle n|\phi\rangle = c_n$, $\langle n|\phi\rangle = b_n$, 则列矢量

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (1.3.9)$$

分别代表量子态 $|\phi\rangle$ 和 $|\phi\rangle$ 在 \hat{F} 表象中的表示, 式 (1.3.7) 可表示成

$$\begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} & \cdots \\ L_{21} & L_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (1.3.10)$$

式中 $L_{mn} = \langle n|\hat{L}|n'\rangle$ 为算符 \hat{L} 在 \hat{F} 表象中的矩阵表示的矩阵元, 算符在自身表象中 (即以自己的本征态为基矢的表象) 为对角矩阵, 对角元就是算符的本征值。

1.4 量子态随时间的演化

以上讨论的量子态, 都是指某一时刻 t 而言的。量子态随时间的演化遵守 Schrödinger 方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi(t)\rangle = \hat{H} |\varphi(t)\rangle \quad (1.4.1)$$

其中 \hat{H} 是体系的 Hamilton 算符。当 \hat{H} 不显含 t 时，式 (1.4.1) 的解在形式上可表示成

$$|\varphi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\varphi(0)\rangle \quad (1.4.2)$$

Schrodinger 方程表明量子态以决定论的形式演化，量子态的演化过程是可逆的、定域的，不存在随机的不可预测性，而且保持了量子态的相干性。量子物理就是由 Schrodinger 方程和量子测量的随机塌缩构成的。

以上讨论在形式上未涉及具体表象。当采用具体表象时，如取以包括 \hat{H} 在内的一组力学量完全集的本征态 $|\varphi_n\rangle$ 为基矢构成能量表象，则

$$\hat{H} |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle \quad (1.4.3)$$

设体系的初始状态 ($t=0$) 为

$$|\varphi(0)\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle \quad (1.4.4)$$

则按式 (1.4.2) 有

$$\begin{aligned} |\varphi(t)\rangle &= e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\varphi(0)\rangle \\ &= \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n\rangle \end{aligned} \quad (1.4.5)$$

式中 c_n 完全由初态确定，即

$$c_n = \langle \varphi_n | \varphi(0) \rangle \quad (1.4.6)$$

在量子力学中，通常引进含时的么正变换来描述量子态随时间的演化，令

$$|\varphi(t)\rangle = U(t,0) |\varphi(0)\rangle \quad (1.4.7)$$

代入式 (1.4.1)，得

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t,0) |\varphi(0)\rangle = \hat{H} U(t,0) |\varphi(0)\rangle$$

由于 $|\varphi(0)\rangle$ 是任意的，所以

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t,0) = \hat{H} U(t,0) \quad (1.4.8)$$

其中 $U(t,0)$ 称为量子态随时间演化的算符。式(1.4.8)的 Hermite 共轭式为

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U^+(t,0) = U^+(t,0) \hat{H}^+ \quad (1.4.9)$$

利用

$$\hat{H}^+ = \hat{H}$$

$$U^+ \hat{H} U(t,0) - U^+(t,0) \hat{H}^+ U$$

$$\text{得出} \quad \frac{\partial}{\partial t} [U^+(t,0) U(t,0)] = 0 \quad (1.4.10)$$

考虑初始条件 $U(0,0) = 1$ ，则得

$$U^+(t,0) U(t,0) = 1 \quad (1.4.11)$$

即 $U(t,0)$ 为幺正算符，这是概率守恒的结果。

当 \hat{H} 不显含 t 时，式(1.4.8)的解为

$$U(t,0) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \quad (1.4.12)$$

1.5 密度算符与密度矩阵

定义与量子态 $|\varphi\rangle$ 相应的投影算符 $\rho = |\varphi\rangle\langle\varphi|$ 为与量子态 $|\varphi\rangle$ 相应的密度算符。当考虑随时间的演化时，对量子态 $|\varphi(t)\rangle$ 可定义相应的密度算符

$$\rho(t) = |\varphi(t)\rangle\langle\varphi(t)| \quad (1.5.1)$$

按此定义，显然

$$\rho^+ = \rho \quad (1.5.2)$$

$$\rho^2 = \rho \quad (1.5.3)$$

如采用 \hat{F} 表象，则与量子态 $|\varphi(t)\rangle$ 相应的密度算符可表示成如下矩阵形式

$$\begin{aligned} \rho_{nn'}(t) &= \langle n | \rho(t) | n' \rangle \\ &= \langle n | \varphi(t) \rangle \langle \varphi(t) | n' \rangle = c_n(t) \cdot c_{n'}^*(t) \end{aligned} \quad (1.5.4)$$

这个矩阵称为“密度矩阵”，它可以作为量子态的另一种描述方式。

密度矩阵的对角元

$$\rho_{nn'} = |c_n(t)|^2 = |\langle n | \varphi(t) \rangle|^2 \geq 0 \quad (1.5.5)$$

是在 $|\varphi\rangle$ 态下测量 F 得到 F_n 值的概率，也是投影算符 P_n 在 $|\varphi\rangle$ 态下的平均值。由 $|\varphi(t)\rangle$ 的归一化条件，可得密度矩阵的对角元的和等于 1，即

$$\text{tr} \rho = \sum_n |c_n(t)|^2 = 1 \quad (1.5.6)$$

密度算符 ρ 还可以表示成

$$\begin{aligned} \rho &= |\varphi(t)\rangle \langle \varphi(t)| \\ &= \sum_{nn'} |n\rangle \langle n | \varphi(t) \rangle \langle \varphi(t) | n' \rangle \langle n'| \end{aligned} \quad (1.5.7)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{nn'} c_n(t) c_{n'}^*(t) |n\rangle \langle n'| \\ &= \sum_{nn'} \rho_{nn'}(t) |n\rangle \langle n'| \end{aligned} \quad (1.5.8)$$

从式 (1.5.4) 可以看出，如 $\rho_{nn'} = 0$ ，则 $c_n = 0$ 或 $c_{n'} = 0$ ，二者必居其一；只有当 c_n 和 $c_{n'}$ 均不为 0 时， $\rho_{nn'}$ 才不为 0。所以，与量子态 $|\varphi\rangle$ 相应的密度矩阵的矩阵元 $\rho_{nn'}$ 出现（即不为 0）时，量子态 $|\varphi\rangle$ 中必含有 $|n\rangle$ 和 $|n'\rangle$ 态， $\rho_{nn'}$ 的值与 $|n\rangle$ 和 $|n'\rangle$ 态在 $|\varphi\rangle$ 态中出现的几率和相对相位都有关。

力学量的平均值可以用密度矩阵计算。在 $|\varphi\rangle$ 态下，力学