

目录

第二章 量子力学的基本原理	3
2.1 量子比特与薛定谔的猫	4
2.1.1 态叠加原理	4
2.1.2 量子比特与量子力学原理	7
2.1.3 多个量子比特	16
2.1.4 量子不可克隆定理与幺正性	19
2.1.5 薛定谔的猫	22
2.1.6 习题	25
2.2 算符与物理量	25
2.2.1 基础态	25
2.2.2 线性算符	26
2.2.3 为什么物理量用厄米算符表示	33
2.2.4 不确定原理与算符	35
2.2.5 幺正演化与薛定谔方程	39
2.2.6 算符的矩阵表示	41
2.2.7 *一个数学附录	47
2.2.8 习题	50
2.3 量子纠缠	51
2.3.1 量子纠缠能实现超光速信息传递吗?	52
2.3.2 如何提取纠缠态中的信息	55
2.3.3 量子密集编码	57
2.3.4 量子隐形传态	57
2.3.5 GHZ态以及为什么爱因斯坦错了	59
2.3.6 多体量子纠缠	62
2.4 补充材料: 海森堡是怎么想到矩阵相乘的?	62

目录 2

2.4.1	原子光谱的一些事实和玻尔的新观念	63
2.4.2	海森堡的思路	64
2.4.3	海森堡思想的现代版本	68

第二章 量子力学的基本原理

陈童

本章将会深入地探讨量子力学最基本最核心的原理，同时也会讲述量子力学的基本语言。这些原理和语言都是普遍适用的，它适用于单粒子体系、多粒子体系，适用于原子分子，也适用于许许多多原子分子构成的一整块材料，适用于量子计算机和量子通信，适用于量子场、甚至也适用于整个宇宙！

本章的第一节我们也讨论了量子比特、量子货币、量子不可克隆定理、和薛定谔的猫等等内容，当然，我们主要是想借这些内容阐明量子力学的基本原理。本章的第二节会比较抽象一些，是从算符的角度概括量子力学的原理，搭建量子力学的基本理论框架。第三节将探讨量子力学的核心本质之一，量子纠缠。我们将解释为什么量子纠缠不能实现超光速信息传递，我们还将简要讨论量子纠缠在量子通信中的重要应用，并且会说服大家，为什么爱因斯坦错了。在本章的补充材料中，我们将回顾历史，讨论海森堡是如何想到矩阵和矩阵相乘的，并进而把海森堡的思想和量子力学的基本原理联系起来。

2.1 量子比特与薛定谔的猫

2.1.1 态叠加原理

物理系统的量子状态可以由波函数来描述，对于一个微观粒子来说，波函数就是形如 $\psi(x, t)$ 的一个复函数。玻恩告诉我们，在量子力学里我们只能讨论概率，波函数的模方 $|\psi(x)|^2$ 就给出微观粒子在 x 处出现的概率密度。波函数包含了量子系统的所有信息，但是我们不能直接测量波函数，我们能直接测量的是诸如波函数模方这样的概率。

在经典物理里面我们有时候也使用概率，但在那里我们之所以使用概率都是因为我们没有掌握足够的信息，比如由于我们没有收集到所有大气分子的运动信息，我们就无法准确地计算明天的天气情况，因此我们才说说明天下雨的概率是多少多少，但只要我们足够努力，原则上我们可以收集到所有大气分子的信息。在经典物理里，原则上我们能够掌握所有信息，并进而用这些信息确定地计算出诸如明天是否会下雨这样的问题。但是量子力学的概率是根本不同的，它是量子力学本身的内在性质，或者说是我们的世界本身的内在性质，也就是说，即使你知道所有的信息，也就是知道系统的波函数，你也只能计算概率，因为我们的世界本身就是如此，就是不确定的。何况，在量子力学里面，对于系统的一个任意状态，我们实际上常常无法通过测量收集到关于这个状态的所有信息，量子力学本身限制了我们的信息提取能力。

量子力学的规律是普适的，不仅仅微观粒子可以用一个波函数来描写，整个宇宙都能用一个波函数来描写，我们可以称之为宇宙波函数，著名物理学家霍金的重要工作之一就是研究这个宇宙波函数。当然，宇宙波函数比单个微观粒子的波函数 $\psi(x, t)$ 要复杂好多，它大概是下面那样的，

$$\Psi[a(t), h_{ij}(x), A_i(x), \psi_e(x), \psi_q(x), \dots] \quad (2.1)$$

其中 $a(t)$ 是宇宙的膨胀因子， $h_{ij}(x, t)$ 是引力波， $A_i(x)$ 是电磁场， $\psi_e(x)$ 是电子场， $\psi_q(x)$ 代表夸克场，此外还需要写上胶子场等等，总之要把一切基本粒子的场都作为宇宙波函数的自变量包括进来。

但是不管多么复杂，所有的波函数都满足态叠加原理，可以说态叠加原理是量子力学里面最基本的原理。根据态叠加原理，波函数 ψ 和波函数 $c\psi$ (c 是一个任意的非零复数)描写的是同一个量子态。更重要的是，根据态叠加原理，如果 ψ_1 是系统的一个可能态， ψ_2 也是系统的一个可能态，那

么它们的任意线性叠加也将是一个可能态，即 $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ (c_1, c_2 是两个任意的复数)也是一个可能态。

由于这个线性叠加原理，一个量子系统所有可能态的集合就构成了一个多维线性空间，而一个量子态 ψ 就是这个线性空间里的一个矢量，常常也记作 $|\psi\rangle$ 。 $|\psi\rangle$ 这样的记号和波函数是一一对应的，但是，相比于波函数的描述， $|\psi\rangle$ 这样的量子态记号有许多优点：首先，它是通用的，无论是对于单粒子，还是多粒子，甚至是整个宇宙，我们都可以用一样的这种记号来表示其量子力学状态。其次，它是抽象的，它抽象地对应于量子态，而与具体怎么定量描述这个量子态无关。而波函数是一个具体的函数，它只是对量子态的一种具体描述方式，而后面我们将会看到，一个量子态可以有无穷多种相互等价的具体描述方式。比如，对于单个微观粒子而言，符号 $\psi(x)$ 总是一个数值，而 $|\psi\rangle$ 不是用来表示这个函数值，而是用来代表函数映射本身，因此它不是一个复数，而是一个抽象的记号，当然，对于单个微观粒子而言，这个记号和具体的函数 $\psi(x)$ 是一一对应的。这样的记号称作狄拉克记号，不管是微观粒子的波函数还是更复杂的宇宙波函数，它们所描述的量子态都可以用同样的狄拉克记号来表示。用狄拉克记号，量子态的线性叠加就可以写成如下形式，

$$|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle. \quad (2.2)$$

作为线性空间里的矢量，人们完全可以按照线性代数里的方法取一个合适的矢量基，然后在这个矢量基中将态矢量 $|\psi\rangle$ 展开成分量形式，并把它的所有分量排列成一个列矢量，所以，如果你觉得 $|\psi\rangle$ 这样的记号过于抽象，你也完全可以将它想象成一个普通的列矢量，这两者是可以相互对应的。你可能想到，线性代数里除了有列矢量，还有行矢量， $|\psi\rangle$ 可以看作列矢量，那么行矢量是什么呢？很简单，行矢量就是列矢量的转置，但是，由于我们考虑的线性空间不是一个实线性空间，而是复线性空间，所以在量子力学里我们要多加上一个复数共轭(为什么要加复数共轭的原因我们稍后会解释)，将行矢量规定为列矢量的共轭转置，也就是先将一个列矢量的每一个分量取复数共轭，然后再将结果转置， $|\psi\rangle$ 的共轭转置就记作 $\langle\psi|$ ，即

$$\langle\psi| = |\psi\rangle^\dagger, \quad (2.3)$$

记号 † 就表示共轭转置，也叫厄米共轭。因此在量子力学里，一个量子态如果用列矢量来表示，我们就用 $|\psi\rangle$ 这样的记号，如果用行矢量来表示我们就用 $\langle\psi|$ 这样的记号。

我们知道，一个行矢量乘以一个列矢量就会得到一个数。所以在量子力学里，由任意两个量子态 $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ ，我们都可以计算出一个复数，记作 $\langle\phi|\psi\rangle$ ，它就是先将 $|\phi\rangle$ 态表示成行矢量 $\langle\phi|$ ，然后再将行矢量 $\langle\phi|$ 乘以列矢量 $|\psi\rangle$ ， $\langle\phi|\psi\rangle$ 就表示这个乘积。你已经想到了，由刚才的两个量子态，我们还可以计算出另一个复数 $\langle\psi|\phi\rangle$ ，这两个复数是什么关系呢？很显然， $\langle\psi|\phi\rangle$ 就是 $\langle\phi|\psi\rangle$ 的共轭转置，即 $\langle\phi|\psi\rangle^\dagger = |\psi\rangle^\dagger \cdot \langle\phi|^\dagger = \langle\psi|\phi\rangle$ 。这里请回想一下转置的规则 $(AB)^T = B^T A^T$ ，而复数共轭的规则是普通的，因此共轭转置的规则就是 $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$ 。当然，一个复数的共轭转置其实就是它的复共轭（复数的转置还是它本身），因此我们有

$$\langle\phi|\psi\rangle^* = \langle\psi|\phi\rangle. \quad (2.4)$$

当然狄拉克记号和波函数是一一对应的，你可能想知道 $\langle\phi|\psi\rangle$ 用波函数的形式来写是什么，对于单个微观粒子的情形，结果如下

$$\langle\phi|\psi\rangle = \int dx \phi^*(x) \psi(x). \quad (2.5)$$

为了帮助你理解这个结果和我们上一段说的有什么联系，我们不妨将 $\psi(x)$ 记为 ψ_x ，将 $\phi(x)$ 记为 ϕ_x ，并且将积分写成求和(定积分的定义本来就是求和以后取极限)，这样上来上面这个结果就可以重写成

$$\langle\phi|\psi\rangle = \sum_x \phi_x^* \psi_x, \quad (2.6)$$

你想一下，这是不是行矢量乘以列矢量的标准形式（当然，别忘了对行矢量我们多了一个复数共轭）？ ψ_x 就是列矢量 $|\psi\rangle$ 的第 x 个分量嘛！

特别的，我们考虑 $|\psi\rangle$ 与它自身的乘积，即 $\langle\psi|\psi\rangle$ ，对于单个微观粒子情形，按照公式(2.5)，它就是

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int dx \psi^*(x) \psi(x) = \int dx |\psi(x)|^2, \quad (2.7)$$

玻恩告诉我们，这就是处在 $|\psi\rangle$ 态上的粒子在空间各点出现的概率的总和，通常要求这个总概率等于1，称之为量子态的归一化。现在我们就能理解为什么在定义行矢量的时候要多加一个复数共轭了，因为只有这样 $\langle\psi|\psi\rangle$ 才是概率嘛，尤其是，只有这样 $\langle\psi|\psi\rangle$ 才会是一个正实数嘛，即对于任意 $|\psi\rangle$

$$\langle\psi|\psi\rangle \geq 0, \quad (2.8)$$

式中等于0仅当 $|\psi\rangle$ 本身为0时才可能。 $\langle\psi|\psi\rangle$ 也称作态矢量 $|\psi\rangle$ 模长的平方，因此归一化的态矢量就是模长为1的态矢量，即满足

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1. \quad (2.9)$$

由于 $|\psi\rangle$ 和 $c|\psi\rangle$ 描述的是同一个量子态，因此态矢量的模长没有绝对的物理意义，这就是为什么我们可以将它们归一化的原因。

在数学上 $\langle\phi|\psi\rangle$ 有一个专门的名称，它叫作态矢量 $|\psi\rangle$ 和态矢量 $|\phi\rangle$ 的内积，因为它其实是我们熟悉的三维空间矢量内积(点乘)的推广。和通常两个三维空间的单位矢量的内积大小反映的是这两个矢量在方向上的靠近程度一样，两个模长为1的态矢量的内积反映的其实是这两个态矢量之间的相似程度。特别的，两个完全不相似的态矢量的内积必定为零，这时候我们称这两个态矢量正交。很显然，这里的正交概念也是普通的三维空间矢量正交概念的一个推广。数学家常常把一个定义了内积的线性空间称作希尔伯特空间。因此很明显，态叠加原理以及上面几段的定义告诉我们，一个量子系统所有可能量子态的集合构成了一个希尔伯特空间，常常记作 \mathcal{H} 。

2.1.2 量子比特与量子力学原理

你可能听说过量子比特，量子比特就是量子信息的基本单位，是量子计算机技术的基础。经典信息的单位是比特，一个比特就是或者为0或者为1的两种可能取值，实现一个经典比特需要两个不同的状态，比如0用某个系统的低电压状态来表示，1则用高电压状态来表示。一个量子比特则是一个量子系统，它可以说是最简单的量子力学系统，它有两个完全不同的量子态，其中一个叫 $|0\rangle$ 态，另一个叫 $|1\rangle$ 态。量子比特有多种实现方式，比方说我们可以把一个两能级量子系统的低能级称作 $|0\rangle$ 态，高能级称作 $|1\rangle$ 态。再比方说，我们知道电子有自旋，电子自旋角动量的z分量 S_z 只有两个不同的量子化取值 $\pm\hbar/2$ ，这对应于电子的两个不同自旋状态， $S_z = \hbar/2$ 时我们就说电子处在自旋向上态，记为 $|\uparrow\rangle$ ，相反 $S_z = -\hbar/2$ 时我们就说电子处在自旋向下态，记作 $|\downarrow\rangle$ 。我们可以把一个电子的自旋量子态当作一个量子比特，自旋向下态 $|\downarrow\rangle$ 称作 $|0\rangle$ 态，自旋向上态 $|\uparrow\rangle$ 称作 $|1\rangle$ 态。当然，我们也可以把一个光子的两个不同偏振态分别当作 $|0\rangle$ 态和 $|1\rangle$ 态，比如 $|0\rangle$ 对应x方向偏振的偏振态 $|x\rangle$ ， $|1\rangle$ 对应y方向偏振的偏振态 $|y\rangle$ 。

量子态的区分性

总之，实现量子比特 $|0\rangle$ 态和 $|1\rangle$ 态的方式很多。但是所有这些实现方式必须满足一个共同的要求，那就是 $|0\rangle$ 态和 $|1\rangle$ 必须可以确定地区分。比方说，光子的两个偏振态 $|x\rangle$ 和 $|y\rangle$ 就可以确定地区分，如果有两个光子，一个处在 $|x\rangle$ 态，另一个处在 $|y\rangle$ 态，那你只要取一个偏振化方向为 x 方向的偏振片(即这个偏振片会让 x 方向偏振的偏振光顺利通过，而完全吸收偏振方向与 x 垂直的 y 方向偏振的偏振光)，然后分别让这两个光子通向这个偏振片，则能通过的光子就一定处于 $|x\rangle$ 态，通不过的光子就一定处于 $|y\rangle$ ，这样你就能以100%的把握将这两个态区分开来，这就是可以确定地区分的含义。相反，光子沿着45度角方向偏振的偏振态(我们记为 $|+\rangle$)和 $|x\rangle$ 偏振态之间就不可以确定地相互区分，这是因为， $|x\rangle$ 偏振态的光子当然一定能通过偏振化方向为 x 方向的偏振片，但是 $|+\rangle$ 偏振的光子也有一定的概率(按照马吕斯定律，这个概率是 $\cos^2(\pi/4)$)通过这个偏振化方向为 x 方向的偏振片，因此，假设你只有一个光子只能做一次实验，如果你观测到光子通过了偏振片，你就无从判断你的光子原来是处在 $|+\rangle$ 态还是处在 $|x\rangle$ 态，因此你就不能100%地将这两个量子态区分开来。类似的，光子沿着135度角方向偏振的偏振态(我们记为 $|-\rangle$)和 $|x\rangle, |y\rangle$ 之间也都不可以确定地相互区分。当然，由于135度角和45度角成正交关系，所以 $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$ 这两个偏振态是可以确定地区分的。

量子态的区分性是量子力学的一个很本质的性质，它在前沿的量子信息科学中有很重要的应用。比方说，有人提出可以利用这种区分性制作量子货币。通常货币的一个重大缺陷是人们总可以制造假币，即使电子货币也有假币。但是，量子货币绝对无法造假。

所谓的量子货币，是指的这样一种货币，每一张量子货币上都有一个编码，和一个确定偏振态的光子，比方说，这个偏振态可以是 $|x\rangle, |y\rangle, |+\rangle, |-\rangle$ 这四个偏振态中的某一个，我们不妨假设这四个偏振态有相同的概率被选用。量子货币上的编码和相应的光子偏振态之间是相对应的，可以用来检验光子属于四个偏振态中的哪一个。但是，编码和偏振态之间的对应关系只有银行的系统知道，是绝对不公开的。比方说，如果光子的偏振态是 $|x\rangle$ ，就编码为00，如果是 $|y\rangle$ 就编码为01，而如果光子的偏振态是 $|+\rangle$ ，就编码为10，如果是 $|-\rangle$ ，就编码为11。对于真币，银行的系统看到编码的第一位是0，就知道偏振态一定是 $|x\rangle, |y\rangle$ 中的某一个，由于这两个偏振态可以确定地区分，所以具体是哪一个，银行的系统可以简单地通过使用一个偏振化方向为 x 方向的偏振片来确定，然后再把确定的结果和编码的第二位进行比较。类似的，看到编码的第一位为1，银行的系统就知道光子的偏振态

是 $|+\rangle, |-\rangle$ 中的某一个，通过使用一个偏振化方向为45度角方向的偏振片，银行就能进一步确定偏振态到底是哪一个。总之，对于真币，根据量子货币上的编码，银行的系统就能确定地检验它上面的光子的偏振态。但是，如果编码和光子偏振态的对应关系出错，那光子能通过银行的检测系统的概率就小于1，比方说，在编码第一位， $|+\rangle, |-\rangle$ 态错误地对应到了0，那根据马吕斯定律，这时候光子通过银行检测系统的偏振化方向为 x 方向的偏振片的概率就是 $\cos^2(\pi/4) < 1$ 。

伪造者想要伪造量子货币就必须复制光子的偏振态，为此他就得先知道他想伪造的这张真币上的光子的偏振态，因此就必须测量这个光子的量子态。伪造者当然也可以看到货币上的编码，他们甚至可能知道光子的偏振态是 $|x\rangle, |y\rangle, |+\rangle, |-\rangle$ 中的某一个，但是，他们不知道编码和偏振态之间的对应关系(这个信息是不公开的，量子货币本身也没有这个信息，所以伪造者无从知道)。因此在测量光子的偏振态的时候，他就知道是该使用偏振化方向为 x 方向的偏振片还是使用偏振化方向为45度角方向的偏振片，他就只能瞎蒙。比方说，他使用了偏振化方向为 x 方向的偏振片来测量光子的偏振态，由于光子处在四个偏振态上的概率均等，因此被测量的这张量子货币上的光子有可能通过伪造者的这个偏振片，也有可能通不过，如果光子通过了，伪造者就知道货币上的光子不可能处在 $|y\rangle$ 态，但是由于 $|+\rangle$ 态和 $|-\rangle$ 态都不能与 $|x\rangle$ 态确定地区分，所以剩下的三个偏振态 $|x\rangle, |+\rangle, |-\rangle$ 都有可能通过伪造者的偏振片，因此伪造者无从判断货币上的光子到底处在哪个偏振态，他只能从剩下的这三个态中瞎蒙一个，当然他有可能蒙对，但他蒙对的概率 p 一定小于1(实际上，在我们分析的这个例子中 $p = 3/4$)。对于伪造者测量的光子没有通过偏振片的情况，分析也是类似的。总之，由于这四个偏振态之间有一定的不可区分性，伪造者就不可能确定地知道光子到底处在哪个偏振态，他一定要靠蒙，而他蒙对的概率 p 一定小于1，即 $p < 1$ 。

由于仅在伪造者蒙对的时候，他复制的假币上的编码和光子偏振态之间的对应才可能完全正确，才能100%地通过银行的检测，因此很显然，伪造者伪造的这张假币能通过银行检测的概率一定小于 p 。看起来这个概率好像也不算小，但是，到此为止我们仅仅分析了量子货币上只有一个光子的情形。现在，假设货币上有 N 个光子(货币上对应的编码当然也要扩大成一个 $2N$ 位的二进制数，每两位对应一个光子)，那很显然，伪造者伪造的假币能通过银行检测的概率就一定小于 p^N 。但是， $p < 1$ ，因此只要 N 足够大， p^N 就会无限接近于零，也就是说，只要量子货币上的光子数目够多，

假币能通过银行检测的概率就可以忽略不计。因此，量子货币无法造假！

以上只讨论了光子偏振态的可区分性。同样的，电子的自旋向上态 $|\uparrow\rangle$ 和自旋向下态 $|\downarrow\rangle$ 也可以确定地区分，因为如果一个电子处于这两个态中的某一个，你就可以通过测量它 z 方向的自旋 S_z 的值来区分它到底处在哪个态，如果测到 $S_z = \hbar/2$ ，那它就处在 $|\uparrow\rangle$ 态，如果测到 $S_z = -\hbar/2$ ，那它就处在 $|\downarrow\rangle$ 态。一般地，如果一个量子系统的某一个物理性质（物理量）有两个不同的取值 λ_0 和 λ_1 ，则这个物理性质的值为 λ_0 的量子态（不妨记作 $|0\rangle$ 态），和物理性质的值为 λ_1 的量子态（不妨记作 $|1\rangle$ 态），这两个量子态就必定是两个可以确定地区分的量子态。因为我们可以通过测量这个物理性质的值来100%地将这两个状态区分开来。这个结果当然可以推广到更一般的量子系统，如果一个量子系统的某一个物理性质（物理量）有多个不同的取值，记为 $\lambda_i, i = 1, 2, 3, \dots$ ，则这些不同取值对应的量子态，分别记为 $|i\rangle, i = 1, 2, 3, \dots$ ，相互必定都可以确定地区分。

那么，在数学上，两个量子态 $|\psi_1\rangle$ 和 $|\psi_2\rangle$ 可以确定地区分的充要条件是什么呢？很简单，充要条件就是这两个量子态要正交，即 $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$ 。这是因为量子态的内积反映的是两个量子态的相似程度，可以确定地区分的两个量子态必定是完全不相似的，因此也就必定正交。

从上面的分析中，我们可以得到一个重要的推论，即一个量子系统的某一个物理性质（物理量） A 不同取值的量子态 $|i\rangle, i = 1, 2, 3, \dots$ 必定是两两正交的，即满足

$$\langle i|j\rangle = 0, i \neq j. \quad (2.10)$$

特别的，量子比特的 $|0\rangle$ 态和 $|1\rangle$ 态必定是相互正交的。通常我们还要求它们都是归一的，因此就有

$$\langle 0|0\rangle = \langle 1|1\rangle = 1, \quad \langle 0|1\rangle = \langle 1|0\rangle = 0. \quad (2.11)$$

测量与量子态塌缩

但是量子比特和经典比特的不同之处就在于，经典比特要么取0，要么取1，二者必居其一，但是对于量子比特来说，由于 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 都是它的可能态，则根据态叠加原理， $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 的任意线性叠加也是这个量子比特的一个可能量子态，也就是说，任意形如下式的量子态 $|\psi\rangle$ 都是量子比特的可能态，

$$|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle. \quad (2.12)$$

当系数 c_0 和 c_1 都不等于零时，我们就称这样的 $|\psi\rangle$ 态为 $|0\rangle$ 态和 $|1\rangle$ 态的相干叠加态。问题是，如果量子比特处在一个相干叠加态 $|\psi\rangle$ ，我们想问，它到底是取0呢？还是取1呢？（如果是用电子自旋态来实现量子比特，那么这就是在问，在相干叠加态上，自旋 S_z 的值是 $\hbar/2$ 还是 $-\hbar/2$ ？ $-\hbar/2$ 就记为0， $\hbar/2$ 就记为1）如果说取0，那么根据 $|0\rangle$ 态的定义，量子比特就不能处在叠加态 $|\psi\rangle$ ，而是应该处在 $|0\rangle$ 态，因为 $|0\rangle$ 态的定义就是量子比特取0时对应的态，所以这个答案肯定是不对的。同样，回答取1也是不对的。你可能会说，既不是0，也不是1，而是有一定的概率取0，也有一定的概率取1。但问题是，我们现在只有一个量子比特，而不是好多个相同的量子比特，而且这个量子比特的量子态还是确定的 $|\psi\rangle$ ，因此这里其实并没有使用概率的余地。如果按照我们的直观想法，每一个确定状态的量子比特总会有一个确定的值，但问题是，刚刚我们已经分析过了，如果这个状态是一个相干叠加态，那这个值既不能是0，也不能是1。但问题是，量子比特的值就只有0和1这两种可能性（在自旋态实现中即是 S_z 的值只有 $\hbar/2$ 和 $-\hbar/2$ 两种可能性），因此你也不能回答说取 $1/2$ 或者诸如此类的其它值。

哪个答案都不对，那问题到底出在哪呢？只可能是我们的问题本身错了，或者说我们的直观想法错了！处在确定的叠加态 $|\psi\rangle$ 上的量子比特没有确定的取值，甚至我们也不能说它有一定的概率取0一定的概率取1，而是它的取值根本无从确定，讨论它是没有意义的。有时候我们也说在相干叠加态上的量子比特的值是不确定的，这里所谓的不确定实际就是说问这个问题没有意义。

这就是最难理解的地方，我们在日常经典世界里形成的直观是，一个比特总会有一个值，不管我们看没看它，作没作测量，它总会取一个值。但就是这个直觉误导了我们，物理学是一门测量的科学，当我们说一个物理量取某个值时，这个值一定是指测量的时候会得到的值。严格来说，离开测量来讨论物理量的值是没有意义的。那为什么经典比特总有一个确定的值？即使我们没有测量。回答是，经典比特是处在一个经典环境之中，即使我们没有直接对它进行测量，但其实经典比特所处环境中的空气分子等等东西都起到了测量它的作用。如果你把经典比特的所有环境都屏蔽掉，那它其实就会变成一个量子比特。

总之，量子比特到底取什么值这一问题，只有在我们测量量子比特的时候才有意义，任何这样的值一定是指的测量值。现在，假设量子比特处在一个相干叠加态 $|\psi\rangle$ ， $|\psi\rangle$ 由公式(2.12)给出，我们来测量它到底取什么，我们会测到什么值呢？答案是，0或者1，这也就是说，可能在某次测量实

验中我们会得到0，但如果我们用相同状态的量子比特重复测量，我们也可能得到1。是得到0还是得到1，是完全随机的，是概率性的。注意，在量子力学里，概率是和测量密切联系在一起的，没有测量就无所谓概率，而只有确定的量子态。

现在，假设在某次测量实验中，对于一个原来处在 $|\psi\rangle$ 态的量子比特，我们测到它的值是0，那么根据 $|0\rangle$ 态的定义，测量完成以后这个量子比特就不可能还是处在 $|\psi\rangle$ 态，由于这时已经确定了它的值是0，那测量以后它就一定处在 $|0\rangle$ 态上。这也就是说，测量过程必然会干扰被测对象，在我们讨论的这个例子中就是使这个量子比特从原来的 $|\psi\rangle$ 态坍缩到了 $|0\rangle$ 态。同样的，如果我们测到的值是1，那测量完成以后量子比特就将塌缩到 $|1\rangle$ 态。由于测到0还是测到1完全是随机的，所以测量引起的量子态的塌缩也是随机的，可能坍缩到 $|0\rangle$ ，也可能塌缩到 $|1\rangle$ 。(这里请读者回想一下第一章中我们在“双缝干涉实验再讨论”这一小节中的讨论以及这一小节最后的总结)

在量子力学中，某个物理量的取值确定的态通常叫做这个物理量的本征态，相应的物理量的值称之为本征值。比如在量子比特的自旋态实现中， $|\uparrow\rangle$ 态和 $|\downarrow\rangle$ 态就是自旋 S_z 的两个本征态，因为它们都有确定的 S_z 值，分别为 $+\hbar/2$ 和 $-\hbar/2$ ，在量子比特的这一物理实现中，所谓测量量子比特的值其实就是测量物理量 S_z 的值。比方说，假定记某个量子系统的某个物理量 A 的第 i 个本征态为 $|i\rangle$, $i = 1, 2, 3, \dots$ (即是说当系统处于 $|i\rangle$ 态时，物理量 A 有确定取值 λ_i)。假定系统处在物理量 A 的某个相干叠加态 $|\psi\rangle$ ，它可以写成

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle, \quad (2.13)$$

式中 c_i 为复叠加系数。那么根据我们前面对量子比特的讨论可以知道，系统在 $|\psi\rangle$ 态上其物理量 A 的值无法确定，没有定义！而且，量子力学的逻辑自洽性要求，如果对物理量 A 进行测量，假设测量开始之前系统处在这个多个不同本征态的相干叠加态 $|\psi\rangle$ ，如果我们测得了这个物理量的某个值 λ_i ，那测量完成之后这个系统的量子态一定会变成与这个值相应的本征态 $|i\rangle$ （不再是处在原来的相干叠加态 $|\psi\rangle$ ）。通常我们称这个过程为测量引起的量子态的塌缩，但这种说法完全是出于物理学家们的用语习惯，在实际中，任何测量都不是瞬时的，而需要一个过程，因此其实并没有量子态的突变。研究量子态的塌缩这一过程如何进行往往不容易，当前主流的观点叫做退相干，后面我们会简单解释退相干的基本思想。

测量会造成态的塌缩实际上就是量子货币最主要的缺陷，因为即使是一张真的量子货币，只要有人(比方说伪造者)去测量它的光子的偏振态了，那这测量就可能对光子的量子态造成干扰，比方说使得它从 $|+\rangle$ 态塌缩到 $|x\rangle$ 态，那这张真币也无法通过银行的检测了，因此真币被别人测量以后也有可能被银行当成假币。所以，量子货币只是一个理论构想，它可以帮助我们领悟量子力学的奇妙，但却不一定能实用。

回到我们的量子比特。你可能会想，是不是量子比特的所有量子态都一定能写成公式(2.12)这样的形式呢？量子比特有没有可能处在某个不能写成形如(2.12)式的量子态呢？答案是没有，因为对于处在任何量子态 $|\psi\rangle$ 的量子比特，你都可以去测量它的值，而量子比特只有两个可能值，要么你测到0，要么你测到1，测到0那 $|\psi\rangle$ 就塌缩到 $|0\rangle$ ，测到1那 $|\psi\rangle$ 就塌缩到 $|1\rangle$ ，只要你去测量，任何 $|\psi\rangle$ 都必然要塌缩到 $|0\rangle$ 态和 $|1\rangle$ 态中的某一个，因此量子比特的任何量子态 $|\psi\rangle$ 都必然是 $|0\rangle, |1\rangle$ 的线性叠加。物理学家常常把这称为量子比特的 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ 态的完备性。很显然，完备性的概念也可以推广到任何量子系统的任何物理量的本征态集合。

测量概率的玻恩规则

我们已经说了，对于 $|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$ 态的量子比特，你去测量它的值，有可能你会得到0，也有可能你会得到1，得到0还是得到1完全是随机的。一个重要的问题是，测量得到0的概率是多少？得到1的概率又是多少？量子力学的基本原理说，对于归一化的 $|\psi\rangle$ ，测量得到0的概率 p_0 是 $|c_0|^2$ ，测量得到1的概率 p_1 是 $|c_1|^2$ 。而量子态 $|\psi\rangle$ 的归一化说的就是概率总和等于1

$$p_0 + p_1 = |c_0|^2 + |c_1|^2 = 1. \quad (2.14)$$

利用前面的 $|0\rangle, |1\rangle$ 的正交归一性(2.11)，我们很容易得到 $\langle 0|\psi\rangle = \langle 0|(c_0|0\rangle + c_1|1\rangle) = c_0\langle 0|0\rangle + c_1\langle 0|1\rangle = c_0$ ，类似的 $\langle 1|\psi\rangle = c_1$ ，因此概率 p_0 和 p_1 就可以写成，

$$p_0 = |\langle 0|\psi\rangle|^2, \quad p_1 = |\langle 1|\psi\rangle|^2. \quad (2.15)$$

由此我们就可以知道，如果 p_0 和 p_1 都不等于0，那 $|0\rangle$ 态和 $|\psi\rangle$ 态就不可能是同一个量子态，也不可能正交，反过来也一样。

这就告诉我们，不正交的两个不同量子态一定不可以确定地区分。以上面的 $|0\rangle$ 态和 $|\psi\rangle$ 态为例，假设一个量子比特处在 $|0\rangle$ 态和 $|\psi\rangle$ 态中的某一

个，而且这两个态不同并且也不正交，那由上面的公式(2.15)就可以知道， p_0 不等于0(当然也不等于1)，因此当你测量这个量子比特的值并且得到0的时候(注意你只有一个量子比特)，你就无从判断你的量子比特原来是处在 $|0\rangle$ 态还是 $|\psi\rangle$ 态，因为 $|\psi\rangle$ 也有 p_0 的概率测得0。你可能会说：没关系，虽然我只有一个量子比特，但是我可以把测量过程重复多遍，然后看统计结果。但在量子力学中，这是不可能的，因为测量会干扰原来的量子态，会导致态的塌缩，也就是说，无论原来的量子比特是处在 $|0\rangle$ 态还是 $|\psi\rangle$ 态，你只要测到0，它就一定塌缩到 $|0\rangle$ 态了，以后再重复做测量就没有意义了。总之，你没有100%的把握将 $|0\rangle$ 态和 $|\psi\rangle$ 态区分开来。这就说明了不正交的两个量子态一定不能确定地区分，即不能100%地区分，因此这也就证明了为什么我们前面说，正交是两个量子态可以确定地区分的充要条件。

公式(2.15)是量子力学的核心结论之一，有时候人们也称之为玻恩规则(因为它和玻恩的波函数的统计解释密切相关)，它当然是被实验证了的。实际上，光学里的马吕斯定律就验证了这个结果。由于光的偏振方向也是普通三维空间里的矢量，所以沿 θ 角方向偏振的光子，其偏振态 $|\theta\rangle$ 可以写成， $|\theta\rangle = \cos\theta|x\rangle + \sin\theta|y\rangle$ 。公式(2.15)告诉我们，一个沿 θ 方向偏振的光子通过偏振化方向为 x 方向的偏振片的概率为 $\cos^2\theta$ ，而这正是马吕斯定律。当然，光子除了有线偏振态，还有其它的偏振态，比方说圆偏振态，圆偏振态可以写成 $|\circlearrowleft\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}(|x\rangle + i|y\rangle)$ 和 $|\circlearrowright\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}(|x\rangle - i|y\rangle)$ ，分别对应左旋光和右旋光。应用公式(2.15)，人们很容易算出它们通过 x 方向的偏振片的概率。公式(2.15)当然可以推广，比方说，一个左旋光子通过一个偏振化方向为 θ 方向的偏振片的概率就是 $|\langle\theta|\circlearrowleft\rangle|^2$ 。

类似的，假定某个量子系统处在某个 $|\psi\rangle$ 态(当然，我们默认 $|\psi\rangle$ 已经归一化了)，假定 $|\psi\rangle$ 是某个物理量 A 的叠加态，它可以写成

$$|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |i\rangle, \quad (2.16)$$

式中 ψ_i 为复叠加系数， $|i\rangle$ 是物理量 A 的第 i 个本征态(即是说当系统处于 $|i\rangle$ 态时，物理量 A 有确定取值 λ_i)。假定所有这些本征态 $|i\rangle$ 都已经归一化了，则由于这些本征态两两正交(2.10)，我们很容易有

$$\langle i|\psi\rangle = \psi_i. \quad (2.17)$$

而测量系统在 $|\psi\rangle$ 态上物理量 A 的值，得到某个 λ_i 的概率 p_i 就是

$$p_i = |\langle i|\psi\rangle|^2. \quad (2.18)$$

很显然，这个式子是公式(2.15)的直接推广。而且，我们可以证明 $\langle\psi|\psi\rangle = \sum_i p_i$ (这是由于 $\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi|(\sum_i \psi_i|i\rangle) = \sum_i \psi_i\langle\psi|i\rangle = \sum_i \psi_i\langle i|\psi\rangle^* = \sum_i |\psi_i|^2 = \sum_i p_i$)，所以量子态的归一化 $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ 其实就是要测量的总概率等于1。

不确定原理

下面，我们对量子比特的电子自旋态实现稍微展开一点讨论。在这种实现中，量子比特的 $|0\rangle$ 态对应电子的自旋向下态 $|\downarrow\rangle$ ， $|1\rangle$ 态对应电子的自旋向上态 $|\uparrow\rangle$ 。按照我们之前的讨论，电子在 $|\uparrow\rangle$ 态，其自旋z分量 S_z 有确定的值 $\hbar/2$ ，而在 $|\downarrow\rangle$ 态， S_z 为 $-\hbar/2$ ，但是在下面的 $|\rightarrow\rangle$ 态和 $|\leftarrow\rangle$ 态， S_z 的值没有定义无从确定，

$$|\rightarrow\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle), |\leftarrow\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle). \quad (2.19)$$

如果对 $|\rightarrow\rangle$ 态或 $|\leftarrow\rangle$ 态的电子的 S_z 进行测量，则我们有 $1/2$ 的概率得到 $\hbar/2$ ，也有 $1/2$ 的概率得到 $-\hbar/2$ ，总之，即使进行测量， $|\rightarrow\rangle$ 态和 $|\leftarrow\rangle$ 态的 S_z 也是不确定的。但是，可以证明 $|\rightarrow\rangle$ 态的自旋x分量 S_x 的值却是确定的，它是 $\hbar/2$ ，类似的， $|\leftarrow\rangle$ 态的 S_x 为 $-\hbar/2$ ，因此这两个态都是物理量 S_x 的本征态。反过来，由于

$$|\uparrow\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}(|\rightarrow\rangle + |\leftarrow\rangle), |\downarrow\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}(|\rightarrow\rangle - |\leftarrow\rangle), \quad (2.20)$$

所以对于 S_x 来说， $|\uparrow\rangle$ 态和 $|\downarrow\rangle$ 态反而是相干叠加态，因此它们的 S_x 反而是不确定的。这也就是说，电子自旋的z分量 S_z 和x分量 S_x 不能同时确定！这与经典物理完全不同，在经典物理中，物体角动量的x分量和z分量当然同时有确定的值，在经典物理中，当我们说一个物体的角动量是多少多少的时候，我们实际上就同时给出了它的x分量和z分量。但我们已经看到了，在量子力学中，这通常是办不到的。类似的，在量子力学中，粒子的坐标和动量也不能同时确定。人们通常把这样的结果叫做量子力学的不确定原理，它是量子力学区别于经典力学的一个核心本质。

根据不确定原理，在量子力学中，人们不能谈论类似于电子自旋 S_x, S_z 同时取 $\hbar/2$ 的概率 $p(S_x = \hbar/2, S_z = \hbar/2)$ 这样的量。注意，我们不是说 $p(S_x = \hbar/2, S_z = \hbar/2) = 0$ ，而是说讨论这个量是没有意义的，在量子力学中，它根本无法定义！因为 S_x 和 S_z 同时取值就意味着这两者可以同时

确定，而这是不可能的，根据我们前面的讨论，当 S_x 取确定值时，电子必定处在 S_z 的叠加态(公式(2.19))，因此 S_z 的值没有定义，除非你测量 S_z ，但只要你测量成功，原来的态就塌缩了到 S_z 的本征态了，而 S_z 的本征态反而是 S_x 的叠加态(公式(2.20))，因此这时候 S_x 的值反而就没有定义了。总之， S_x 和 S_z 的值是不可能同时有定义的。因此，在量子力学中， $p(S_x, S_z)$ 这样的量是没有意义的，它无法定义，不能讨论！但是， $p(S_z = \hbar/2 | S_x = \hbar/2)$ 这样的条件概率却是定义良好的，根据条件概率的标准含义， $p(S_z = \hbar/2 | S_x = \hbar/2)$ 表示已知电子自旋 S_x 为 $\hbar/2$ 时(因此这时候电子必定处在 $| \rightarrow \rangle$ 态)测得电子自旋 S_z 取值为 $\hbar/2$ 的概率，根据(2.19)式，结果就是 $1/2$ ，即 $p(S_z = \hbar/2 | S_x = \hbar/2) = 1/2$ 。这就是量子力学的概率与经典概率的本质区别，在经典概率里面， $p(S_x, S_z)$ 和 $p(S_z | S_x)$ 总是同时有定义的，实际上，经典概率的公理告诉我们 $p(S_x, S_z) = p(S_z | S_x)p(S_x)$ ，但在量子力学里这样的公理是不成立的。当然，如果你考察的都是一些经典事件，而不是量子物理量取值的概率，那经典概率当然就是完全适用的。

根据完备性，电子自旋的任意一个量子态一定可以写成 $|\psi\rangle = c_{\downarrow}|\downarrow\rangle + c_{\uparrow}|\uparrow\rangle$ 的形式。但是，由公式(2.20)我们可以知道， $|\psi\rangle$ 也可以重写成 $|\psi\rangle = c_{\leftarrow}|\leftarrow\rangle + c_{\rightarrow}|\rightarrow\rangle$ 的形式。所以，一个态可以表示成不同物理量的本征态的不同叠加，量子态的表示形式不是唯一的。在数学上，这种现象我们在线性代数里早就熟悉了，从数学角度来看， $\{|\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle\}$ 不过是电子自旋态的希尔伯特空间这样一个线性空间里的一组矢量基，而 $\{|\leftarrow\rangle, |\rightarrow\rangle\}$ 则是另一组矢量基，线性空间里的任意一个矢量 $|\psi\rangle$ 当然可以在不同的矢量基下进行展开。从一组矢量基变换到另一组矢量基的变换过程，物理学家常常称之为表象变换。

关于一个量子比特，我们就讨论到这里，我们讨论一个量子比特主要是想用它来讲清楚量子力学的基本原理。因此上面的所有核心结论都可以推广到一般情况。

2.1.3 多个量子比特

但是，量子计算机当然不只一个量子比特，多个量子比特该怎么处理呢？以两个量子比特为例，很显然，这时候量子比特的值有四种可能性00、01、10、11，分别对应 $|00\rangle$ 态、 $|01\rangle$ 态、 $|10\rangle$ 态和 $|11\rangle$ 态，有时候人们也把这些态写成 $|00\rangle = |0\rangle_1|0\rangle_2$ 这样的形式，表示是1、2两个量子比特的量子态乘起来。态叠加原理告诉我们，对于两个量子比特的量子系统，其任意量子

态 $|\psi\rangle$ 可以写成

$$|\psi\rangle = c_{00}|00\rangle + c_{01}|01\rangle + c_{10}|10\rangle + c_{11}|11\rangle, \quad (2.21)$$

所有这样的量子态的集合就构成了两量子比特系统的希尔伯特空间 \mathcal{H}_{2^2} 。因此，一个量子比特的希尔伯特空间有两个基矢量 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ ，而两个量子比特的系统的希尔伯特空间有四个基矢量，所以记作 \mathcal{H}_{2^2} ，表示它是一个 $2^2 = 4$ 维的线性空间。类似这样的结论很容易推广到 n 个量子比特，这时候系统的可能值就是从 $x = 000\dots00$ 到 $x = 111\dots11$ 的所有 n 位二进制数，而系统的任意一个量子态 $|\psi\rangle$ 必定可以写成

$$|\psi\rangle = \sum_{x=000\dots00}^{111\dots11} \psi_x |x\rangle. \quad (2.22)$$

这里我们已经改用 ψ_x 来表示叠加系数了。当然，所有的基矢量 $|x\rangle$ (注意，这里 $|x\rangle$ 不是表示 x 方向的偏振态)都是归一化的，而且不同的基矢量之间是两两正交的(因为它们都可以确定地区分)，因此我们容易得到 $\psi_x = \langle x|\psi\rangle$ ，而测量这个 n 量子比特系统的值(在所谓的计算基下)得到一个 n 位2进制数 x 的概率 p_x 为

$$p_x = |\langle x|\psi\rangle|^2. \quad (2.23)$$

如果我们离开量子比特系统，回到单个微观粒子系统，那么上一段中的 ψ_x 就可以对应到单个微观粒子的波函数 $\psi(x)$ ，而 $|x\rangle$ 就对应于单个微观粒子处于 x 位置的量子态，因此我们刚才的结果就可以重写成

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle, \quad (2.24)$$

这就是波函数和狄拉克记号之间的精确联系。而根据公式(2.18)， $|\langle x|\psi\rangle|^2 = |\psi(x)|^2$ 就是当微观粒子处在 $|\psi\rangle$ 态时我们在 x 位置上测到它的概率(即测得它的位置物理量是 x 的概率)，当然由于这时候 x 是连续变量，所以更准确的说法是概率密度，而这就是玻恩对波函数的统计解释。因此，玻恩的统计解释其实是关于量子态的测量原理的一个特殊情况。

回到我们的 n 个量子比特的系统。公式(2.22)告诉我们，这一系统的希尔伯特空间有 2^n 个基矢量，因此是 2^n 维线性空间，通常记作 \mathcal{H}_{2^n} 。总之，量子计算机的希尔伯特空间总是有限维的。但是，通常的微观粒子，比方说氢原子，由于有无穷多个能级，因此它的希尔伯特空间往往是无穷维的。

这实际上就是模拟量和数字量之间的区别，模拟量由于可以连续取值，所以是无穷多的，而数字量只可能有限多。但是，我们处理任何问题其实都只需要达到一定的精度即可，因此在精度范围之内我们总可以将模拟量数字化。同样的道理，在一定的精度范围之内我们也可以用量子计算机来处理任何微观粒子系统，比方说对于氢原子，很多时候我们其实可以忽略主量子数 $n \rightarrow \infty$ 的高能级，这时候我们处理的实际上就是一个有限维的量子系统。而且，基本物理定律也告诉我们，我们对空间和时间的测量也有一个最小的精度，即普朗克长度和普朗克时间，因此没准我们的世界本来就是“数字化”的，也许我们的世界本来就是一台量子计算机。当然，这些都还只是人们的猜测，有可能对，但错的可能性也同样大。

我们已经看到， n 个量子比特能构建一个 2^n 维的希尔伯特空间 \mathcal{H}_{2^n} ，也就是一个 2^n 维的复线性空间，其中的每一个态矢量对应 2^n 个复的叠加系数。因此，如果用经典计算机来模拟这样的系统的话，由于每一个复系数都需要若干个经典比特才能刻画，因此总共需要的经典比特数将是 2^n 的某个倍数，也就是说，是随着 n 指数增长的。这也就是说，只要量子比特的数目够多(也不需要太多，100左右足够)，则相应的量子系统就无法用经典计算机来模拟了(毕竟 2^{100} 可是个天文数字)。但是，对于未来的量子计算机来说，100个量子比特当然将会是家常便饭，这也就是量子计算机比经典计算机强大的一个基本原因。

量子态的希尔伯特空间是一个抽象的空间，它和我们生存的时空没有关系(而且它很可能比时空还要更基本)。这个看起来平凡的论断有时候能导出一些神奇的结论，比如说按照这个量子力学的逻辑，在我们的宇宙大爆炸产生时间和空间之前，在时间的概念可能还不成立的时候，宇宙的量子态应该就已经存在了，你可以把它记作 $|U\rangle$ ，但是 $|U\rangle$ 是什么却还没有人真正搞明白。

再举一个和我们关系更密切而且实验上早就实现了的神奇例子。这个例子只涉及到两个量子比特，我们知道，按照态叠加原理，下面的量子态 $|\Phi^+\rangle$ 是两量子比特系统的一个可能态，

$$|\Phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle). \quad (2.25)$$

$|\Phi^+\rangle$ 态的神奇之处就在于，它是一个整体，它不能因式分解成第一个量子比特的某个态 $|\phi_1\rangle$ 和第二个量子比特的某个态 $|\phi_2\rangle$ 的乘积 $|\phi_1\rangle|\phi_2\rangle$ 这样的形式(读者不妨试着分解一下)。由于量子态和时空没有直接关系，这也即是说，这两个量子比特即使一个在南昌，另一个远在天边，它们也还是一个

整体，它们整体性地处在 $|\Phi^+\rangle$ 态中，而不是南昌的量子比特处在某个 $|\phi_1\rangle$ ，天边的量子比特处在某个 $|\phi_2\rangle$ 。而在量子力学中，类似这样的量子态有很多，它们叫做量子纠缠态。量子纠缠态不但在量子信息和量子计算机技术中处于核心地位，而且近年来人们发现，时空本身可能就起源于量子纠缠。

2.1.4 量子不可克隆定理与幺正性

科幻小说里经常有这样的情节：一个人进入一个透明的玻璃罩里面，然后出现一束“光”，它从头到脚缓缓地扫过这个人全身。同时，在一个遥远的星球也有一个类似的玻璃罩子，当地球上的这个人被扫描以后，遥远星球的这个玻璃罩子里面也出现一束“光”，随着这束光从下扫向上，玻璃罩里面先是出现一双脚，接着是身子，最后是脑袋...最后出现了一个和地球上的那个人一模一样的人，地球上的这个人被复制到这颗遥远的星球了！

这可能吗？我问的是，基本物理原理允许这样的事情吗？回答是，如果是复制，也就是说，最后有两个一模一样的人，那这事不可能。但如果是传送，也就是说，从头到尾只有一个人，只不过这个人从地球传送到了遥远的星球，那这是可能的。我们这里将仅仅解释前一种情况为什么不可能，至于后一种情况为什么可能我们将在后面的小节中进一步讨论。

有人说，复制为什么就不可能呢？我把这个人的每一个细胞、每一个分子甚至每一个原子的所有信息都测量出来，然后按照这些信息在遥远的星球上把这个个人复制一份，这在原理上有什么不可能的呢。但是别忘了，量子力学有一个不确定原理，它限制了你的测量能够收集到的信息，比方说你不能同时确定一个电子两个不同分量的自旋，你也不能同时确定一个原子的位置和动量。测量会导致态的塌缩，我们永远也无法通过测量得到关于这个人的量子态的完整信息。

那你可能会想，不测量行不行呢？量子力学对测量能够收集的信息有基本的限制，但如果不用测量呢？如果有一个量子演化过程在不经过测量的情况下就把这个人的量子态 $|\psi\rangle$ 演化到了 $|\psi\rangle|\psi\rangle$ ，那这不就成功地复制这个人的量子态了吗？

然而，这也是不可能的。简单的解释是，因为量子力学所满足的最基本的原理态叠加原理是一个线性叠加原理，而从 $|\psi\rangle$ 到 $|\psi\rangle|\psi\rangle$ 相当于把 $|\psi\rangle$ 做了一个平方，而平方是一个非线性操作，因此是和态叠加原理相矛盾的，

因此不可能。这个简单的解释实际上就构成了量子不可克隆定理的实质。下面我们以两个量子比特的系统为例来将这个解释精确化。

设想有两个量子比特，一个原来处在 $|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$ 态，另一个原来处在 $|0\rangle$ 态，所谓的一个复制操作 \mathcal{C} ，即是这个两量子比特系统的一个演化过程，它使得

$$|\psi, 0\rangle \rightarrow \mathcal{C}(|\psi, 0\rangle) = |\psi, \psi\rangle = |\psi\rangle|\psi\rangle. \quad (2.26)$$

即在复制演化之下，第一个量子比特的量子态要复制到第二个量子比特上。由于 $|\psi\rangle$ 是任意的，因此如果存在这样的 \mathcal{C} ，那就必然有 $\mathcal{C}(|00\rangle) = |00\rangle = |0\rangle|0\rangle$, $\mathcal{C}(|10\rangle) = |11\rangle = |1\rangle|1\rangle$ 。另一方面，态叠加原理要求系统的任何演化都要保持线性叠加性，因此 \mathcal{C} 当然也要保持线性叠加性，但这就意味着 $\mathcal{C}(|\psi, 0\rangle) = c_0\mathcal{C}(|00\rangle) + c_1\mathcal{C}(|10\rangle) = c_0|00\rangle + c_1|11\rangle$ 。而克隆方程要求的是 $\mathcal{C}(|\psi, 0\rangle) = |\psi\rangle|\psi\rangle = c_0^2|00\rangle + c_0c_1(|01\rangle + |10\rangle) + c_1^2|11\rangle$ 。显然，除非 c_0, c_1 中一个系数取0另一个系数取1，否则克隆方程一定是无法成立的。这也就是说，克隆任意未知量子态是不可能的！但是当然，我们可以将 $|0\rangle$ 态和 $|1\rangle$ 态这两个正交态分别克隆一份。正交态可以克隆实际上就是我们可以把一份文件这样的经典信息克隆一份的根本原因，因为所谓的经典信息其实就是损失了量子相干叠加性的量子信息，经典信息当然可以确定地区分，因此用量子态来描述的话，这些信息当然就是正交的。

实际上，我们也可以由不正交的两个量子态一定不可确定地区分这一结论导出量子不可克隆定理。因为假如任意量子态都可以克隆的话，对于一个量子比特，我们就可以考虑它的这样两个量子态，一个是 $|0\rangle$ 态，另一个是 $|0\rangle$ 态和 $|1\rangle$ 态的相干叠加态 $|\psi\rangle$ ，这两个态当然是不正交的，实际上由公式(2.15)可以知道， $0 \neq p_0 = |\langle 0|\psi \rangle|^2 < 1$ 。如果量子不可克隆定理不成立的话，我们就可以把 $|\psi\rangle$ 和 $|0\rangle$ 都克隆任意多份，也就是说我们可以制造下面两个态

$$|\mathbf{0}\rangle = |0\rangle|0\rangle\dots|0\rangle, |\Psi\rangle = |\psi\rangle|\psi\rangle\dots|\psi\rangle, \quad (2.27)$$

式中的省略号表示 N 份连乘。如此一来， $|\langle \mathbf{0}|\Psi \rangle|^2 = |\langle 0|\psi \rangle|^{2N} = p_0^N$ 。由于 $p_0 < 1$ ，因此只要 N 足够大， $|\langle \mathbf{0}|\Psi \rangle|^2$ 就可以无限接近于0，因此在 $N \rightarrow \infty$ 的极限下， $|\mathbf{0}\rangle$ 就和 $|\Psi\rangle$ 正交，因此这两个态就可以确定地区分。但是， $|\mathbf{0}\rangle$ 和 $|\Psi\rangle$ 不过是 $|0\rangle$ 和 $|\psi\rangle$ 的复制，因此这就意味着我们可以通过确定地区分 $|\mathbf{0}\rangle$ 和 $|\Psi\rangle$ 来100%地将 $|0\rangle$ 和 $|\psi\rangle$ 区分开来，而这就与不正交的两个量子态不

可确定地区分相矛盾。因此，只要不正交的两个量子态不可确定地区分，那么量子不可克隆定理就必须成立。

幺正性

前面我们提到，量子态的时间演化一定要保持线性叠加原理(态叠加原理)。实际上，这是量子力学基本原理施加给量子态演化的限制之一，量子态的演化必须满足的另一条限制是，任意两个可以确定地区分的量子态在演化之下必须始终保持可以确定地区分。由于可确定地区分的充要条件是两个量子态正交，所以这实际上就是要求，任意两个相互正交的量子态在时间演化下要保持正交。当然，由于一个态和它自身的内积是总概率，在物理上应该始终归一化为1。因此概况起来说，第二条限制实际上是，量子态的演化应该始终保持态的正交归一性。

满足这两个要求的量子态演化就叫做幺正演化，而这一性质就叫做量子力学的幺正性。其实，之所以量子态的演化要满足薛定谔方程，就是因为薛定谔方程是满足幺正性的。下面我们就来证明这一点。

先让我们回想一下，对于单粒子情形，所谓的薛定谔方程就是形如 $i\hbar\partial_t\psi(x,t) = H\psi(x,t)$ 这样的波动方程， H 就是所谓的哈密顿算符。这当然是波函数表达下的写法，如果用更一般性的狄拉克记号，那么薛定谔方程就可以写成

$$i\hbar\partial_t|\psi(t)\rangle = H|\psi\rangle. \quad (2.28)$$

前文已经说过，所谓的态矢量 $|\psi\rangle$ ，其实可以简单地想象为一个列矢量，而哈密顿算符是乘在这个列矢量前面的，所以应该想象为一个矩阵。实际上，这个矩阵是一个厄米矩阵，即满足 $H^\dagger = H$ 。很显然，薛定谔方程(2.28)是一个线性方程，所以当然是满足态叠加原理的。另一方面，假如我们将方程(2.28)两边进行共轭转置，我们就可以得到

$$-i\hbar\partial_t\langle\phi(t)| = \langle\phi|H, \quad (2.29)$$

这里我们已经将 $|\psi\rangle$ 换成了 $|\phi\rangle$ ，这个等式的右边显然是一个行矢量乘以矩阵 H 。由方程(2.28)和方程(2.29)，我们很容易有

$$i\hbar\partial_t(\langle\phi(t)|\psi(t)\rangle) = i\hbar(\partial_t\langle\phi(t)|)\psi(t) + i\hbar\langle\phi(t)|\partial_t(|\psi(t)\rangle)) \quad (2.30)$$

$$= -\langle\phi|H|\psi\rangle + \langle\phi|H|\psi\rangle = 0. \quad (2.31)$$

这就意味着两个态的内积 $\langle\phi|\psi\rangle$ 在时间演化之下是不变的，如果将这两个态取成正交的两个态，那这个结果就意味着薛定谔方程是保持正交性的。而如果将 $|\phi\rangle$ 改成和 $|\psi\rangle$ 一样，那内积不变的这个结果也叫做总概率守恒，因为这时候 $\langle\psi|\psi\rangle$ 就是粒子在全空间出现的总概率。这就完成了我们对幺正性的证明。回顾这个证明过程，我们会发现薛定谔方程里出现的虚数单位*i*有实质性的作用，如果没有这个*i*，那薛定谔方程是无法满足幺正性的。

2.1.5 薛定谔的猫

至此，我们已经讨论了所有量子力学最基本最核心的原理。你可能觉得这些原理虽然不容易理解，但却并非不可接受，毕竟我们通常总是觉得量子力学原理是适用于微观世界的，和我们的宏观世界没有什么关系，因此即使它奇怪一点也没有什么不可接受的。但是，本文一开始就已经说过了，量子力学并非仅适用于微观世界，不，作为最基本的物理学规律，它甚至适用于全宇宙，更不要说我们日常的宏观世界了。

为了反映量子力学原理在宏观世界中有多么不可思议，薛定谔提出了一个著名的思想实验，那就是物理学四大神兽之一的薛定谔的猫。这只著名的神兽大致是这么一回事：在一个与世隔绝的密闭盒子里放一只猫，一个放射性的原子，这个原子衰变的概率为 $1/2$ 。再放一个粒子探测器，一把锤子，一瓶剧毒的气体。如果原子衰变了，那衰变放出来的粒子就会被粒子探测器探测到，然后粒子探测器就会发出信号让锤子掉下来，砸破毒气瓶子，毒气就会跑出来将猫毒死。用量子力学的语言来说即是，这时候猫会处在 $|Dead\rangle$ 态。但是，如果原子没有衰变，那刚才描述的一切都不会发生，猫将活得好好地，也就是说，它将处于 $|Live\rangle$ 态。但问题是，原子衰变是一个量子力学过程，而这个原子只有 $1/2$ 的概率衰变，因此实际上盒子里的放射性原子是处在衰变和不衰变的叠加态。因此盒子里的猫也将处于死和活的叠加态，可以表示为

$$|Cat\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|Dead\rangle + |Live\rangle). \quad (2.32)$$

人们当然可以把 $|Dead\rangle$ 态和 $|Live\rangle$ 态对应到量子比特的 $|0\rangle$ 态和 $|1\rangle$ 态，这样薛定谔的这只猫就是一个宏观的量子比特。根据我们对量子比特的讨论，叠加态 $|Dead\rangle + |Live\rangle$ 的猫既不是死，也不是活。实际上，根据我们对量子比特的讨论，在我们没有打开盒子看(看就是一种测量)的时候，猫的死活是没有意义的，这只处在叠加态的猫超越了生死！这里已经发生我

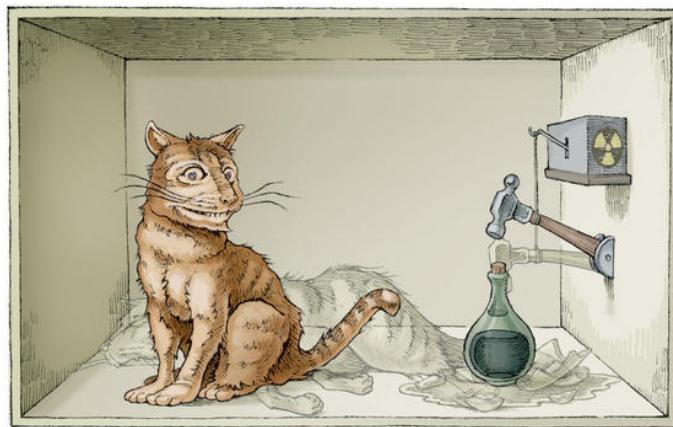


图 2.1: The Schrodinger's Cat. 图片来源: thelifeofpsi.com

们很难接受的事情了，因为猫完全是一个宏观物体，是我们日常很熟悉的生命，因此根据我们日常的经验，猫要么是死了，要么就是活着，不可能有什么超越生死的猫，根据我们日常生活的经验，生死的概念对于猫总是成立的，生死不可能没有意义。

更奇怪的是，根据我们前面对量子比特的讨论。当我们打开盒子往里看的时候，猫的量子态就塌缩了，我们有 $1/2$ 的概率看到一只活猫，同样也有 $1/2$ 的概率看到一只死猫。请注意，根据我们前面的讨论，猫的死活完全是我们看的结果。的确，我们要么看到猫死了，要么看到猫活着，只要我们打开盒子看了，那么猫就或者是死或者是活，再没有第三种可能性。但，只要我们不看，那猫就没有死活，生死的概念就没有意义。爱因斯坦完全接受不了这个，他说：难道我们不看月亮，月亮就不存在吗？对，我们不看猫，猫就没有死活吗？

这些都令人很难以接受，不可思议！那，这是不是说明量子力学对于猫这样的宏观物体不适用呢？不是的，虽然我们还没有实现让一只猫处在相干叠加态，但是，让一个宏观物体(比方说一个宏观的场)处在相干叠加态，甚至让一个生命体(细菌)处于相干叠加态，都是实验室中已经实现了的事情。从这个意义上来说，薛定谔的猫今天已经不再是一个思想实验了，而是实验室中真正的实验。而实验的结果是发现，量子力学同样适用于宏观客体，薛定谔的猫和前面我们讨论过的量子比特满足一样的量子力学规律。不看猫，猫就是没有死活超越了生死，猫的死活的确就是因为我们打开盒子看了！作为一个物理性质的两种不同取值，生死是两种可以确定区

分的状态，但是一只保持了量子相干性的猫可以超越生死。

那为什么我们日常生活中的猫不是这样呢？为什么我们日常生活中的猫不能保持量子相干叠加性呢？这就涉及到薛定谔的猫的一个隐含假设，他假设一个与世隔绝的盒子，这里所谓的与世隔绝，就是与一切环境隔绝，也就是说，外界的一切，光声热电，全都不能透过这个盒子，自然界的四大相互作用力全都不能透过这个盒子。极端一点来说，这需要把这个盒子孤立在宇宙之外。然而，我们日常生活中的猫总是处在环境之中的，作为一种宏观物体，猫有大量的原子分子，这些原子分子和整个环境有非常复杂的相互作用。因此虽然量子力学同样适用于日常生活中的猫，但这时候猫的量子态和环境的量子态纠缠在一起了，它们形成了一个整体的量子态，而猫原来的量子态的信息现在就会由这个整体来承载。而我们无法将整个环境(甚至整个宇宙)的量子信息都收集起来，当我们忽视环境的信息，而仅仅关心猫的时候，我们实际上就忽视掉了猫和环境的整体的大部分信息，因此也就无法重现猫原来的量子态了，我们将丢失掉原来猫态的相干叠加信息。这时候，我们就会发现猫的量子相干性消失了，猫要么是生，要么是死，而不能是生和死的量子叠加。这样的一只猫就变成了我们通常所熟悉的，满足经典物理学定律的猫。这样一个从量子到经典的过程就叫做退相干，正是退相干使得我们的宏观世界由量子力学描写的世界变成了一个由经典物理描写的世界。

这也说明了为什么微观世界常常需要量子力学规律，而不能使用经典物理规律。原因就在于，微观物体的德布罗意波长相对比较长，它常常超过我们关心的微观尺寸，这样一来在这样的微观尺寸之内系统就能保持量子相干性，因此就必须用量子力学来描述。但即使这样，退相干在我们对电子自旋这样的量子系统作测量的时候也同样要起作用。实际上，当我们测量一个量子系统的时候，我们的测量仪器就是量子系统所处环境的一部分，测量过程就是使得量子系统由相干叠加态退相干，进而坍缩到本征态的过程。

这也就是量子计算机为什么这么难实现的基本原因，因为为了造出一台实用的量子计算机，我们就必须在一个很大的尺寸上保持量子相干性。而尺寸越大，量子比特的数目越多，它和环境的耦合就越复杂，量子态的信息就越容易泄露到环境中去，因此系统也就越容易退相干。制造量子计算机其实就是要千方百计地对抗退相干，让整个量子计算机处在某种薛定谔的猫态。极端简化地说，造量子计算机就相当是要造出一只薛定谔的猫。

2.1.6 习题

1. 对于一个量子比特, 请将量子态 $|\psi\rangle = |0\rangle + e^{i\alpha}|1\rangle$ 和量子态 $|\phi\rangle = e^{i\beta}|0\rangle + 2|1\rangle$ 分别归一化(式中 α, β 为两个实数), 然后请计算内积 $\langle\phi|\psi\rangle$ 。
2. 对于一个量子比特, 请验证量子态 $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ 、 $|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$ 正交归一。
3. 当电子处在量子态 $|\psi\rangle = 2|\uparrow\rangle + e^{i\alpha}|\downarrow\rangle$ 上时, 请问测到它的 $S_z = -\hbar/2$ 的概率是多少?

2.2 算符与物理量

2.2.1 基础态

我们已经知道: 某物理量有确定取值的量子态称之为这个物理量的本征态, 相应的物理量的值称之为本征值。由于可以根据物理量值的不同将本征态确定地区分开来, 所以任何一个物理量的两个不同本征值的本征态必定正交。但是, 当系统处在不同本征态的叠加态上时, 其相应物理量的值是无从确定的, 这时候如果不进行测量, 这个物理量的值就没有定义。

在量子力学中, 不是所有物理量的值都可以同时确定, 比如电子自旋的 x 分量 S_x 和 z 分量 S_z 就不能同时确定。但是, 我们可以根据所有可以同时确定的物理量的值的不同, 来形成一组可以确定地区分的量子态, 记作 $\{|i\rangle, i = 1, 2, 3, \dots\}$ ($|i\rangle$ 只是一个记号, 表示第 i 个态, 当然你也可以改成 $|\psi_i\rangle$ 之类的记号)。比方说, 对于一个三维微观粒子, 这组态可以是 $\{|x, y, z\rangle\}$, 它表示粒子处在位置 $\mathbf{x} = (x, y, z)$ 的量子态, 相应的可以用来区分这组物理态的物理量就是粒子的三个坐标分量 X, Y, Z 。也即是说, 在这组量子态 $\{|i\rangle, i = 1, 2, 3, \dots\}$ 中, 任何两个不同态总有某些物理量的值是不同的, 因此这组态中的任何两个都可以确定地区分, 也即是满足正交归一性,

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}, \quad (2.33)$$

这里 δ_{ij} 的定义是, 当 i, j 相等时取 1, 当 i, j 不同时取 0。

对于系统的任何一个量子态 $|\psi\rangle$, 我们的任何一次测量总能得到这组物理量的某一组值, 而这组值唯一地对应某一个本征态 $|i\rangle$, 因此, 任何量子

态 $|\psi\rangle$ 必然都可以写成 $\{|i\rangle, i = 1, 2, 3, \dots\}$ 的某个线性叠加，

$$|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |i\rangle, \quad (2.34)$$

这里 ψ_i 表示叠加系数。这个结果称之为 $\{|i\rangle, i = 1, 2, 3, \dots\}$ 的完备性。同时满足正交归一性和完备性的一组态矢量就称之为希尔伯特空间的一组正交矢量基，相应的基矢量称作基础态。另外，从正交归一公式(2.33)我们容易得到(2.34)式中的叠加系数 ψ_i 总是可以表示成

$$\psi_i = \langle i | \psi \rangle. \quad (2.35)$$

由于 ψ_i 就是列矢量 $|\psi\rangle$ 在矢量基 $\{|i\rangle, i = 1, 2, 3, \dots\}$ 中的第*i*个分量，因此公式(2.35)告诉我们，任意态矢量 $|\psi\rangle$ 在基 $\{|i\rangle, i = 1, 2, 3, \dots\}$ 中的第*i*个分量都可以方便地由 $\langle i | \psi \rangle$ 求出，反过来，知道了所有的分量 $\langle i | \psi \rangle$ ，那态矢量本身也就确定了。

量子力学的基本原理告诉我们，假如在本征态 $|i\rangle$ 上某个物理量 \mathcal{O} 的本征值为 λ_i ，则测量 $|\psi\rangle$ 态的系统，得到物理量 \mathcal{O} 的值为 λ_i 的概率 p_i 等于

$$p_i = |\langle i | \psi \rangle|^2. \quad (2.36)$$

而一旦我们测到了 λ_i ，原来的量子态就必然塌缩到相应的本征态 $|i\rangle$ 。

2.2.2 线性算符

这一小节我们来讨论一下希尔伯特空间上的线性算符，之所以只考虑线性算符，是因为态叠加原理告诉我们，希尔伯特空间是一个线性空间，在线性空间上最自然的算符就是线性算符。这一节的内容完全是数学，是为了后面的量子力学应用作准备的。

所谓希尔伯特空间上的一个线性算符 A ，就是某个对量子态的操作，这个操作把任意一个量子态 $|\psi\rangle$ 转换成某个新的量子态 $|\phi\rangle$ ，记作 $A|\psi\rangle = |\phi\rangle$ 。而且这个操作应该保持态矢量之间的线性叠加关系。可见，线性算符其实就是通常线性代数里的线性变换。你也可以将算符 A 想象成某个“设备”，经过这个“设备”的作用以后系统的量子态就从 $|\psi\rangle$ 变成了 $|\phi\rangle$ 。不妨举一个线性算符的例子，比方说给定两个量子态 $|u\rangle, |v\rangle$ ，我们可以构造一个线性算符 T ，它的定义如下，

$$T = |u\rangle\langle v|. \quad (2.37)$$

注意，这里列矢量 $|u\rangle$ 是在左边，行矢量 $\langle v|$ 在右边，我们是用列矢量乘以行矢量，所以这个 T 可以想象成一个矩阵。正如线性代数里线性变换和矩阵是一一对应的一样，在量子力学里，算符和矩阵也基本上是同一回事。 T 为什么是一个算符呢？原因在于，任给一个态矢量 $|\psi\rangle$ ，我们可以定义 T 在 $|\psi\rangle$ 上的作用为

$$T|\psi\rangle = |u\rangle\langle v|\psi\rangle. \quad (2.38)$$

注意这里 $\langle v|\psi\rangle$ 是一个数，所以等式(2.38)的右边其实就是一个正比于 $|u\rangle$ 的态矢量，因此 T 的确将 $|\psi\rangle$ 变换到了另一个态矢量，它的确是一个算符。而且由于两个态矢量的内积对于右边的列矢量来说是线性的，所以很容易验证 T 的确保持了态矢量的线性叠加关系，因此是一个线性算符。

实际上，有一个数学定理(奇异值分解定理)说，希尔伯特空间的任何一个线性算符 A 必定能写成如下形式

$$A = \sum_i \lambda_i |u_i\rangle\langle v_i|. \quad (2.39)$$

这里 $\lambda_i \neq 0$, $\{|u_i\rangle, i = 1, 2, 3, \dots\}$ 和 $\{|v_i\rangle, i = 1, 2, 3, \dots\}$ 分别从属于希尔伯特空间上的两组正交归一矢量基。复数 λ_i 通常称作线性算符 A 的奇异值。从这里也能看出来，希尔伯特空间的线性算符总是能分解成列矢量乘以行矢量的形式，因此任何这样的算符都能想象成是一个矩阵。后面我们会进一步给出算符和矩阵之间的更精确的联系。为了方便读者参考，在本文的附录中，我们给出了奇异值分解定理的数学证明。

由于 $A|\psi\rangle$ 结果仍然是一个态矢量，因此我们可以将它和另一个态矢量 $|\phi\rangle$ 作内积，得到如下表达式

$$\langle \phi | A | \psi \rangle. \quad (2.40)$$

这个表达式当然是一个数，实际上它可以看成是行矢量 $\langle \phi |$ 乘以矩阵 A 然后再乘以列矢量 $|\psi\rangle$ ，其结果当然是一个复数。现在我们将这个表达式进行共轭转置，所谓共轭转置就是首先将一切都复数共轭，然后再转置，因此共轭转置的规则和转置的规则是类似的，都满足 $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$ ， † 就表示共轭转置，有时候也叫厄米共轭。利用共轭转置的规则， $(\langle \phi | A | \psi \rangle)^\dagger = |\psi\rangle^\dagger A^\dagger \langle \phi |^\dagger = \langle \psi | A^\dagger | \phi \rangle$ ，因此 $\langle \phi | A | \psi \rangle$ 共轭转置以后就是 $\langle \psi | A^\dagger | \phi \rangle$ 。但是由于 $\langle \phi | A | \psi \rangle$ 是一个复数，而一个复数的共轭转置当然其实就只是复共轭，因此我们就有

$$\langle \phi | A | \psi \rangle^* = \langle \psi | A^\dagger | \phi \rangle. \quad (2.41)$$

这里出现的算符 A 的共轭转置 A^\dagger 就叫做算符 A 的厄米共轭算符。公式(2.41)有时候也被看作是厄米共轭算符的定义式。如果我们将算符 A 写成奇异值分解的形式(2.39), 那我们也很容易利用共轭转置的规则得到 A^\dagger 的奇异值分解

$$A^\dagger = \sum_i \lambda_i^* |v_i\rangle\langle u_i|. \quad (2.42)$$

两个线性算符当然可以相加, 算符也可以相乘。由于算符可以想象为矩阵, 所以线性算符的加法与乘法就可以理解为矩阵的加法与乘法。比方说, 假设有两个线性算符, T_1, T_2 , $T_1 = |u_1\rangle\langle v_1|$, $T_2 = |u_2\rangle\langle v_2|$, 那么 $T_1T_2 = |u_1\rangle\langle v_1|u_2\rangle\langle v_2| = \langle v_1|u_2\rangle|u_1\rangle\langle v_2|$ (我们利用了乘法结合律, 且在最后一个等号中我们把复数 $\langle v_1|u_2\rangle$ 提到了式子的前面), 结果显然也是一个线性算符。还是这两个算符, 但如果你要算的是 T_2T_1 , 则结果就是 $T_2T_1 = |u_2\rangle\langle v_2|u_1\rangle\langle v_1| = \langle v_2|u_1\rangle|u_2\rangle\langle v_1|$ 。很显然, 一般来说 $T_2T_1 \neq T_1T_2$, 也即是说, 算符的乘法通常是不满足交换律的。这其实是由于算符可以当作矩阵来理解, 而矩阵的乘法一般来说当然是不可交换的。

如果希尔伯特空间的某个线性算符的集合包含恒等算符(即将任何态矢量都变换到它本身的恒等操作)以及它的常数倍, 而且这个集合在算符加法、乘法、以及厄米共轭之下是封闭的, 那这个线性算符的集合就定义了一个算符代数, 数学家也称之为冯诺依曼代数。比如说单个量子比特系统的冯诺依曼代数可以由算符 $c \cdot 1$ (表示给任何态矢量乘上复数 c)以及下面两个算符 Z 和 X 生成,

$$Z|0\rangle = |0\rangle, Z|1\rangle = -|1\rangle, X|0\rangle = |1\rangle, X|1\rangle = |0\rangle. \quad (2.43)$$

这里 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ 组成了量子比特的矢量基, 由于线性算符总是保持线性叠加, 所以线性算符在任意态上的作用都可以由其在基矢量上的作用决定, 正因为如此, 给出一个线性算符对所有基矢量的作用其实也就决定了这个线性算符本身。很容易验证, 量子比特的 Z 和 X 算符有一些很显著的性质, 比如满足 $Z^2 = X^2 = 1$, $ZX + XZ = 0$ 。

如果一个态矢量 $|u_n\rangle$ 满足如下方程

$$A|u_n\rangle = \lambda_n|u_n\rangle, \quad (2.44)$$

则 $|u_n\rangle$ 就称之为算符 A 的一个本征态, 相应的 λ_n 就称之为算符 A 的本征值, 而这个方程就称作算符 A 的本征方程。算符 A 很可能有多个本征态, 因此我们加上下标 n 以示区分, $|u_n\rangle$ 就叫做 A 的第 n 个本征态, λ_n 就叫做 A 的第 n 个

本征值。这里的本征态和本征值当然是一个数学概念，但我们前面说过的物理量的本征态和本征值的说法其实就是从这里来的，因为在量子力学中，物理量和算符是密切相关的，至于为什么是这样，我们后文会给予解释。

有两类算符对于量子力学尤其重要。第一类就是所谓的幺正算符，常常记作 U ，它满足

$$UU^\dagger = U^\dagger U = 1, \quad (2.45)$$

这里的1表示恒等操作，也叫做单位算符。将幺正算符作用在量子态上也叫作对量子态进行幺正变换。比方说我们有一个幺正算符 U ，还有两个任意的量子态 $|\psi\rangle$ 和 $|\phi\rangle$ ，那么 $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$ 就是 $|\psi\rangle$ 幺正变换以后的结果，同样 $|\phi'\rangle = U|\phi\rangle$ 是 $|\phi\rangle$ 幺正变换的结果。幺正变换有一个很重要的性质，那就是变换以后的两个态的内积 $\langle\phi'|\psi'\rangle$ 和变换之前是一样的，即

$$\langle\phi'|\psi'\rangle = \langle\phi|\psi\rangle. \quad (2.46)$$

利用 $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$ 和 $\langle\phi'| = \langle\phi|U^\dagger$ (即将等式 $|\phi'\rangle = U|\phi\rangle$ 两边分别共轭转置)，以及幺正算符的定义(2.45)，人们很容易证明这一结果。这也就是说，希尔伯特空间的内积在幺正变换下总是不变的。

幺正算符的定义(2.45)实际上告诉我们算符 U 是可逆的， U^\dagger 就是它的逆算符，即 $U^{-1} = U^\dagger$ 。因此如果将上面的证明反过来，假设希尔伯特空间的内积在某个可逆算符 U 的变换下保持不变，那刚才的证明过程就会反过来告诉我们 $U^\dagger U = 1$ 。由于 U 可逆，因此我们将这个等式两边从右方乘以 U^{-1} 就得到， $U^\dagger = U^{-1}$ ，但我们又可以将刚得到的等式从左方乘以 U ，从而进一步得到 $UU^\dagger = 1$ 。也就是说， $U^\dagger U = 1$ 和 $UU^\dagger = 1$ 同时成立。按照幺正算符的定义，这就反过来证明了任何这样的保持希尔伯特空间内积不变的可逆变换一定是一个幺正变换。

另一类重要的算符就是所谓的厄米算符，也就是满足 $A^\dagger = A$ 的算符。根据(2.41)厄米算符满足

$$\langle\phi|A|\psi\rangle^* = \langle\psi|A|\phi\rangle. \quad (2.47)$$

厄米算符有一些很重要的特性，首先，厄米算符的本征值一定是实数，其次，厄米算符不同本征值的本征态一定正交。为了证明这两个性质，我们记厄米算符 A 的第*i*个本征态为 $|i\rangle$ ，相应的本征值记为 λ_i 。因此，

$$\lambda_j \langle i|j\rangle = \langle i|A|j\rangle = \langle j|A^\dagger|i\rangle^* = \langle j|A|i\rangle^* = \lambda_i^* \langle j|i\rangle^* = \lambda_i^* \langle i|j\rangle, \quad (2.48)$$

这里第一个等号和第四个等号是利用本征态的定义，即 $A|i\rangle = \lambda_i|i\rangle$ ，第二个等号是利用方程(2.41)。推导过程(2.48)告诉我们 $\lambda_j\langle i|j\rangle = \lambda_i^*\langle i|j\rangle$ ，取 $i = j$ ，就可以知道 $\lambda_i^* = \lambda_i$ ，因此厄米算符的本征值必为实数，由此我们进一步得到， $(\lambda_j - \lambda_i)\langle i|j\rangle = 0$ ，因此当 $\lambda_i \neq \lambda_j$ 时，必有 $\langle i|j\rangle = 0$ ，即相应的两个本征态必定正交。这其实就已经完成了我们需要的证明。但有一个问题是，如果某两个本征态 $|i\rangle, |j\rangle$ 有相同的本征值，即如果 $\lambda_i = \lambda_j$ ，这时候怎么办，这时候我们就不能证明这两个态正交了。这种情况，我们就叫做这两个本征态简并，如果只有 $|i\rangle, |j\rangle$ 两个本征态相简并，我们就叫做本征值 λ_i 有二重简并(当然，如果有 N 个本征态都简并，我们就叫做 N 重简并)。碰到这种二重简并的情况，我们注意到

$$A(c_1|i\rangle + c_2|j\rangle) = c_1A|i\rangle + c_2A|j\rangle = \lambda_i c_1|i\rangle + \lambda_j c_2|j\rangle = \lambda_i(c_1|i\rangle + c_2|j\rangle) \quad (2.49)$$

最后一个等号我们用到了简并条件 $\lambda_i = \lambda_j$ 。这个推导过程告诉我们，如果 $|i\rangle, |j\rangle$ 简并，则它们的任意线性组合将依然是算符 A 的本征值为 λ_i 的本征态，也就是说， $\{|i\rangle, |j\rangle\}$ 实际上张成了一个两维的线性子空间，这个子空间里的任何态矢量都是 A 的本征值为 λ_i 的本征态，这样一个线性子空间就称之为简并子空间。而在一个两维的线性子空间(可以将这样的两维矢量空间想象成一个两维平面) 上我们总是可以重新选择两个相互正交的基矢量，我们可以将这两个正交的基矢量重新定义为新的 $\{|i\rangle, |j\rangle\}$ 态。类似的操作当然也可以推广到多重简并的情况。因此，这也就是说，碰到本征态简并的情况，我们总是可以对这些简并的本征态进行重新选择，使得重新选择以后的本征态正交。因此，对于厄米算符，我们总是可以选取一组两两正交的本征态，加上归一化条件，就有

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}. \quad (2.50)$$

对于在量子力学中出现的厄米算符，由于它们总是可以作用在希尔伯特空间的任意态上，因此这组正交归一的本征态的线性叠加一定能构造出希尔伯特空间里的任何态矢量，也就是说，它们是完备的。同时满足正交归一性和完备性，这就意味着厄米算符的这一组本征态 $\{|i\rangle, i = 1, 2, 3, \dots\}$ 可以构成整个希尔伯特空间的一组正交矢量基。

有时候，我们所考察的厄米算符 A 可能依赖于一个连续的控制参数 μ ，记作 $A(\mu)$ ，这时候本征值 λ_i 也将是 μ 的函数，记为 $\lambda_i(\mu)$ ，相应的本征态 $|i\rangle$ 当然也将依赖于 μ ，不妨重新记为 $|u_i(\mu)\rangle$ 。随着控制参数 μ 的连续变化，本征态矢量 $|u_i(\mu)\rangle$ 将在希尔伯特空间中连续变化。但是，按照我们在上一段中

的证明，如果两个本征态 $|u_i(\mu)\rangle, |u_j(\mu)\rangle$ 有不同的本征值，那么它们一定正交，也就是说，虽然在控制参数 μ 的调节之下，这两个本征态都将在希尔伯特空间中连续变化，但是无论怎么变，它们将始终保持正交。什么时候它们才可能变得不再正交呢？上一段的分析告诉我们，仅当在某个参数 μ_c 上， $\lambda_i(\mu_c) = \lambda_j(\mu_c)$ 时，也就是这两个态变成简并时，这种情况才可能发生。可见，从不简并到简并往往带来系统性质的改变，这在量子相变的分析中是有用的。

最简单的厄米算符是什么呢？当然是单位算符，或者说恒等算符，我们记作1(读者很容易根据上下文确定任何公式中的1是代表数字1，还是代表单位算符)。单位算符有一个非常有用的分解定理(常常也称之为基础态的封闭性关系)，即

$$1 = \sum_i |i\rangle\langle i|, \quad (2.51)$$

式中 $\{|i\rangle, i = 1, 2, 3, \dots\}$ 是希尔伯特空间的一组正交归一矢量基。这个定理可以看作是奇异值分解定理的特例，但是，由于它在量子力学中极其有用，所以我们给出一个单独的推导。首先，由公式(2.34)和公式(2.35)可以知道，任意一个态矢量 $|\psi\rangle$ 都可以分解成 $|\psi\rangle = \sum_i \langle i|\psi\rangle |i\rangle$ ，很显然这个表达式可以重写成

$$|\psi\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\psi\rangle = \left(\sum_i |i\rangle\langle i| \right) |\psi\rangle, \quad (2.52)$$

上面所有的步骤都是行矢量、列矢量、以及矩阵的乘法规则，特别是用到了乘法结合律。公式(2.52)最右边的 $\sum_i |i\rangle\langle i|$ 显然是一个算符，公式(2.52)告诉我们，这个算符作用在任意态矢量 $|\psi\rangle$ 上都等于 $|\psi\rangle$ 本身，按照定义，这样的算符当然就是单位算符，这样我们就得到了重要结果(2.51)。

下面我们就用公式(2.51)来推导出一些有意思的结论。首先，我们用它来推导厄米算符的谱分解定理(这个名称是数学家的叫法)。我们从厄米算符 A 的本征方程 $A|i\rangle = \lambda_i|i\rangle$ 出发，将这个方程左右两边从右方乘以行矢量 $\langle i|$ 就得到， $A|i\rangle\langle i| = \lambda_i|i\rangle\langle i|$ ，两边对*i*求和，就有 $A\sum_i |i\rangle\langle i| = \sum_i \lambda_i|i\rangle\langle i|$ ，前面说了，厄米算符的本征态可以取成希尔伯特空间的一组正交归一基矢量，因此我们可以利用单位算符的分解定理(2.51)，进而得到

$$A = \sum_i \lambda_i |i\rangle\langle i|. \quad (2.53)$$

这就是厄米算符的谱分解定理，本征值集合 $\{\lambda_i, i = 1, 2, 3, \dots\}$ 又称为厄米算符 A 的谱，很显然，这个定理其实也是奇异值分解定理的特例。

如果希尔伯特空间的基矢量是连续的，那公式(2.51)中的对*i*求和当然就应该改写成某个积分。比方说，微观粒子的位置为确定的*x*值的状态 $|x\rangle$ 的集合就可以构成单粒子希尔伯特空间的一组正交基，因此与公式(2.35)相应的，我们有

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle. \quad (2.54)$$

而与公式(2.51)相应的则有

$$\int dx|x\rangle\langle x| = 1. \quad (2.55)$$

$|x\rangle$ 也称作位置本征态，因为 $|x\rangle$ 态的粒子有确定的位置坐标*x*。不同坐标的 $|x\rangle$ 态由于可以根据粒子坐标取值的不同而可以确定地区分，因此它们是相互正交的，数学上我们可以将这个正交归一化关系写成 $\langle x|y\rangle = \delta(x - y)$ ，用 δ 函数而不用克隆内克符号 δ_{ij} 的原因当然是因为*x, y*现在是连续变量。同样，微观粒子动量确定的态 $|p\rangle$ 的集合也构成了单粒子希尔伯特空间的一组正交基，因此

$$\int dp|p\rangle\langle p| = 1. \quad (2.56)$$

由上面这三个式子我们就有

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \langle x|\int dp|p\rangle\langle p|\psi\rangle = \int dp\langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle, \quad (2.57)$$

其中第二个等号就是在行矢量 $\langle x|$ 和列矢量 $|\psi\rangle$ 的中间插入一个单位矩阵(单位算符)1。类似于(2.54)， $\langle p|\psi\rangle$ 就是动量空间波函数，我们记作 $\psi(p)$ (当然从数学语言的角度来看，这一记号是不合法的，因为动量空间波函数和坐标空间波函数当然不是同一个函数，因此不应该用同一个函数记号 ψ ，我们这里都用 ψ 是为了强调它们是同一个量子态的不同表示，但是当然要记住 $\psi(p)$ 和 $\psi(x)$ 不仅仅是自变量符号不同，它们还应该理解成两个不同的函数)。另外，按照公式(2.54)， $\langle x|p\rangle$ 当然就应该是动量为*p*的粒子的波函数，德布罗意告诉我们这个波函数是平面波 $\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}}e^{ipx/\hbar}$ ，因此我们有

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}}e^{ipx/\hbar}. \quad (2.58)$$

将(2.58)代入刚才得到的(2.57)，就有

$$\psi(x) = \int dp \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}} e^{ipx/\hbar} \psi(p), \quad (2.59)$$

这就是傅里叶变换。类似的，我们也容易得到傅里叶逆变换，

$$\psi(p) = \langle p|\psi \rangle = \int dx \langle p|x \rangle \langle x|\psi \rangle = \int dx \langle p|x \rangle \psi(x), \quad (2.60)$$

再代入 $\langle p|x \rangle = \langle x|p \rangle^* = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}} e^{-ipx/\hbar}$ 就得到傅里叶逆变换的公式。所以傅里叶变换我们也不需要记了，只需要记住单位算符的分解定理就可以了。当然，我们这里只处理了一维空间，但你也很容易将上面的推导推广到三维空间。

关于单位算符的分解定理及其应用我们暂时就谈到这里，后面我们还会不断地用到这个定理。

以上我们只考虑了希尔伯特空间上的线性算符，这是因为我们设想在经过这些算符所代表的操作之后，量子态之间的线性叠加关系应该得以保持。但实际上，在量子力学中也出现了所谓的反线性算符，那就是时间反演算符，以及尤其是量子场论中会出现的CPT算符，但它们都是所谓的反线性反幺正算符，是作为量子系统的某种对称变换而出现的(分别对应时间反演不变性以及CPT不变性)，并不是作用在量子态上的一个通常操作，也就是说，不能设想通过某个“设备”来实现这样的算符，因此它们暂时和我们关系不大，我们将忽视它们。

2.2.3 为什么物理量用厄米算符表示

任何物理量或者说可观测量，它的取值当然是一个实数，但是我们也说过，在量子力学中，不能谈论处系统处在叠加态上时相应物理量的值，因为这时候这个物理量的值是没有定义的，而当某个物理量有确定取值时，系统必定处于这个物理量的某个本征态。这就说明，在量子力学中，物理量本身不可能像在经典物理中那样用一个实数值的量来表示，因为否则这个物理量的值就总是有定义的，它就总是有确定取值。实际上，人们发现，在量子力学中，物理量本身应该用厄米算符来表示。那这是为什么呢？

原因在于，首先，根据量子力学的基本原理，某个物理量有不同确定取值的量子态之间，由于可以根据这个物理量取值的不同来确定地区分，因此这些态必定是两两正交的。而厄米算符刚好有类似的性质，根据我们

在前面的数学证明，厄米算符不同本征值的本征态必定是相互正交的。而且，厄米算符的本征值当然只在本征态上有定义，如果系统处在某个厄米算符本征态的叠加态上，那当然就谈不上本征值，而厄米算符本身是一个算符而不是一个实数，因此也就是说，这时候厄米算符的值是没有定义。这些都刚好吻合物理量所必须遵循的基本原理。这就使得我们想到，可以把物理量的本征态当作某个厄米算符的本征态，把物理量的值当成某个厄米算符的本征值，也就是说，把物理量用厄米算符来表示！而且，我们前面也证明过，厄米算符的本征值刚好是实数，因此完全可以当成物理量的值，如果厄米算符的本征值可以是复数的话，那将物理量表示成厄米算符就不可能成立了，因为任何物理量的值当然都不可能是复数，毕竟复数纯粹是数学构想，是没有测量意义的。

不光如此，我们还可以进一步计算一下系统在任意 $|\psi\rangle$ 态时某物理量 A 的期望值 \bar{A} 。假设这个物理量的可能取值为 $\{\lambda_i, i = 1, 2, 3, \dots\}$ (前面我们已经定义过，这些值叫做物理量的本征值)，假定测量 $|\psi\rangle$ 态的系统得到 λ_i 值的概率为 p_i ，则很显然， A 的期望值等于 $\bar{A} = \sum_i \lambda_i p_i$ 。而根据前面的公式(2.36), $p_i = |\langle i|\psi\rangle|^2$, 因此我们有

$$\bar{A} = \sum_i \lambda_i |\langle i|\psi\rangle|^2 = \sum_i \langle \psi|i\rangle \lambda_i \langle i|\psi\rangle, \quad (2.61)$$

式中最后一个等号我们利用了 $\langle \psi|i\rangle = \langle i|\psi\rangle^*$ 。观察一下这个结果最右边的等式，我们就会发现最后出现了一个 $\sum_i |i\rangle \lambda_i \langle i|$, 而根据前面我们证明的厄米算符的谱分解定理，这刚好是一个厄米算符，这个厄米算符的本征值正是 $\{\lambda_i, i = 1, 2, 3, \dots\}$, 本征态正是 $\{|i\rangle, i = 1, 2, 3, \dots\}$ ，因此它正是我们上一段猜想的与物理量 A 对应的厄米算符，我们不妨还是用同样的符号 A 来表示它。这样一来，刚才的推导结果就告诉我们，物理量 A 在 $|\psi\rangle$ 态上的期望值 \bar{A} 可以表示成

$$\bar{A} = \langle \psi|A|\psi\rangle, \quad (2.62)$$

等式右边的 A 正是我们猜想的与物理量 A 对应的厄米算符。由于 $|\psi\rangle$ 是任意的，而且结论(2.62)对于任何物理量都成立，它告诉我们，对于任何物理量，其在任意量子态上的期望值都可以通过一个相应的厄米算符计算出来。这就已经足以证明我们上一段建立起来的物理量与厄米算符之间的联系成立了！

有了物理量与厄米算符之间的这个联系以后，剩下的问题就是找到这些厄米算符了。在实际应用中，我们往往是根据各种物理直观和物理推理

过程写出某个物理量相应的厄米算符，然后再根据这个厄米算符的本征方程，求出物理量的本征态和本征值(现在物理量的本征态与本征值与相应厄米算符的本征态和本征值已经是一回事了)，然后将这些本征值与测量所得的物理量的值进行比较，如果两者吻合得很好，那我们就知道我们根据物理直观所写出来的这个厄米算符已经正确地表示出这个物理量了，如果吻合得不好，我们就在厄米算符中加上一些项或者减去一些项以使得最后的结果更加吻合，当然如果一开始差得太远的话我们甚至需要完全重写这个厄米算符。当然，我们往往还需要解释我们加上的这些项代表什么物理含义，我们减去某些项的物理理由又是什么。但是，不管怎么样，从本质上来说，写出一个物理量所对应的厄米算符本质上是一个不断猜测然后再实验验证的过程。此外还有一种情况也很常见，尤其在理论物理学中最常见的做法，那就是有时候我们可以根据一些基本的物理原理导出一个物理量的厄米算符表示。

关于这一如何寻找一个物理量所对应的厄米算符的基本逻辑，最清楚的演示莫过于我们如何找到一个系统的哈密顿算符(即与能量相对应的厄米算符)。但这里我们不妨以角动量算符的历史演化为例来加以说明。对于角动量算符，人们先是根据经典力学的基本原理导出 $\vec{J} = \vec{x} \times \vec{p}$ ，再根据量子力学的量子化规则得出与 \vec{x} 和 \vec{p} 对应的位置算符和动量算符，进而也就得到了角动量算符。但是后来我们发现这不能解释斯特恩-盖拉赫实验，因此我们又引入了电子自旋的概念，因此电子的自旋量子态以及相应的自旋算符最初就是猜测的，是为了解释实验。同时，由于自旋-轨道耦合，我们发现在原子物理中，轨道角动量和自旋角动量分别都不守恒，仅当我们把自旋角动量算符加进角动量算符的表达式以后，原子的总角动量才总是符合角动量守恒的，这里既有物理原理的引导也有根据实验数据而来的猜测。只到最后，狄拉克才从相对论量子力学的基本原理出发推导出了电子的自旋算符，同时也发现自旋角动量算符自动和轨道角动量算符加在一起构成了总角动量算符。但即使是狄拉克从相对论和量子力学的基本原理出发得到的方程，也还是需要实验检验的。

2.2.4 不确定原理与算符

前面我们已经说过，在量子力学中，并非所有物理量都可以同时有确定值，比方说，电子自旋角动量的两个不同分量就不能同时有确定值，再比方说位置坐标和相应的动量也不能同时取确定值。以电子自旋的 x 分

量 S_x 和 z 分量 S_z 为例，这两者不能同时确定的原因在于， S_x 的本征态其实是 S_z 的相干叠加态，因此 S_x 有确定值的时候， S_z 的值没有定义，当然也就不确定，反过来也一样， S_z 的本征态其实是 S_x 的叠加态，因此 S_z 有确定值的时候， S_x 的值也没有定义，总之， S_x 和 S_z 这两者不能同时有确定值。类似的，利用德布罗意告诉我们的平面波波函数，微观粒子的动量本征态 $|p\rangle$ 可以写成

$$|p\rangle = \int dx |x\rangle \langle x|p\rangle = \int dx \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}} e^{ipx/\hbar} |x\rangle, \quad (2.63)$$

可见它是位置本征态 $|x\rangle$ 的相干叠加态，因此粒子动量有确定值的时候其位置坐标的值不确定。反过来，位置本征态 $|x\rangle$ 也可以写成动量本征态 $|p\rangle$ 的叠加态，

$$|x\rangle = \int dp |p\rangle \langle p|x\rangle = \int dp \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}} e^{-ipx/\hbar} |p\rangle, \quad (2.64)$$

因此，当微观粒子位置坐标有确定值的时候，其动量也是不确定的。总之，微观粒子的位置坐标和其动量不能同时确定。

由此可见，如果两个物理量的值总是可以同时测定（请注意总是这个词），那就意味着，不管系统处在任何量子态，每次测量时所塌缩到的量子态必然同时是这两个物理量的本征态，由于我们假设对任何量子态进行测量总能同时得到这两个物理量的某个值，因此这也意味着这些共同的本征态必然可以张成希尔伯特空间的一组矢量基（即任何量子态都可以写成这组共同本征态的线性叠加），因此，如果两个物理量的值总是可以同时测定，那就意味着它们必然有一组共同的本征态矢量基。但是，我们已经看到，物理量是用厄米算符来表示的，那么从厄米算符的角度来看，两个物理量的值总是可以同时测定的充要条件是什么呢？答案很简单，是这两个算符的乘积要可以交换顺序，简称这两个算符可对易。

我们首先证明必要性。即假设两个物理量 A, B 的值总是可以同时测定，也就是说它们有共同的本征态矢量基（不妨记作 $\{|i\rangle, i = 1, 2, 3, \dots\}$ ），并记 A 的相应本征值为 α_i ， B 的相应本征值为 β_i ，证明相应的厄米算符 A 和 B 必定可对易，即 $AB = BA$ 或者说 $AB - BA = 0$ 。证明很容易，首先由于 $\{|i\rangle, i = 1, 2, 3, \dots\}$ 是希尔伯特空间的矢量基，因此任何量子态 $|\psi\rangle$ 都必定可以写

成 $|\psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle$ 的形式，如此一来就有

$$\begin{aligned} (AB - BA)|\psi\rangle &= \sum_i c_i (AB - BA)|i\rangle \\ &= \sum_i c_i (\beta_i A|i\rangle - \alpha_i B|i\rangle) = \sum_i c_i (\beta_i \alpha_i - \alpha_i \beta_i)|i\rangle = 0. \end{aligned} \quad (2.65)$$

即 $(AB - BA)$ 在任意态上的作用都等于零，因此即有 $AB - BA = 0$ 。这就完成了必要性的证明。

下面证明充分性(充分性的证明略微有一点复杂，并且纯粹是一个数学定理，读者第一遍读的时候可以先略过)。即要证明如果两个物理量的厄米算符满足 $AB = BA$ ，则它们必有一组共同的本征态矢量基。首先，我们前文已经说过，对于量子力学中考察的厄米算符而言，其本征态必定可以取作希尔伯特空间的正交矢量基。所以真正需要证明的是，我们总是可以把这些本征态取成这两个算符共同的本征态。为此我们假设 $\{|i\rangle, i = 1, 2, 3, \dots\}$ 为算符 A 的一组本征态，本征值分别为 α_i (注意， α_i 可以有简并)，则由于

$$A(B|i\rangle) = AB|i\rangle = BA|i\rangle = \alpha_i B|i\rangle, \quad (2.66)$$

因此我们可以知道 $B|i\rangle$ 必然也是算符 A 的本征值为 α_i 的本征态。如果算符 A 的 α_i 这个本征值对应的本征态没有简并，那就必然有 $B|i\rangle$ 依然正比于 $|i\rangle$ 这个态，假如把比例系数记为 β_i ，从而也就有 $B|i\rangle = \beta_i|i\rangle$ ，这也就是说 $|i\rangle$ 同时也是算符 B 的本征态。因此在这种情况下 $|i\rangle$ 就已经是 A, B 共同的本征态了。

但是，如果算符 A 的本征值为 α_i 的本征态有简并，那这时候由(2.66)式我们就不能得出 $B|i\rangle$ 正比于 $|i\rangle$ 的结论了。比方说假设有二重简并(多重简并的证明是类似的)，也即是说有某个 $\alpha_j = \alpha_i$ ，从而相应的 $|j\rangle$ 态和 $|i\rangle$ 态有相同的本征值 α_i 。这就和我们前面证明总是可以将厄米算符的本征态取成正交的时候碰到的简并情况是一样的。 $|i\rangle$ 和 $|j\rangle$ 简并的一个显然结果是，它们的任意线性叠加 $c_1|i\rangle + c_2|j\rangle$ 都将是 A 的本征态，本征值都是 α_i ，因此这就张成了一个两维的简并子空间，我们可以把这个简并子空间记为 \mathcal{H}_{α_i} 。那这时候我们由(2.66)式就只能得出 $B|i\rangle$ 一定是这个两维的简并子空间里的某个态矢量。不仅如此，由于

$$\begin{aligned} A[B(c_1|i\rangle + c_2|j\rangle)] &= B(c_1 A|i\rangle + c_2 A|j\rangle) \\ &= B(c_1 \alpha_i|i\rangle + c_2 \alpha_j|j\rangle) = \alpha_i [B(c_1|i\rangle + c_2|j\rangle)], \end{aligned} \quad (2.67)$$

这里最后一个等号我们利用了简并条件 $\alpha_j = \alpha_i$ 。这个推导过程(2.67)就告诉我们, $[B(c_1|i\rangle + c_2|j\rangle)]$ 依然是 A 的某个本征值为 α_i 的本征态, 这也就是说, B 作用在简并子空间 \mathcal{H}_{α_i} 里的任意态上, 结果都依然还是简并子空间里的态。因此我们就总可以在这个两维的简并子空间 \mathcal{H}_{α_i} 里求解算符 B 的本征方程, 从而得到 B 的两个本征态 $|i'\rangle$ 和 $|j'\rangle$ 。前文引入厄米算符本征态时的相关证明告诉我们, 无论这两个态对应的 B 本征值相同还是不同, 我们总是可以让它们正交, 从而成为二维简并子空间 \mathcal{H}_{α_i} 新的正交基(因此原来的 $|i\rangle$ 和 $|j\rangle$ 也都可以反过来写成这两个新的基矢量的线性叠加)。由于 $|i'\rangle$ 和 $|j'\rangle$ 都属于 A 的简并子空间 \mathcal{H}_{α_i} , 所以它们当然同时也是 A 的本征态, 这样它们就是 A 和 B 共同的本征态。也就是说, 碰到这种二重简并的情况, 我们只需要把原来的 $|i\rangle$, $|j\rangle$ 态替换成新的 $|i'\rangle$ 和 $|j'\rangle$ 态就找到了这时候两个算符的共同本征态。多重简并情形的推理和结论都是类似的。因此这就证明了, A 和 B 的共同本征态总是可以找到的。这样就完成了我们对充分性的证明。

刚才的充分性证明告诉我们, 如果两个算符可对易, 那么它们相应的物理量的值必可同时测定。这个命题的逆否命题就是, 不可同时测定的两个物理量, 它们相应的算符必定不对易。由于电子自旋的 S_x 分量和 S_z 分量不可同时测定, 因此我们必有, 算符 S_x 和 S_z 必定不对易, 即

$$[S_x, S_z] \neq 0. \quad (2.68)$$

同样的, 我们也必定有

$$[X, P] \neq 0. \quad (2.69)$$

这里 X 表示微观粒子的位置算符, P 表示微观粒子的动量算符, $[A, B]$ 称作两个算符的对易子, 它的定义是 $[A, B] = AB - BA$ 。那么这两个例子中的这些不等于零的对易子到底应该是多少呢? 我们后面将继续讨论。

另外, 必要性命题的逆否命题是, 如果两个算符不对易, 那么它们相应物理量的值就不能总是可以同时测定。这里就出现了另一种可能性, 即算符 A, B 虽然对易子不等于零, 但是可能偶尔可以同时测定。这时候就说明, 这两个算符必定存在某些共同的本征态, 但这些本征态不足以构成希尔伯特空间的矢量基。一个例子就是角动量算符, 角动量算符的任何两个分量都不可对易, 但是对于特殊的角动量为0的量子态 $|\vec{J}^2 = 0\rangle$ 而言, 它就是 J_x, J_y, J_z 的一个共同本征态, 本征值都是0。因此如果系统处在 $|\vec{J}^2 = 0\rangle$ 态上, 那我们就可以同时测得 J_x, J_y, J_z 的值都为0。当然, 这

时候，由于 $|\vec{J}^2 = 0\rangle$ 是 J_x, J_y, J_z 的一个共同本征态，所以虽然 $[J_x, J_y] \neq 0$ ，但是 $[J_x, J_y]|\vec{J}^2 = 0\rangle = 0$ 。反过来，如果某两个算符 A, B ，它们的对易子在任何态 $|\psi\rangle$ 上的期望值都不为0，即 $\langle\psi|[A, B]|\psi\rangle \neq 0$ 对所有的 $|\psi\rangle$ 都成立，那 A, B 就不可能有任何共同的本征态，因此这时候 A, B 的值必定不可同时测定。一个典型的例子就是位置算符和动量算符，即 X, P ，这两个算符的对易子就是， $[X, P] = i\hbar$ ，即对易子是个常数，因此当然在任何态上的期望值都不为0，因此我们就必然有，在任何情况下 X 和 P 都不可能同时测定。当然，这个结论我们在本小节最开始的时候就已经知道了。

2.2.5 么正演化与薛定谔方程

现在让我们来考虑量子态随时间的演化，态叠加原理作为量子力学最为基本的原理，它当然应该在量子态的演化之下得以保持，因此如果我们将系统从 t_1 时刻到 t_2 时刻的时间演化看是由 t_1 时刻的量子态 $|\psi(t_1)\rangle$ 到 t_2 时刻的量子态 $|\psi(t_2)\rangle$ 的一个映射的话，这个映射应该是一个线性映射，也就是说，要用线性算符来刻画，不妨将这个线性算符记为 $U(t_2, t_1)$ ，称之为时间演化算符，则

$$|\psi(t_2)\rangle = U(t_2, t_1)|\psi(t_1)\rangle. \quad (2.70)$$

但是，我们也可以让时间反演，让系统反过来从 t_2 时刻演化到 t_1 时刻，从而有

$$|\psi(t_1)\rangle = U(t_1, t_2)|\psi(t_2)\rangle. \quad (2.71)$$

由这两个式子我们就有 $|\psi(t_2)\rangle = U(t_2, t_1)U(t_1, t_2)|\psi(t_2)\rangle$ ，以及 $|\psi(t_1)\rangle = U(t_1, t_2)U(t_2, t_1)|\psi(t_1)\rangle$ 。而由于 $|\psi(t)\rangle$ 是希尔伯特空间的任意量子态，因此这就意味着

$$U(t_1, t_2)U(t_2, t_1) = U(t_2, t_1)U(t_1, t_2) = 1. \quad (2.72)$$

也就是说，时间演化算符 $U(t_2, t_1)$ 必然是可逆的， $U^{-1}(t_2, t_1) = U(t_1, t_2)$ 。

另外在物理上，任意态 $|\psi\rangle$ 与其自身的内积代表总概率，概率守恒要求它恒等于1。这就要求时间演化算符必须保持

$$\langle\psi(t_2)|\psi(t_2)\rangle = \langle\psi(t_1)|U^\dagger(t_2, t_1)U(t_2, t_1)|\psi(t_1)\rangle = \langle\psi(t_1)|\psi(t_1)\rangle, \quad (2.73)$$

由于 $|\psi(t)\rangle$ 是任意的量子态，因此这一式子的后一个等号仅在下式得以满足时才能成立，

$$U^\dagger(t_2, t_1)U(t_2, t_1) = 1. \quad (2.74)$$

正如我们前面在线性算符这一节中已经证明过了的，这时候 $U(t_2, t_1)$ 的可逆性会进一步告诉我们， $U(t_2, t_1)$ 必然是一个幺正算符。这也就是说，量子态随着时间的演化必然是一种幺正演化，当然它也必然保持希尔伯特空间任意两个态的内积，这就是所谓的量子力学的幺正性。特别的，它告诉我们任意两个相互正交的量子态在时间演化之下将会始终保持正交，由于正交性是两个量子态可以确定地区分的充要条件，因此幺正性也告诉我们，任意两个可以确定地区分的量子态在时间演化之下将会始终都可以确定地区分。

很明显，如果时间演化算符中的 $t_2 = t_1 = t$ ，也就是说 t 的量子态演化到 t 时刻，那当然还是它本身，因此必然有 $U(t, t) = 1$ 。进一步，如果我们取 t_1 和 t_2 为两个相隔无穷小的时间，即 $t_1 = t, t_2 = t + dt$ ，那么我们就可以将时间演化算符作无穷小展开

$$U(t + dt, t) = 1 - \frac{i}{\hbar}Hdt. \quad (2.75)$$

式中我们已经忽略了高阶无穷小量，式中的 H 当然也是一个算符，而引入系数 $\frac{i}{\hbar}$ 的目的我们后面可以看到(纯粹从数学的角度来说这么做是任意的)。将这个无穷小展开式代入幺正性的方程(2.74)，我们就可以得到

$$1 = (1 + \frac{i}{\hbar}H^\dagger dt)(1 - \frac{i}{\hbar}Hdt) = 1 + \frac{i}{\hbar}(H^\dagger - H)dt + \dots \quad (2.76)$$

同样的，高阶无穷小量被忽略了，比较这个式子的最左边和最右边，我们发现一阶无穷小部分必须等于零，从而

$$H^\dagger = H. \quad (2.77)$$

也就是说，幺正性告诉我们，之前引入的算符 H 必定是一个厄米算符。

另一方面，由时间演化算符的定义，我们有

$$|\psi(t + dt)\rangle = U(t + dt, t)|\psi(t)\rangle \quad (2.78)$$

$$= \left(1 - \frac{i}{\hbar}Hdt\right)|\psi(t)\rangle = |\psi(t)\rangle - \frac{i}{\hbar}Hdt|\psi(t)\rangle. \quad (2.79)$$

由于 $\partial_t |\psi(t)\rangle = (|\psi(t+dt)\rangle - |\psi(t)\rangle)/dt$, 因此由上面的结果就可以得到

$$i\hbar \partial_t |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle. \quad (2.80)$$

这就是薛定谔方程最一般的形式, 而我们之前引入的厄米算符 H 就是哈密顿算符。在最一般的情况下, 哈密顿算符 H 可以是显含时间 t 的, 但如果 H 不显含 t , 那我们就很容易验证 $|\psi(t)\rangle = \exp(-iH(t-t_0)/\hbar) |\psi(t_0)\rangle$ 是薛定谔方程(2.80)在形式上的通解, 将这个通解与时间演化算符的定义进行比较, 就可以知道这时候

$$U(t, t_0) = \exp\left(-i\frac{H}{\hbar}(t-t_0)\right). \quad (2.81)$$

从时间演化算符的定义还能够导出它的一些一般性质, 比方说 $U(t_3, t_1) = U(t_3, t_2)U(t_2, t_1)$, 在数学上, 这一乘法性质再加上幺正性就完全刻画了时间演化算符的数学结构。

当然我们还需要确定哈密顿算符代表的是什么物理量。为此, 我们注意到德布罗意关系告诉我们, 一个具有确定能量 E 的粒子其波函数对时间的依赖关系为 $\exp(-iEt/\hbar)$, 将这个结果与哈密顿算符不显含时间情形下的表达式 $|\psi(t)\rangle = \exp(-iHt/\hbar) |\psi(0)\rangle$ 进行比较, 我们就可以知道, 哈密顿算符是与能量相对应的, 是能量这个物理量的算符表示。

到此为止, 我们就已经从量子力学的幺正性出发, 证明了哈密顿算符的存在性, 并确定了它的物理含义是能量算符。下一个问题是, 给定一个量子力学系统, 我们怎么具体地写出它的哈密顿算符呢? 哈密顿算符对应能量是一个一般性的指引, 也就是说, 我们要把对系统能量有贡献的每一项都包括在哈密顿算符里面。但有时候, 我们也许不能预先确定哪些项对系统能量有贡献, 这时候就要用到我们在讨论如何构造物理量的厄米算符的时候谈到的一般性原则了, 也就是说, 我们可以先猜测哪些项对能量有贡献, 然后写出相应的哈密顿算符, 再求出这个哈密顿算符的本征值(当然这就是系统能量的取值), 再将算出来的这些值和能量的实际测量值进行比较, 或者我们也可以根据写出来的这个哈密顿算符求出系统的时间演化, 进而算出在这种时间演化之下某些物理量的期望值随时间的变化, 然后再将之与实验进行比较。如此不断调整我们的猜测, 直到理论和实验相吻合。

2.2.6 算符的矩阵表示

到此为止我们所有的推导都是使用狄拉克符号和相应的线性算符来进

行的。这样做的好处很明显，因为它们不光是所有的物理学家使用的通用语言，更重要的是它们最容易说清楚量子力学的一般性理论结构。因此，到此为止我们几乎所有的讨论都是普遍适用的，它适用于单个微观粒子，也适用于多粒子体系，同样也适用于量子场，甚至适用于整个宇宙。但这样的表述有时候也有它不方便的地方，那就是过于抽象了，我们是在比较抽象的意义上讨论量子态和算符的，我们使用的狄拉克符号也是一种抽象的记号，从某种意义上来说，我们前面所有涉及到狄拉克符号和算符的推导实际上都是在做某种抽象代数的运算。当然，前面谈到态矢量 $|\psi\rangle$ 的时候，我们常常让大家将它想象成列矢量，说到 $\langle\psi|$ 的时候我们会让大家想象列矢量 $|\psi\rangle$ 的厄米共轭，也就是一个行矢量，而谈到算符的时候，我们也总是让大家将它想象成矩阵。但严格来说，这些都是不必要的，我们这么说的时候其实是为了帮助大家理解这些抽象的东西的运算规则。

然而，在某种意义上，态矢量 $|\psi\rangle$ 和列矢量的确本质是一回事，算符和矩阵也的确是一回事。更准确一点来说，列矢量是态矢量 $|\psi\rangle$ 在希尔伯特空间的某个矢量基下的表示，同样，矩阵也是算符的具体表示。下面我们将进一步建立这两者间的密切联系。

首先，我们可以写出任意一个算符 A 的定义方程，即 $A|\psi\rangle = |\phi\rangle$ 。然后我们在希尔伯特空间中任选一组正交归一的矢量基 $\{|i\rangle, i = 1, 2, 3, \dots\}$ 。我们把算符的定义方程和某个基矢量 $|j\rangle$ 做内积，从而就得到 $\langle j|A|\psi\rangle = \langle j|\phi\rangle$ 。最后，我们在这个表达式的 A 和 $|\psi\rangle$ 之间插入一个单位算符1，并使用单位算符1的分解定理，从而就可以得到

$$\sum_i \langle j|A|i\rangle \langle i|\psi\rangle = \langle j|\phi\rangle. \quad (2.82)$$

前面我们说过 $\langle i|\psi\rangle$ 就是态矢量 $|\psi\rangle$ 在矢量基 $\{|i\rangle, i = 1, 2, 3, \dots\}$ 中的第*i*个分量，同样 $\langle i|\phi\rangle$ 是态矢量 $|\phi\rangle$ 的第*i*个分量，这些分量都是数，因此我们当然可以将它们分别排成一个列矢量 ψ 和 ϕ （现在这两个符号表示的是通常的列矢量，希望不会引起大家的混淆） $\psi = (\langle 1|\psi\rangle, \langle 2|\psi\rangle, \langle 3|\psi\rangle, \dots)^T$ ， $\phi = (\langle 1|\phi\rangle, \langle 2|\phi\rangle, \langle 3|\phi\rangle, \dots)^T$ （由于我们这里写的是行矢量，所以加一个转置符号 T 表示将之变成列矢量）。同时，我们引入一个矩阵 \hat{A} ，它的第*j*行第*i*列 \hat{A}_{ji} 定义成 $\hat{A}_{ji} = \langle j|A|i\rangle$ 。现在，我们就可以看出来，方程(2.82)实际上是一个标准的线性方程， $\hat{A}\psi = \phi$ 。类似的，你也很容易得到 $\langle\phi|\psi\rangle = \sum_i \langle\phi|i\rangle \langle i|\psi\rangle = \phi^\dagger\psi$ 。类似的，如果你有两个算符 A 和 B ，它们的矩阵表示分别为 \hat{A} 和 \hat{B} ，那么由于 $\langle k|AB|i\rangle = \sum_j \langle k|A|j\rangle \langle j|B|i\rangle$ （请注意，等式右边的表达式实际上就是矩阵 \hat{A} 和 \hat{B} 的乘积），因此你可以看到，两个算符的乘

积 AB 将表示成两个矩阵的乘积 $\hat{A}\hat{B}$, 数学家常常称这样的过程为算符代数的矩阵表示。

特别的, 对于厄米算符 A , 由于它满足(2.47), 所以它在任意矢量基 $\{|i\rangle, i = 1, 2, 3\dots\}$ 中的矩阵表示必然满足

$$\langle i|A|j\rangle^* = \langle j|A|i\rangle. \quad (2.83)$$

也即是说, 矩阵 \hat{A} 的共轭转置必然等于它本身 $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$, 这样的矩阵称为厄米矩阵。所以, 厄米算符的表示矩阵必定为厄米矩阵。

前面的分析告诉我们, 只要选定了一组矢量基, 那么任何量子态都可以在这个基中表示成一个列矢量, 而任何算符都可以在这个基中表示成一个矩阵。反过来, 给出某组矢量基中某个量子态的列矢量, 和某个算符的矩阵, 我们也可以唯一性地得到原来的抽象的态矢量和抽象的算符。这是因为, 只要给出了这些列矢量和矩阵, 我们其实就有诸如(2.82)式这样的方程, 而利用单位算符1的分解定理, 我们就能从这个方程反过来得到, $\langle j|A|\psi\rangle = \langle j|\phi\rangle$, 其中的 $|\psi\rangle$ 反过来由列矢量 ψ 给出, 即 $|\psi\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\psi\rangle$, 进一步我们又有 $|j\rangle\langle j|A|\psi\rangle = |j\rangle\langle j|\phi\rangle$, 将这个式子两边分别对 j 进行求和, 并再一次利用单位算符1的分解定理, 我们就回到了原来的算符方程 $A|\psi\rangle = |\phi\rangle$, 而其中算符 A 现在反过来由矩阵 \hat{A} 给出, 即 $A = \sum_{i,j} |j\rangle\hat{A}_{ji}\langle i|$ 。由此可见, 只要选定了一组矢量基, 那么态矢量及其列矢量表示, 算符及其矩阵表示, 实际上是完全等价的。列矢量和矩阵表示的好处是方便于具体的计算, 坏处是必须先选取一组矢量基。而抽象的狄拉克符号和抽象的算符不依赖于矢量基的选取, 因此往往在推导理论公式的时候更加简洁方便。人们通常称算符 A 在矢量基 $\{|i\rangle, i = 1, 2, 3\dots\}$ 中的表示矩阵 \hat{A} 为算符 A 在 $\{|i\rangle, i = 1, 2, 3\dots\}$ 表象中的矩阵表示。

值得强调的是, 矢量基的选取是任意的, 因此如果你换一组不同的矢量基, 那你将得到同一个态矢量的不同列矢量表示, 同样, 你也将得到同一个算符的不同矩阵表示。利用单位算符1在不同矢量基之下不同的分解, 你很容易推导出这些不同表示之间的联系, 人们有时候称这种联系为表象变换。既然矢量基的选取可以是任意的, 一个重要的问题是, 选取哪个矢量基是最好的呢? 回答是, 这要看具体情况, 在不同的情形中, 选取不同的矢量基有不同的方便之处。当然, 有一些矢量基是人们常用的, 下面我们就举一个具体的例子。

电子自旋算符的矩阵表示

斯特恩-格拉赫实验发现电子有一个内部的自由度，即自旋。实验发现电子自旋状态要用量子力学来描述，在任何一个方向上，电子的自旋角动量只可能有两个不同的取值，即 $\pm\hbar/2$ 。作为物理量，电子的自旋角动量当然也要用厄米算符来表示，因此我们用 S_x, S_y, S_z 分别表示 x, y, z 三个分量的自旋角动量算符。由于自旋的任何分量只有两个取值 $\pm\hbar/2$ ，这就告诉我们算符 S_x, S_y, S_z 分别都只有这两个本征值。这也就是说算符 S_x^2, S_y^2, S_z^2 都只有一个取值即 $\hbar^2/4$ ，这样的算符当然只能是常数算符，也就是说，

$$S_x^2 = S_y^2 = S_z^2 = \hbar^2/4. \quad (2.84)$$

另外，作为一种角动量，自旋算符也要满足角动量算符的一般代数关系，这里我们直接给出这些代数关系，

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z, [S_y, S_z] = i\hbar S_x, [S_z, S_x] = i\hbar S_y. \quad (2.85)$$

为了数学上的方便，习惯上人们通常引入所谓的泡利算符 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ ，它们的定义是 $S_x = (\hbar/2)\sigma_x, S_y = (\hbar/2)\sigma_y, S_z = (\hbar/2)\sigma_z$ 。因此，要将电子自旋算符表示成矩阵，我们只需要等价地将泡利算符表示成矩阵就可以了。泡利算符当然也是厄米算符，而且它们的定义告诉我们，其本征值总是 ± 1 ，从而方程(2.84)就可以重写成

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1. \quad (2.86)$$

而方程(2.85)就将变成 $[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z, [\sigma_y, \sigma_z] = 2i\sigma_x, [\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y$ 。因此就有 $\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x = (\sigma_x[\sigma_z, \sigma_x] + [\sigma_z, \sigma_x]\sigma_x)/(2i) = (\sigma_x\sigma_z\sigma_x - \sigma_x^2\sigma_z + \sigma_z\sigma_x^2 - \sigma_x\sigma_z\sigma_x)/(2i) = 0$ ，式中第一个等号我们利用了 $[\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y$ ，第二个等号是直接从算符对易子的定义得来的，第三个等号利用了 $\sigma_x^2 = 1$ ，因此我们得到了 $\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x = 0$ 。类似的推导告诉我们

$$\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x = 0, \sigma_y\sigma_z + \sigma_z\sigma_y = 0, \sigma_z\sigma_x + \sigma_x\sigma_z = 0. \quad (2.87)$$

也就是说，这三个泡利算符是两两反交换的，或者说反对易的，所谓两个算符反对易即是指 $AB = -BA$ 。不光如此，而且由 $[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$ 我们还有 $\sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x = 2i\sigma_z$ ，由于 σ_x 和 σ_y 反对易，这其实也就是

$$\sigma_x\sigma_y = i\sigma_z. \quad (2.88)$$

我们注意到，泡利算符同时满足方程(2.86)和(2.87)，由这两个方程其实就能推导出必有 $\sigma_x\sigma_y = \pm i\sigma_z$ ，方程(2.88)只是在这两种可能性中选定了一种。

同时满足类似这样的方程的抽象代数就叫Clifford代数，数学家已经系统地研究过这类代数的矩阵表示了，下面我们将演示给大家这样的表示可以如何进行。

下面的推导在数学上是完全严格的。它完全是从泡利算符的抽象代数出发，也即是从方程(2.86)，(2.87)以及方程(2.88)出发，然后构造出一切。尤其是，我们没有隐含地假设任何算符的本征态的存在性，我们是直接构造出了这些本征态。

下面开始我们的推导。首先我们注意到 σ_z 可以由 σ_x 和 σ_y 的乘积给出，所以我们的注意力将主要放在 σ_x 和 σ_y 上。我们定义两个新的算符 σ 和 σ^\dagger ，

$$\sigma = (\sigma_x - i\sigma_y)/2, \quad \sigma^\dagger = (\sigma_x + i\sigma_y)/2. \quad (2.89)$$

则利用方程(2.86)和(2.87)，我们很容易得到

$$\sigma^2 = \sigma^\dagger 2 = 0. \quad (2.90)$$

而且，由于 $\sigma^\dagger \sigma = (\sigma_x + i\sigma_y)(\sigma_x - i\sigma_y)/4 = (\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + i\sigma_y\sigma_x - i\sigma_x\sigma_y)/4 = (1 + \sigma_z)/2$ ，这里最后一个等号我们利用了 σ_x 和 σ_y 的反对易以及 $\sigma_x\sigma_y = i\sigma_z$ ，类似的，我们也可以算得 $\sigma\sigma^\dagger = (1 - \sigma_z)/2$ ，归纳一下即有

$$\sigma^\dagger \sigma = (1 + \sigma_z)/2, \quad \sigma\sigma^\dagger = (1 - \sigma_z)/2. \quad (2.91)$$

由后一个式子我们可以得到 $0 = \sigma\sigma^\dagger 2 = (\sigma^\dagger - \sigma_z\sigma^\dagger)/2$ (因为 $\sigma^\dagger 2 = 0$)，即

$$\sigma_z\sigma^\dagger = \sigma^\dagger. \quad (2.92)$$

由于 $\sigma^2 = 0$ ，所以我们必定可以在电子的所有自旋量子态中找到某个量子态，我们记作 $|\downarrow\rangle$ ，它满足

$$\sigma|\downarrow\rangle = 0. \quad (2.93)$$

这是因为，任取一个自旋量子态 $|\psi\rangle$ ，如果它满足 $\sigma|\psi\rangle = 0$ ，那这个 $|\psi\rangle$ 就是我们要找的态，如果 $\sigma|\psi\rangle \neq 0$ ，那我们就可以令 $\sigma|\psi\rangle = |\phi\rangle$ ，这时候将有 $\sigma|\phi\rangle = \sigma^2|\psi\rangle = 0$ (后一个等号是由于 $\sigma^2 = 0$)，因此 $|\phi\rangle$ 就将是我们要找的态。总之，满足方程(2.93)的量子态 $|\downarrow\rangle$ 总能找到。对于这个态我们必须有 $0 = \langle\downarrow|\sigma^\dagger\sigma|\downarrow\rangle = \langle\downarrow|(1 + \sigma_z)|\downarrow\rangle/2$ ，即有 $\langle\downarrow|(1 + \sigma_z)|\downarrow\rangle = 0$ ，由于 σ_z 的本征值为 ± 1 ，因此这个结果就告诉我们 $|\downarrow\rangle$ 必定是 σ_z 的本征值为 -1 的本征态，即

$$\sigma_z|\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle. \quad (2.94)$$

这就是为什么我们记这个态为自旋向下态的原因，因为 σ_z 在这个态上的本征值为 -1 这就意味着它是 S_z 的本征值为 $-\hbar/2$ 的本征态，我们称这样的量子态为自旋向下态。

下面我们引入一个新的自旋量子态，我们记作 $|\uparrow\rangle$ ，它的定义是

$$|\uparrow\rangle = \sigma^\dagger |\downarrow\rangle. \quad (2.95)$$

利用方程(2.92), 我们容易得到 $\sigma_z |\uparrow\rangle = \sigma_z \sigma^\dagger |\downarrow\rangle = \sigma^\dagger |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$, 也就是说， $|\uparrow\rangle$ 必为 σ_z 的本征值为 $+1$ 的本征态，即

$$\sigma_z |\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle. \quad (2.96)$$

这就是我们为什么将这个态记作自旋向上态的基本原因，因为它作为 σ_z 的本征值为 $+1$ 的本征态就必然也是 S_z 的本征值为 $+\hbar/2$ 的本征态。

将方程(2.95)共轭转置，就有 $\langle\uparrow| = \langle\downarrow|\sigma$, 因此， $\langle\uparrow|\downarrow\rangle = \langle\downarrow|\sigma|\downarrow\rangle = 0$ (后一个等号是由于方程(2.93)), 也即

$$\langle\uparrow|\downarrow\rangle = 0. \quad (2.97)$$

因此自旋向上态和自旋向下态必定是两个正交的量子态，这正符合这两个态可以确定地区分的物理要求。而且我们也可以算得 $\langle\uparrow|\uparrow\rangle = \langle\downarrow|\sigma\sigma^\dagger|\downarrow\rangle = \langle\downarrow|(1 - \sigma_z)/2|\downarrow\rangle = \langle\downarrow|\downarrow\rangle$, 因此如果我们将最开始时选的 $|\downarrow\rangle$ 态归一化，那由方程(2.95)定义的 $|\uparrow\rangle$ 也将自动是归一化的，即

$$\langle\downarrow|\downarrow\rangle = \langle\uparrow|\uparrow\rangle = 1. \quad (2.98)$$

由于同时满足正交归一性，因此我们构造出来的 $\{|\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle\}$ 可以作为电子自旋量子态的两个基矢量。从物理上来说，这两个基矢量当然应该是完备的。但是，我们能够从泡利算符的代数出发从数学上证明这一点吗？回答很简单，可以。比方说我们观察刚才的两个基矢量 $|\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle = \sigma^\dagger |\downarrow\rangle$, 我们发现 $|\uparrow\rangle$ 是用 σ^\dagger 作用在 $|\downarrow\rangle$ 上得到的，那我们能用 σ^\dagger 再重复作用一次从而得到第三个态吗？答案是不能，因为 $\sigma^{\dagger 2} = 0$, 因此 σ^\dagger 的重复作用只能得到0，即

$$\sigma^\dagger |\uparrow\rangle = 0. \quad (2.99)$$

那如果用 σ 作用在 $|\uparrow\rangle$ 上能得到新的态吗？答案是，也不能，因为 $\sigma|\uparrow\rangle = \sigma\sigma^\dagger|\downarrow\rangle = (1 - \sigma_z)/2|\downarrow\rangle = |\downarrow\rangle$, 也即

$$\sigma|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle. \quad (2.100)$$

因此我们就证明了电子自旋的基矢量 $\{|\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle\}$ 不能再进一步扩大，从而它们就是完备的。因此它们就可以作为电子自旋态空间的矢量基。

以 $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ 为矢量基(现在要注意这两个基矢量的排列顺序)，我们就能够分别计算出泡利算符 $\sigma_z, \sigma, \sigma^\dagger$ 在这个基中的表示矩阵 $\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}, \hat{\sigma}^\dagger$.

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} \langle \uparrow | \sigma_z | \uparrow \rangle & \langle \uparrow | \sigma_z | \downarrow \rangle \\ \langle \downarrow | \sigma_z | \uparrow \rangle & \langle \downarrow | \sigma_z | \downarrow \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.101)$$

$$\hat{\sigma} = \begin{pmatrix} \langle \uparrow | \sigma | \uparrow \rangle & \langle \uparrow | \sigma | \downarrow \rangle \\ \langle \downarrow | \sigma | \uparrow \rangle & \langle \downarrow | \sigma | \downarrow \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.102)$$

$$\hat{\sigma}^\dagger = \begin{pmatrix} \langle \uparrow | \sigma^\dagger | \uparrow \rangle & \langle \uparrow | \sigma^\dagger | \downarrow \rangle \\ \langle \downarrow | \sigma^\dagger | \uparrow \rangle & \langle \downarrow | \sigma^\dagger | \downarrow \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.103)$$

在计算的过程中，我们需要使用方程(2.93), (2.94), (2.95), (2.96), (2.97), (2.98), (2.99), (2.100)，当然，这些方程中的每一个其实都很简单。

而由 σ, σ^\dagger 的定义式(2.89)，我们又可以进一步得到 σ_x 的表示矩阵 $\hat{\sigma}_x = \hat{\sigma} + \hat{\sigma}^\dagger$ 以及 σ_y 的表示矩阵 $\hat{\sigma}_y = i(\hat{\sigma} - \hat{\sigma}^\dagger)$ 。这三个矩阵 $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ 就是著名的泡利矩阵，我们将它们归纳在下面，

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.104)$$

2.2.7 *一个数学附录

在这个附录中我们将给出希尔伯特空间线性算符奇异值分解定理的证明，我们将假定所要考察的这个希尔伯特空间是有限维的，并且为了简单起见，我们常常默认本征值非零的本征态没有简并，当然将我们的证明扩展到有简并的情况并不是一件很难的事情。我们要证明的即是，希尔伯特空间的任何线性算符 A 都可以写成如下形式

$$A = \sum_i |u_i\rangle \lambda_i \langle v_i|, \quad (2.105)$$

其中 $\lambda_i \neq 0$, $\{|u_i\rangle, i = 1, 2, 3, \dots\}$ 和 $\{|v_i\rangle, i = 1, 2, 3, \dots\}$ 分别从属于希尔伯特空间的两组正交归一的矢量基，因此有

$$\langle u_i | u_j \rangle = \langle v_i | v_j \rangle = \delta_{ij}. \quad (2.106)$$

首先构造厄米算符 $A^\dagger A$ 和 AA^\dagger 。设 $|v_i\rangle$ 为 $A^\dagger A$ 的本征态，相应的本征值为 a_i ，同样设 $|u_i\rangle$ 为 AA^\dagger 的本征态，相应的本征值为 b_i 。即，

$$A^\dagger A|v_i\rangle = a_i|v_i\rangle, AA^\dagger|u_i\rangle = b_i|u_i\rangle. \quad (2.107)$$

作为厄米算符的本征态， $\{|u_i\rangle, i = 1, 2, 3, \dots\}$ 和 $\{|v_i\rangle, i = 1, 2, 3, \dots\}$ 当然分别都是正交归一的。

又由于 $(AA^\dagger)A|v_i\rangle = A(A^\dagger A)|v_i\rangle = a_i A|v_i\rangle$ ，可见 $A|v_i\rangle$ 是 AA^\dagger 的一个本征态，不妨取

$$A|v_i\rangle = \lambda_i|u_i\rangle. \quad (2.108)$$

同样，由于 $(A^\dagger A)A^\dagger|u_i\rangle = b_i A^\dagger|u_i\rangle$ ，所以 $A^\dagger|u_i\rangle$ 也是 $A^\dagger A$ 的一个本征态。又由于 $\lambda_i \delta_{ji} = \lambda_i \langle u_j | u_i \rangle = \langle u_j | A | v_i \rangle = \langle v_i | A^\dagger | u_j \rangle^*$ ，即 $\langle v_i | A^\dagger | u_j \rangle = \lambda_i^* \delta_{ji}$ 。可见必有

$$A^\dagger|u_j\rangle = \lambda_j^*|v_j\rangle. \quad (2.109)$$

由方程(2.108)和方程(2.109)可知，

$$A = \sum_i |u_i\rangle \lambda_i \langle v_i|, A^\dagger = \sum_i |v_i\rangle \lambda_i^* \langle u_i|. \quad (2.110)$$

这就证明了奇异值分解定理。

上面最后一步的详细推理过程是这样的：由方程(2.108)和方程(2.109)可知， $|u_i\rangle$ 和 $|v_i\rangle$ 是一一对应的。进而可以得到 $A|v_i\rangle \langle v_i| = \lambda_i |u_i\rangle \langle u_i|$ ，两边对*i*求和，就得到 $A \sum_i |v_i\rangle \langle v_i| = \sum_i \lambda_i |u_i\rangle \langle u_i|$ ，由于 $\{|v_i\rangle, i = 1, 2, 3, \dots\}$ 是希尔伯特空间的矢量基，因此 $\sum_i |v_i\rangle \langle v_i| = 1$ ，这样就得到了最终的结果。而且由方程(2.108)和方程(2.109)也很容易知道 $a_i = |\lambda_i|^2 = b_i$ 。

一个细节的问题是，仔细观察我们的证明过程，你会发现过程中建立起来的 $|u_i\rangle$ 和 $|v_i\rangle$ 之间的一一对应仅在 $a_i = b_i > 0$ (也就是 $\lambda_i \neq 0$)时才成立。至于 $a_i = 0$ 的那些态，它和 $b_j = 0$ 的那些态之间其实并没有对应关系，而是相互独立的，好在这并不影响我们最后的结论，只是需要我们在最后的表达式中加上 $\lambda_i \neq 0$ 的限制，并将分别与 $a_i = 0$ 和 $b_j = 0$ 相应的那些本征态排除在求和范围之外。这些与 $a_i = 0$ 对应的本征态(假设共有 N_a 个，即 N_a 重简并)，以及与 $b_j = 0$ 对应的本征态(假设共有 N_b 个，即 N_b 重简并)，它们其实是数学家很关心的东西，因为对于很大一类线性算符，数学家证明了一

个著名的数学定理，它说， $N_a - N_b$ 其实是一个拓扑不变量，这就是阿蒂亚-辛格指标定理。

$N_a - N_b$ 有某种拓扑不变性其实是不难理解的。所谓的拓扑不变性就是指在连续变化下的某种不变性，也就是说，设想线性算符 A 依赖于某些连续参数 μ ，当 μ 连续变化时， $N_a(\mu) - N_b(\mu)$ 将保持不变。这里的原因其实很简单，设想随着 μ 的连续变化，某个 $a_i = 0$ 的本征态 $|v_i\rangle$ 变成了一个 $a_i \neq 0$ 的态，因此 N_a 就减少了1。但是奇异值分解定理的证明过程告诉我们， $a_i \neq 0$ 的本征态一定是和 $b_i \neq 0$ 的本征态一一对应的，现在， $a_i \neq 0$ 的本征态增加了一个，那这就必然意味着 $b_i \neq 0$ 的本征态也同时新增了一个，这个新增的态是从哪来的呢？必然是因为某个原来 $b_i = 0$ 的本征态 $|u_i\rangle$ 随着参数 u 的连续调节变成了 $b_i \neq 0$ 。那这就意味着， N_b 也同时减少了1。也就是说，随着参数 μ 的连续调节， N_a 和 N_b 必然是同步减少的，同样，我们也可以论证它们必然是同步增加的。既然 N_a 和 N_b 总是同步的增加或者同步的减少，那它们的差值 $N_a(\mu) - N_b(\mu)$ 就将保持不变。所以 $N_a - N_b$ 具有拓扑不变性的直观论证并不难，难的是找到相应的拓扑不变量的表达式，并证明它等于 $N_a - N_b$ 。阿蒂亚和辛格实际上是对一大类线性算符完成了这一困难的工作。

回到我们的奇异值分解定理。如果算符 A 满足 $AA^\dagger = A^\dagger A$ (数学家称这种算符为正规算符)，则由奇异值分解定理的证明过程可知，这时候总可以取 $|u_i\rangle = |v_i\rangle$ ，因此 $|u_i\rangle$ 也是 A 的本征态，而 A 必然能够分解成

$$A = \sum_i |u_i\rangle \lambda_i \langle u_i|. \quad (2.111)$$

如果把算符表示成矩阵，与正规算子对应的就叫作正规矩阵，正规算子的分解定理实际上告诉我们，正规矩阵一定是可对角化的。反过来，如果一个希尔伯特空间的线性算符可对角化，也就是能分解成如(2.111)这样的形式，则由 $|u_i\rangle$ 的正交归一性很容易验证这个算符必为正规算符。

特别的，幺正算符 U 就是一个正规算符，而且由于 $U^\dagger U = UU^\dagger = 1$ ，所以 $|\lambda_i|^2 = 1$ ，所以必有 $\lambda_n = e^{i\theta_n}$ 。即幺正算符一定能分解成

$$U = \sum_n e^{i\theta_n} |u_n\rangle \langle u_n|. \quad (2.112)$$

比方说时间演化算符 $U = e^{-iHt/\hbar}$ 就可以分解成

$$e^{-iHt/\hbar} = \sum_n e^{-iE_nt/\hbar} |E_n\rangle \langle E_n|. \quad (2.113)$$

厄米算符也是正规算符，因此也必定能分解成形如 $\sum_i \lambda_i |u_i\rangle\langle u_i|$ 的形式，而且这时候本征值 λ_i 必定是实数。

2.2.8 习题

1. 请证明施瓦兹(Schwarz)不等式，

$$\langle\psi|\psi\rangle\langle\phi|\phi\rangle \geq |\langle\phi|\psi\rangle|^2.$$

提示：利用 $(\langle\psi| + z^*\langle\phi|) \cdot (|\psi\rangle + z|\phi\rangle) \geq 0$ (z 为任意复数)。

2. 对于任意一个厄米算符 A 和任意一个量子态 $|\psi\rangle$ ，我们可以定义厄米算符 $\Delta A = A - \bar{A}$ 。 $(\Delta A)^2$ 在 $|\psi\rangle$ 态上的期望值 $\overline{(\Delta A)^2} = \bar{A}^2 - \bar{A}^2$ 称为物理量 A 的均方差。假设有两个厄米算符 A, B ，以及某个任意的量子态 $|\psi\rangle$ ，请证明下面的不等式

$$\overline{(\Delta A)^2} \cdot \overline{(\Delta B)^2} \geq \frac{1}{4} |\overline{[A, B]}|^2.$$

提示：首先，对量子态 $|\psi_1\rangle = \Delta A |\psi\rangle$ 、 $|\psi_2\rangle = \Delta B |\psi\rangle$ 用施瓦兹不等式。其次，注意到 $\Delta A \Delta B = \frac{1}{2}[A, B] + \frac{1}{2}\{\Delta A, \Delta B\}$ ，其中 $[A, B]^\dagger = -[A, B]$ 为一个反厄米算符，其期望值为纯虚数，而 $\{\Delta A, \Delta B\} = \Delta A \Delta B + \Delta B \Delta A$ 为厄米算符，其期望值为实数。

3. 证明：任意 2×2 的厄米矩阵 X 都可以写称 $X = x_0 \cdot 1 + x_1 \hat{\sigma}_x + x_2 \hat{\sigma}_y + x_3 \hat{\sigma}_z$ 的形式，式中 x_0, x_1, x_2, x_3 是四个实数，并请证明 X 的行列式为 $\det(X) = x_0^2 - x_1^2 - x_2^2 - x_3^2$ 。

4. 注意上一题的 $\det(X)$ 。如果将 x_0, x_1, x_2, x_3 理解为狭义相对论的四维矢量的四个分量，那么 $\det(X)$ 刚好是这个四维矢量的“长度”平方。这意味着，任何四维矢量都对应于一个 2×2 的厄米矩阵。狭义相对论的间隔不变性告诉我们，任何四矢量的“长度”平方在洛伦兹变换下都是不变的，请据此证明：任意洛伦兹变换都可以表示为一个行列式为1的 2×2 复矩阵(通常称这样的复矩阵的集合为 $SL(2, \mathbb{C})$)，并由此证明洛伦兹变换有6个独立的实参数。

5. 请证明算符恒等式：(1), $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$ 。(2), $[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$ 。

6. 有两个算符 A, B , 记它们的对易子 $[A, B] = C$ 。如果 $[C, A] = [C, B] = 0$ 。请证明算符恒等式

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A, B]}.$$

7. 已知量子比特的两组正交归一矢量基 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ 以及 $\{|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)\}$, 且已知算符 F 在 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ 表象中的表示矩阵为

$$F = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.114)$$

求算符 F 在表象 $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ 中的表示矩阵。

2.3 量子纠缠

我们来考察双电子系统的自旋量子态, 由于态叠加原理, 下面这个量子态 $|\phi^+\rangle$ 显然是双电子系统的一个可能自旋态,

$$|\phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle). \quad (2.115)$$

这个量子态有一个特别的性质, 即它不能因式分解成第一个电子的某个自旋态 $|\phi_1\rangle$ 与第二个电子的某个自旋态 $|\phi_2\rangle$ 的乘积 $|\phi_1\rangle|\phi_2\rangle = |\phi_1, \phi_2\rangle$ 这样的形式。这就意味着处在 $|\phi^+\rangle$ 态上的两个电子共同形成了一个不可分解的整体, 而这个不可分割的整体与两个电子之间的距离没有关系, 也即是说, 即使你将其中一个电子放在南昌, 另一个放到天边, 这两者遥遥相隔, 但是它们却依然处于同一个不可分解的整体之中。

现在, 假设你沿着 z 轴测量南昌的这个电子的自旋, 那你会得到两种可能的结果, $1/2$ 的概率你将测到南昌的这个电子自旋向上 \uparrow , $1/2$ 的可能性你将测到它自旋向下 \downarrow 。但是, 奇妙的是, 由于南昌的这个电子和天边的那个电子形成了不可分解的整体 $|\phi^+\rangle$, 因此当你测到南昌的电子自旋向上时就意味着原来的 $|\phi^+\rangle$ 态塌缩到了 $|\uparrow\uparrow\rangle$ 态, 而这又意味着天边的电子立即处在 $|\uparrow\rangle$ 态, 同样的, 当你测到南昌的电子自旋向下时, 原来的 $|\phi^+\rangle$ 态就塌缩到了 $|\downarrow\downarrow\rangle$ 态, 因此天边的电子立即就处在 $|\downarrow\rangle$ 态。总之, 无论你测到南昌的电子自旋向上还是自旋向下, 两者的整体就塌缩了, 相应的就立即决定了天边电子的量子态。由于这种你在南昌的测量对天边电子的影响是立即的, 所以很多人会说: 这意味着在量子力学里信息可以超光速传播, 利用量子纠缠态可以超光速地传递信息。情况果真如此吗?

2.3.1 量子纠缠能实现超光速信息传递吗？

为了分析量子纠缠态能否实现超光速传递信息的问题，让我们假设某个实验室中制备了 N 对电子，每一对都处在纠缠态 $|\phi^+\rangle$ ，你和你的她分别持有每一对电子中的一个，你待在南昌，而她去了天边，因此你们分享着 N 个纠缠对，但是你们之间不能通信。在这种情况下，你能用你们之间分享的纠缠对来给她瞬时传递信息吗？比方说，你和她约定，如果你们在南昌养的那只猫死了，你就会对你的电子进行测量，而你的测量立即就会影响她持有的另一个电子，因此看起来只要她接着对自己持有的那个电子进行测量就能获知猫死的信息。情况真是这样的吗？

现在，假设南昌的猫死了，因此你沿着 z 轴测量了你们共享的 N 个纠缠对中你所持有的那些电子，但是纠缠对的塌缩是随机的，因此你有 $1/2$ 的可能性测到某个电子自旋向上， $1/2$ 的可能性测到自旋向下，而你无法决定自己的测量结果，因此完成测量之后，你的 N 个电子大约会有一半自旋向上，另一半自旋向下，哪些自旋向上，哪些自旋向下是完全随机的。接着，她也对自己的电子进行了测量，当然，你的测量立即影响到了她的电子，因此所有你测到你的电子自旋向上的那些纠缠对，她也会测到自己的另一个电子自旋向上，所有你测到自己的电子自旋向下的纠缠对，她也会测到自己的另一个电子自旋向下。但问题是，你们之间不能通信，因此她无从得知你的测量结果，也就是说，她不知道你测到的哪些电子自旋向上，哪些电子自旋向下。对她来说，她唯一能知道的就是，她自己测量的结果是，大约有一半的电子自旋向上，另一半的电子自旋向下，而且在她看来，哪些电子自旋向上，哪些电子自旋向下是完全随机的。而根据纠缠态 $|\phi^+\rangle$ 塌缩的随机性，即使你根本没有作任何测量，只有她一个人在天边对她的那些电子进行测量，她也会得到完全类似的结论。也就是说，你的测量根本就不能增加任何她从自己的测量中获取的信息，她甚至根本就无从判断你有没有测量。因此她根本就无从得知你们的猫死了。

看来，你根本就无法利用纠缠对超光速地传递信息，甚至你根本就无法利用这些纠缠对来传递信息。但是，你说且慢，以上只考虑了你沿着 z 轴测量的情况，假设你有两种不同的测量选择，要么你沿 z 轴测量你的所有电子，要么你沿着 x 轴测量你的电子，那能不能通过你的测量对她的即时影响将你的这两种不同选择传递给她呢？如果能的话，那你就可以用你的不同选择来代表猫的两种不同状态，从而就能将猫死了的信息超光速地传递给她。

为了下一步的分析，我们首先来看一下 x 方向的测量和 z 方向的测量有什么不同。量子力学的基本原理告诉我们，如果我们沿着 x 轴测量电子的自旋态，那么被测的电子就会塌缩到 x 方向上的两个自旋本征态 $|\uparrow_x\rangle$ 和 $|\downarrow_x\rangle$ 中的某一个，这两个本征态和 z 方向本征态的关系是

$$|\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_x\rangle + |\downarrow_x\rangle), |\downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_x\rangle - |\downarrow_x\rangle). \quad (2.116)$$

当然，反过来也有

$$|\uparrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle), |\downarrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle). \quad (2.117)$$

另外，由于 $|\uparrow\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle|\uparrow\rangle = \frac{1}{2}(|\uparrow_x\rangle + |\downarrow_x\rangle)(|\uparrow_x\rangle + |\downarrow_x\rangle) = \frac{1}{2}(|\uparrow_x\rangle|\uparrow_x\rangle + |\downarrow_x\rangle|\downarrow_x\rangle + |\uparrow_x\rangle|\downarrow_x\rangle + |\downarrow_x\rangle|\uparrow_x\rangle) = \frac{1}{2}(|\uparrow_x\uparrow_x\rangle + |\downarrow_x\downarrow_x\rangle + |\uparrow_x\downarrow_x\rangle + |\downarrow_x\uparrow_x\rangle)$ ，类似的 $|\downarrow\downarrow\rangle = \frac{1}{2}(|\uparrow_x\uparrow_x\rangle + |\downarrow_x\downarrow_x\rangle - |\uparrow_x\downarrow_x\rangle - |\downarrow_x\uparrow_x\rangle)$ ，所以我们可以知道，原来的纠缠态 $|\phi^+\rangle$ 也可以写成

$$|\phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_x\uparrow_x\rangle + |\downarrow_x\downarrow_x\rangle). \quad (2.118)$$

假设你有沿着 z 轴和沿着 x 轴两种测量选择，她也知道你有这两种选择，并且你们约定，如果你沿着 z 轴测量，那就代表猫还活着，如果你沿 x 轴测量那就代表猫死了。由于你们无法正常通信，所以你当然不能直接告诉她你的测量选择是什么，她只能从她自己随后的测量结果中对你的测量方式进行推断，那么她能推断出你的测量方式进而得知猫的死活吗？由于她无法预先知道你的测量方式，所以她自己只能从两种不同测量方式中随机选取一种，比如说，假设她总是选择沿着 z 轴测量她的电子（由于 z 轴和 x 轴对于我们的纠缠态 $|\phi^+\rangle$ 完全对称，所以对于她选择沿 x 轴测量的所有分析将是完全类似的）。当然，我们总是假定她的测量在你的测量完成之后进行，而你有两种测量方式的选择，你沿着 z 轴测量她也沿着 z 轴测量的情况我们已经分析过了，结论是，她将得到大约一半电子自旋向上，另一半电子自旋向下的结论，并且哪些电子自旋向上哪些自旋向下对于她来说是完全随机的。

现在假设你沿着 x 轴测量，之后她再沿着 z 轴进行测量，我们来看她是否能得到不同的结果。由于纠缠态 $|\phi^+\rangle$ 也可以写成(2.118)的形式，所以你沿着 x 轴的测量结果将是，大约有一半你所持有的电子会塌缩到 $|\uparrow_x\rangle$ 态，当然由于纠缠态的性质(2.118)，这时候她相应的另一个电子也会立即塌

缩到 $|\uparrow_x\rangle$ 态，同样，你另半数电子会塌缩到 $|\downarrow_x\rangle$ 态，这时候她的相应电子也会立即塌缩到 $|\downarrow_x\rangle$ 态，当然这种塌缩是完全随机的。因此在你的测量完成以后，她所持有的每一个电子有 $1/2$ 的概率处在 $|\uparrow_x\rangle$ 态， $1/2$ 的概率处在 $|\downarrow_x\rangle$ 态，当然由于她还不知道你的测量方式，所以对于这个结果她是并不知情的。她只是选择沿着 z 轴进行她的测量，由(2.117)式可以知道，这时候如果她测的电子处在 $|\uparrow_x\rangle$ 态，那她的测量将会使得这个电子以 $1/2$ 的可能性塌缩到 $|\uparrow\rangle$ ，还有 $1/2$ 的可能性塌缩到 $|\downarrow\rangle$ ，如果她测的电子处在 $|\downarrow_x\rangle$ 态，结论也是一样的，因此总的来说，对于她所持有的每一个电子，她都有 $1/2$ 的概率测到它自旋向上， $1/2$ 的概率测到它自旋向下。因此，当她完成所有的测量以后，她同样发现，在她所持有的电子中，大约有一半自旋向上，有一半自旋向下，而且这个结果是完全随机的。你已经看到了，她所得到的这个结果和你沿着 z 轴进行测量时她所得到的结果完全一样。也即是说，远在天边的她根本无从推断出你的测量方式，因此当然也就无法得知猫的死活。因此，用这种方式同样无法实现信息的超光速传递。

那么这是不是意味着只要你不通过正常的通信直接告诉她你的测量方式，她就根本无从得知呢？能不能说明，量子纠缠态不仅无法超光速传递信息，甚至根本就无法用来传递信息呢？答案是不能。因为以上的结论都是在假定你和她之间无法进行通常的通信的情形下得到的。如果你们之间能够进行通常的通信，那即使你不直接告诉她你的测量方式，她也有可能推断出这个信息，即是说，如果你们之间能够正常通信，那你们之间共享的量子纠缠对是能够用来传递信息的。我们来看一下这是怎么回事。

假设你们之间能够正常通信，那么即使你不直接告诉她你的测量方式，你也还可以告诉她你的测量结果，也就是说，你也还可以告诉她你所测的每一个电子自旋是沿着你测量轴的正方向，还是沿着你测量轴的反方向，而她得知你的这些信息就能进一步推断出你是沿着 z 轴进行测量，还是沿着 x 轴进行测量。不妨假设你沿着 x 轴进行测量，因此在你的测量完成之后所有电子都塌缩到了某个 x 方向的本征态，这时候如果她也沿着 x 轴进行测量，那么由于纠缠的性质，她会发现她所测的每一个电子结果都和你的测量结果一样(指电子自旋是沿着测量轴还是反着测量轴的结果。注意，你已经告诉她这个测量结果了)。但是，如果她是沿着 z 轴进行测量，这时候由于她的电子已经处在 x 方向的某个本征态，而 x 方向的本征态塌缩到 z 方向的本征态是完全随机的，所以她会发现她所测的电子到底是沿着测量轴的正方向还是反方向，这与你告诉她的测量结果之间完全没有关联。所以，通过这种将她的测量结果和你的测量结果相比较的方式，她就能推断出你

的测量方式与她的是否一样，从而也就知道了你是沿着 z 轴测量，还是沿着 x 轴进行测量。这样，关于你的测量方式的信息就成功传递给它了。

可见，利用你和她之间共享的量子纠缠对，你的确有可能向她传递额外的信息。但，前提是，你们之间必须可以进行通常的经典通信，她必须先得到你用经典方式传递过来的信息，才能进一步获知你用纠缠对传递过来的信息。而经典通信肯定是无法超光速的，因此量子纠缠对也无法用来超光速地传递信息。

2.3.2 如何提取纠缠态中的信息

从现在开始，为了和量子信息的语言对接起来，假设我们利用电子的自旋态来实现量子比特，自旋向上态 $|\uparrow\rangle$ 代表 $|0\rangle$ 态，自旋向下态 $|\downarrow\rangle$ 代表 $|1\rangle$ 态。因此之前我们所讨论的两电子自旋的纠缠对 $|\phi^+\rangle$ 就可以重写成两个量子比特的纠缠对 $|\phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$ 。但是两个量子比特的希尔伯特空间是 $2 \times 2 = 4$ 维的，它应该有4个正交归一的基矢量，假设我们将 $|\phi^+\rangle$ 选作其中一个基矢量，那么其余三个基矢量可以怎么选择呢？事实上我们可以将其余三个基矢量也选作纠缠态，

$$|\phi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle \pm |11\rangle), \quad (2.119)$$

$$|\psi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle \pm |10\rangle). \quad (2.120)$$

很容易验证这4个态的确是正交归一的。为了纪念物理学家贝尔在量子纠缠上所做的开创性工作(贝尔不等式)，人们通常称这四个态所构成的两量子比特希尔伯特空间矢量基为贝尔基，有时候也称这些量子态为贝尔态。

现在，假定你和你远在天边的她是同一个导师的学生，你们的导师将两比特的重要信息(这就有四种可能性)用这四个贝尔态来编码，每种可能性对应一个贝尔态，并且导师将这个贝尔纠缠态中的第一个量子比特发给了南昌的你，而将与之纠缠的另一个量子比特发给了远在天边的她。即是说，如果你们想获知导师给出的具体是什么信息，你们就得确定共享的是四个贝尔态中的哪一个。

你们如何能确定这一点呢？由于相隔遥远，所以你们首先想到的可能就是各自独立地对手中的那个量子比特进行测量。但是，显然的是，只要你们不相互通信，那你们就不可能从这种测量中获取任何信息，因为从这四个贝尔态的表达式(2.120)可以知道，不管你们共享的是哪一个贝尔态，

你的测量将总是以 $1/2$ 的可能性得到 0 , 以 $1/2$ 的可能性得到 1 , 结果完全是随机的, 你完全无法从中得知贝尔态的任何具体信息, 当然她也一样。这是贝尔态和通常的单个量子比特量子态的根本性不同, 对于通常的量子比特, 如果你存进一比特的信息, 比如将它存为 $|0\rangle$ 态, 那你只要测量这个量子比特的值, 就一定能把这个信息读取出来。但是, 现在你导师明明存进了两个比特的信息, 但你和她只要相互保持独立不进行沟通, 就什么信息也读取不出来。也即是说, 信息是隐藏的, 是存储在你们共享的纠缠对的整体之中。

你可能会问, 那这四个贝尔态到底如何区分呢? 答案很简单, 只要同时测量算符 Z_1Z_2 和算符 X_1X_2 的值, 这里写在算符上的下标表示这个算符仅对相应的量子比特进行作用, 下标1就表示这个算符仅作用在纠缠对的第一个量子比特上, 下标2就表示这个算符仅作用在纠缠对的第2个量子比特上, Z 算符其实就是泡利算符 σ^z , 它的作用规则是 $Z|0\rangle = |0\rangle, Z|1\rangle = -|1\rangle$, X 算符其实就是泡利算符 σ^x , 它的作用规则是 $X|0\rangle = |1\rangle, X|1\rangle = |0\rangle$, 当然, 作用在不同量子比特上的算符是相互对易的。利用泡利算符的反对易关系, 人们很容易验证 Z_1Z_2 和 X_1X_2 是对易的, 因此可以有共同的本征矢量, 实际上, 贝尔基的四个量子态就是它们共同的本征矢量。从贝尔态的表达式(2.120)可以很容易验证, Z_1Z_2 的两个不同本征值可以用来区分四个贝尔态是属于 $|\phi\rangle$ 类型, 还是属于 $|\psi\rangle$ 类型, 而 X_1X_2 的本征值可以用来进一步区分它们在这两个类型中的土号。但是, 正如你已经看到的, 要完成这种区分, 就需要对纠缠对中的两个量子比特进行联合测量, 比如说, 对算符 Z_1Z_2 的值进行测量。注意, 这和你测 Z_1 , 她同时测 Z_2 有根本性的不同, 因为在联合测量中可以仅仅测得 Z_1Z_2 的值而不必同时知道 Z_1, Z_2 分别是多少。实际上, 要同时对 X_1X_2 和 Z_1Z_2 进行这种联合测量, 就必须首先将你和她分别持有的量子比特放到一起来。也即是说, 只要你们依然分别持有纠缠对中的一个量子比特, 那就无法进行这样的联合测量, 从而也就无法完整地读出导师存储的两比特信息。

当然, 你们依然可以通过交流各自的测量结果, 从而获取部分信息, 比方说, 你和她分别测量了 Z_1 和 Z_2 , 并将结果进行了比较, 由于 Z_1, Z_2 都与 Z_1Z_2 对易, 所以根据测量结果你们依然可以推断出你们共享的贝尔态是属于 $|\phi\rangle$ 类型还是 $|\psi\rangle$ 类型, 但是, 由于 Z_1, Z_2 都与 X_1X_2 反对易, 因此你们的测量必定会干扰 X_1X_2 的本征态信息, 因此你们也就不可能进一步获知被测贝尔态的土号。总之, 通过这样的方式你们只能获知两比特信息中的1比特。

2.3.3 量子密集编码

到此为止，实际上我们还没有看到量子纠缠对有什么神奇的用处。实际上，量子纠缠对能大幅度提高我们的通信能力，当然，代价是要额外消耗掉纠缠对，因此在量子信息中，人们通常将量子纠缠态看成是一种会被消耗的资源。下面就让我们来看一下这种资源的一种神奇应用。

还是假定你在南昌，你的她远在天边，假设你要发送两比特的经典信息给她，如果用经典的方式，通过经典信道进行发送，那你得占用两比特的信道。但是，如果你和她之间建立了量子信道，你就可以通过量子信道发送量子比特，并且，假定你和她在前年就分别持有了某个量子纠缠对中的一个量子比特，不妨假定这个纠缠对处在 $|\phi^+\rangle$ 态吧。如果你们有这些资源，那么你只要占用一比特的量子信道，就能完成对两比特经典信息的发送，这就是所谓的量子密集编码。

你如何做到这一点呢？首先，你们之间得事先约定好一种如何用四个贝尔态对应两比特经典信息的编码方式。其次，你注意到可以对自己所持有的量子比特进行四种不同的幺正变换，分别为恒等变换 I ，变换 Z_1 ，变换 X_1 ，以及变换 Z_1X_1 （利用泡利算符的性质，你很容易验证这四个算符的幺正性），变换的结果你也很容易算出来，

$$1|\phi^+\rangle = |\phi^+\rangle, Z_1|\phi^+\rangle = |\phi^-\rangle, X_1|\phi^+\rangle = |\psi^+\rangle, Z_1X_1|\phi^+\rangle = |\psi^-\rangle. \quad (2.121)$$

然后你再根据你们事先约定好的编码方式，将你要发送的信息对应成四个贝尔态中的某一个，并对你的量子比特进行相应的幺正变换。最后，完成了合适的幺正变换以后，你将你手中的那个量子比特通过量子信道发送给天边的她。她本来就持有纠缠对中的另一个量子比特，再接收到你的量子比特以后就拥有整个纠缠对了。为了确定这个纠缠对是四个贝尔态中的哪一个，她只需要同时进行 Z_1Z_2 和 X_1X_2 两种联合测量就可以了。再根据约定好的编码方式她就能得知你所发送的信息。这样，你们就完成了仅用1比特的量子信道就传送2比特的经典信息了。这就是量子密集编码的基本思想。注意，虽然你们前年就共同持有了这对纠缠对，但那时候的纠缠对中完全不含有你现在要发送的信息，你的信息发送的确是通过现在传送这一个量子比特完成的。

2.3.4 量子隐形传态

量子纠缠对真正神奇的地方在于，只要有足够的量子纠缠对，那么原

则上就可能做到将你超空间传送到一个遥远的星球。当然，这只是原则上，实际上这个目标对于我们来说可能永远都遥不可及。但原则上并没有什么物理定律禁止我们实现这种科幻场景。因为，今天在实验室里早就做到将一个量子比特的量子态超空间传送到非常远的地方，这就是量子隐形传态。

还是假设你在南昌，你的她远在天边，你们共同持有一对纠缠的量子比特，不妨称你持有的那个为量子比特1，她持有的那个为量子比特2，这两个量子比特处在纠缠态 $|\phi^+\rangle_{12}$ (式中我们加上了下标12，这是因为我们即将引入第3个量子比特)。现在，假设你还有另一个量子比特3，它处在某个未知的状态 $|\Psi\rangle_3 = \alpha|0\rangle_3 + \beta|1\rangle_3$ ，而你想把这第三个量子比特发送给天边的她。你当然可以通过你们之间的量子信道直接进行发送，但你发送的量子比特很有可能被别人拦截，从而带来不可预料的结果。当然，你真正要发送的其实是第三个量子比特的量子态，因为它包含了某些你想发送给她的重要未知信息。

那么你们有没有什么绝对安全的量子信息发送方法呢？有。答案就在于充分利用你们之间共享的纠缠对 $|\phi^+\rangle_{12}$ 。为了说清楚这一点，首先由贝尔态的定义式(2.120)，我们很容易得到

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi^+\rangle + |\phi^-\rangle), |11\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi^+\rangle - |\phi^-\rangle) \quad (2.122)$$

$$|01\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi^+\rangle + |\psi^-\rangle), |10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi^+\rangle - |\psi^-\rangle). \quad (2.123)$$

其次，我们注意到整个系统的量子态可以重写成

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle_3|\phi^+\rangle_{12} &= (\alpha|0\rangle_3 + \beta|1\rangle_3)\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle_{12} + |11\rangle_{12}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha|00\rangle_{31}|0\rangle_2 + \alpha|01\rangle_{31}|1\rangle_2 + \beta|10\rangle_{31}|0\rangle_2 + \beta|11\rangle_{31}|1\rangle_2] \\ &= \frac{1}{2}[(\alpha|0\rangle_2 + \beta|1\rangle_2)|\phi^+\rangle_{31} + (\alpha|0\rangle_2 - \beta|1\rangle_2)|\phi^-\rangle_{31}] \\ &\quad + \frac{1}{2}[(\alpha|1\rangle_2 + \beta|0\rangle_2)|\psi^+\rangle_{31} + (\alpha|1\rangle_2 - \beta|0\rangle_2)|\psi^-\rangle_{31}], \end{aligned} \quad (2.124)$$

式中第三个等号我们利用了公式(2.123)，并且由贝尔态的正交归一性可以知道，第三个等号右边的最终表达式中的4个态相互正交。因此，你只需要将你的第3个量子比特和你所持有的第1个量子比特放在一起，并同时对它们进行 Z_3Z_1 和 X_3X_1 的联合测量，测量的结果是，第3个量子比特和第1个量

子比特所构成的系统将会塌缩到它们相应的四个贝尔态中的某一个。然后，你再把你的测量结果用经典的方式发送给天边的她，她如果得知你的结果是 $|\phi^+\rangle_{31}$ ，那就什么也不需要做，因为从式(2.124)可以知道，这时候她的量子比特2的量子态已经变成 $\alpha|0\rangle_2 + \beta|1\rangle_2 = |\Psi\rangle_2$ 态了，如果她得知你的结果是 $|\phi^-\rangle_{31}$ ，根据(2.124)式，那她就对她的量子比特进行 Z_2 的幺正变换，由于 $Z_2(\alpha|0\rangle_2 - \beta|1\rangle_2) = (\alpha|0\rangle_2 + \beta|1\rangle_2) = |\Psi\rangle_2$ ，因此变换以后她也将得到正确的量子态，同样的，如果你的结果是 $|\psi^+\rangle_{31}$ ，那她就对自己的量子比特进行 X_2 的幺正变换，根据(2.124)式，结果也将是正确的量子态，而如果你的结果是 $|\psi^-\rangle_{31}$ ，根据(2.124)式，那她就进行 Z_2X_2 的幺正变换，同样会得到正确的量子态。总之，在得知你的测量结果以后，她总可以让自己的量子比特变成 $|\Psi\rangle_2$ 态。这样一来，你的第三个量子比特的未知量子态就成功传送给她了。

这里有几点值得进一步讨论，第一， $|\Psi\rangle$ 态的信息从来也没有在某个量子信道中进行传送！ $|\Psi\rangle$ 态的成功传送完全是超空间的，所以称之为隐形传态。第二，你告知给她的测量结果中也完全不包含 $|\Psi\rangle$ 态的信息，否则根据量子力学的基本原理，你的测量就已经对 $|\Psi\rangle$ 态造成了不可逆的扰动，那此后她也就不可能得到 $|\Psi\rangle$ 态了。同时，正因为你发送给她的测量结果中不包含任何 $|\Psi\rangle$ 态的信息，因此即使有人窃听了你们的通信，他也无法获得 $|\Psi\rangle$ 态。第三，整个过程并没有违反量子不可克隆定理，这是因为，在你进行你的测量之后，你就已经摧毁了第三个量子比特原来的态，因此天边的她后来所做的并不是把你的量子比特3的态复制一份。第四，直到获知你的测量结果之前，天边的她都还无法得到正确的 $|\Psi\rangle$ ，并且由于你的测量结果是完全随机的，因此从概率上来说，这时候她只能得到与 $|\Psi\rangle$ 不相关的态。因此，这里也没有信息的超光速传递，因为你告诉她测量结果时采用的经典通信方式当然是无法超光速的。

如果回顾我们上一节所讨论的量子密集编码和这一节讨论的量子隐形传态，人们就会发现，这两个过程的实现都需要消耗纠缠对。这两个过程无论哪一个，当它成功完成之后，原来由两个人共同持有的纠缠对就被消耗掉了，因此对于你和你远在天边的她来说，你们共享的那些纠缠对是一种稀缺资源。

2.3.5 GHZ态以及为什么爱因斯坦错了

以上我们只讨论了两个量子比特的纠缠，而且实际上我们还只讨论了

两个量子比特的那些所谓最大纠缠态，也就是我们所说的贝尔态。人们自然会想到，三个量子比特的纠缠会怎么样呢？这就是我们这一小节想要讨论的问题。当然我们讨论三个量子比特的纠缠，不是因为它有多特殊，而是因为借助于它人们可以了结量子力学发展史上的一段著名公案。

在量子力学刚刚发展起来的时候，爱因斯坦认为量子力学理论是不完备的。因为他认为一个物理量的值总是存在的，或者说任何时候任何物理量总会有一个确定的值，虽然可能因为种种原因你不能测到这个值，但它总存在，爱因斯坦所谓的“即使你没有看月亮，月亮也存在”就是这个意思，由此他指出量子力学里面物理量的值之所以不确定，之所以我们只能测得物理量取值的一个概率分布，是因为我们还缺失了一些信息，爱因斯坦称之为有一些隐变量，如果我们能进一步掌握这些缺失的信息，那量子力学将和经典力学一样，没有任何不确定性。总之，爱因斯坦认为物理量的值总是存在的，量子力学中的不确定性和概率的起源与我们日常概念中的概率起源一样，都是因为我们缺失了一些信息，因此他强烈反对玻尔和海森堡等人的不确定性和概率是世界的内在属性的观念，认为不确定性在量子力学理论中的存在只不过反映了量子力学理论的不完备性，也即是说量子力学理论没有把所有隐变量都包括进来。

那爱因斯坦的观点到底对不对呢？为此人们曾经长期争论不休，直到物理学家贝尔从爱因斯坦的观念出发推导出了著名的贝尔不等式，贝尔说，你只要用实验检验贝尔不等式是否成立，就能判定爱因斯坦到底对不对。只要爱因斯坦对，那贝尔不等式就一定成立，相反，如果玻尔和海森堡等人的观点对，那贝尔不等式就可以被破坏。后来的实验证明，爱因斯坦的确错了，不过虽然爱因斯坦错了，但是他为了否定量子力学的完备性却提出了今天非常重要的量子纠缠的概念。我们前面对量子纠缠的讨论，以及贝尔的开创性工作都是在量子纠缠的概念上进一步发展而来的。下面我们将要描述的，就是另外一个更为直接了当，比贝尔不等式更简单的可以用于判定爱因斯坦是否正确的情形。

我们要讨论的就是由物理学家Greenberg, Horne, 以及Zeilinger提出来并在实验上实现的一种特殊的三量子比特纠缠态，通常称作GHZ态。假设我们把这三个量子比特分别标记为1、2、3，那么GHZ态可以写成

$$|GHZ\rangle_{123} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|000\rangle_{123} + |111\rangle_{123}). \quad (2.125)$$

利用泡利算符的作用规则，人们很容易验证 $|GHZ\rangle_{123}$ 同时是下面三个相互

对易的算符的本征值为1的本征态，这三个算符是

$$Z_1Z_2, Z_2Z_3, X_1X_2X_3, \quad (2.126)$$

利用泡利算符的反对易性，人们很容易验证这三个算符两两对易。现在我们进一步引入泡利算符 σ^y ，在这里写作 Y ，根据泡利算符的乘法规则我们有 $ZX = iY$ 。由于 $Y_1Y_2X_3 = -Z_1X_1Z_2X_2X_3 = -(Z_1Z_2)(X_1X_2X_3)$ (式中我们已经利用了不同量子比特的算符相互对易的性质)，因此我们可以知道， $|GHZ\rangle_{123}$ 也是 $Y_1Y_2X_3$ 的本征值为-1的本征态。类似的，我们可以得到，当作用在 $|GHZ\rangle_{123}$ 上时，下面的等式必定同时成立

$$Y_1Y_2X_3 = -1, X_1Y_2Y_3 = -1, Y_1X_2Y_3 = -1, X_1X_2X_3 = 1. \quad (2.127)$$

下面，让我们来假设爱因斯坦的观点也成立，即任何情况下，每一个物理量的值总是存在，我们将三个泡利算符的值分别记作 $v(X), v(Y), v(Z)$ ，当然由于泡利算符的平方等于1，所以它们的值只能取 ± 1 。请注意，作为物理量的值， $v(X), v(Y), v(Z)$ 都是普通的数，因此它们相互之间当然都相互对易。如果 $v(X), v(Y), v(Z)$ 总是存在，虽然可能由于我们不了解隐变量，缺失了信息，导致我们不能完全确定这些取值到底是多少，但按照爱因斯坦的观点，它们总是存在的，总是有定义的。如此一来，根据(2.127)，对于 $|GHZ\rangle_{123}$ 态，我们就必定有

$$v(Y_1)v(Y_2)v(X_3) = -1, v(X_1)v(Y_2)v(Y_3) = -1, \quad (2.128)$$

$$v(Y_1)v(X_2)v(Y_3) = -1, v(X_1)v(X_2)v(X_3) = 1. \quad (2.129)$$

但是，对于普通的数来说，这些式子是自相矛盾的，因为将前三个式子乘起来并利用 $(v(Y))^2 = 1$ ，你很容易得到 $v(X_1)v(X_2)v(X_3) = -1$ ，这和第四个式子矛盾。

因此，这也就是说，要么量子力学是错的，从而(2.127)式不对，要么爱因斯坦就是错的(也就是说我们不能假定 $v(X)$ 这样的量总是存在)，两者必居其一。到底谁错了呢？实验发现，爱因斯坦错了，(2.127)式是成立的。因此，这就从实验上否定了物理量的取值必定存在的观点。也从侧面证明了为什么在量子力学中物理量只能表示成算符，因为算符的值当然只在本征态上有定义，对于叠加态，谈算符的取值是没有意义的，因为它根本就不存在。

2.3.6 多体量子纠缠

以上我们只讨论了几个最为重要的两体(两个量子比特)和三体(三个量子比特)量子纠缠态及其应用。但是读者可以想见,如果我们的系统是一个多体量子系统,比方说量子计算机的多量子比特,再比方说凝聚态物理里面的多体系统(多原子,多自旋等等),那么量子纠缠就可能出现在多体之间。可以说多体量子纠缠是整个量子计算和量子信息技术的核心,比如说,在量子信息中,人们总是通过合适的量子编码将量子信息储存在许多量子比特的纠缠态中,这时候由于量子纠缠态的整体性,即使存储信息的某些量子比特出现差错,原来的量子信息也依然能从整体的量子纠缠中得到恢复。不仅如此,近年来多体量子纠缠也被广泛应用于理论凝聚态甚至量子引力的研究。但是,如何一般性地刻画多体之间的量子纠缠现在还是一个没有完全解决的问题,凝聚态物理中常常采用所谓的张量网络来表示多体的量子纠缠态。凝聚态物理学家关心多体量子纠缠的原因在于,近些年来研究发现,有一些量子多体系统的基态其实是一个量子纠缠态,甚至可能是一个多体长程量子纠缠态,比方说分数量子霍尔效应的基态就是一个这样的长程量子纠缠态。而处在这种长程量子纠缠态的多体系统常常会有所谓的拓扑序,会处在某种拓扑相。这种长程量子纠缠和拓扑序近年来引起了理论物理学家们的极大兴趣。总之,对量子纠缠的深入研究无疑将处于整个物理学研究的核心。

2.4 补充材料：海森堡是怎么想到矩阵相乘的？

只要学习量子力学,你就知道物理量要用算符来表示,但通常的量子力学书只是直接把这作为一个基本假设而不会告诉人们为什么?在历史上,最早产生这个思想的,就是海森堡,是海森堡首先想到物理量要用一张数据表来表示,而更为革命性的是,海森堡首先想到物理量的乘法是一种矩阵乘法。当时的海森堡甚至不知道矩阵的数学概念,所以促使他想到矩阵相乘的肯定不是数学,其背后隐含的是深刻的物理新思想,我们想要讨论的就是这一思想。而矩阵和线性算符当然本质是一回事,物理量满足矩阵乘法从而也就成了线性算符。那么海森堡想到矩阵和矩阵相乘的基本思路是什么呢?理解海森堡的思路将有助于我们深入理解为什么物理量应该表示成线性厄米算符。不仅如此,它更有助于我们深入把握量子力学的基本原理。因此,在阐述完海森堡的原始思想以后,我们还会给出其原创性思

想的现代版本，并以此建立起量子力学的基本原理。

不过，这里要说一下，我们不是要还原历史，所以当然会有些贡献在历史上并非来自于海森堡或者不完全属于海森堡，有时候我们把一些结论称作是海森堡的其实只是一种简化说法，想弄清楚历史事实的读者应该去读量子力学发展史方面的专著。但这里要谈的最核心想法无疑是海森堡的，而我们想讨论的，其实也只是海森堡的原创性物理思想。在物理学史上，这样的思想常常会以各种面目出现，可谓影响深远(有时候甚至会超出量子力学的范围)。比如说，超弦的M理论有一个版本就叫做矩阵理论(所以M理论的这个M也表示Matrix)。再比如说，如果细细探究的话，人们可以在费曼的量子力学路径积分表述中察觉到海森堡思想的某种变种(当然费曼有可能是独立想到这一思想的)，其实，我们这里将要阐述的海森堡思想已经是包含费曼贡献的版本了，至于海森堡在写出他的那些矩阵相乘的时候真正想的是什么，那当然是人们不可能搞清楚的。

2.4.1 原子光谱的一些事实和玻尔的新观念

在玻尔提出他的原子模型之前，人们已经注意到原子光谱的一些惊人事实，比方说呈现出分立的谱线，这是当时的经典物理学完全解释不了的。而那时候人们还发现了原子光谱的另一个令人吃惊的规律，这个规律我们今天已经很少提到，但它对于物理学的发展也许是极其重要的，这规律就是里兹组合规则，这规则是说，人们总是可以合适地将原子光谱的每一条分立谱线都对应到一个正整数对 (m, n) ，并且会发现相应的谱线频率 ω_{mn} 满足如下这条规则，

$$\omega_{mn} = \omega_{ml} + \omega_{ln}. \quad (2.130)$$

也就是说，假设有一条谱线是 ω_{ln} ，另外还有一条谱线是 ω_{ml} ，那么这两条谱线的组合 $\omega_{ml} + \omega_{ln}$ 也必定是一条谱线，对应于整数对 (m, n) 。这一规律就是所谓的里兹组合规则。如果人们进一步定义 $\omega_{nm} = -\omega_{mn}$ ，那么就会发现里兹组合规则对于所有的正整数指标都成立。

当然，在玻尔提出它的原子模型之后，人们就已经完全理解里兹组合规则了，之所以有这样的规则成立，原因很简单，因为根据玻尔的定态跃迁假设，原子从第 m 个定态跃迁到第 n 个定态，辐射(或者吸收)的光谱频率为 $\omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar$ ，其中 E_n 就是第 n 个定态的能级，如此一来当然就有里兹组合规则了。对里兹组合规则的解释很简单，那就是核外电子从 n 态跃

迁到 m 态所放出的能量，等于它从 n 态跃迁到 l 态所放出的能量加上它从 l 态跃迁到 m 态放出的能量。问题是，给定 n 态和 m 态，里兹组合规则中的 l 态可以是任意的，里兹组合规则对 l 没有任何限制！

这就谈到了玻尔在研究原子光谱尤其是氢原子光谱问题时所引入的革命性新观念了，这就是玻尔的定态概念，以及定态跃迁概念。对于当时的海森堡来说，玻尔氢原子模型中所涉及到的核外电子轨道概念是没有道理的，因为当时的海森堡在物理学哲学上深受玻尔的影响，他们坚持物理学应该用可观测量建立起来，或者换句话说，他们认为物理学理论中所用到的量应该都是可观测的，我们这里不是要探讨这一哲学有没有道理，但是当时年轻的海森堡深信这一哲学，因此他觉得核外电子轨道的概念没有道理，因为不可观测。对于原子物理来说，可观测的是什么呢，是光谱，是谱线频率和谱线的强度。不是电子轨道，电子轨道不过是对太阳系模型的一个类比，而不是原子物理的观测事实。因此海森堡觉得关键是要研究谱线和谱线强度。

但是海森堡也知道，原子光谱的分立性就意味着，虽然核外电子轨道的概念没有道理，但是玻尔的定态和定态跃迁假设必定是对的。没有定态假设就无法解释原子稳定性的问题(因为否则原子就会不断发出电磁辐射从而掉到原子核上去)，但是光有定态假设而没有定态跃迁假设就无法解释光谱线的存在，更何况这两个假设放在一起，的确很好地解释了原子光谱的分立性。

以上也许就是导致海森堡产生他的原创性新思想的一些基本事实，以及他从玻尔那里继承的革命性新观念。当然，还有一个具体的物理学结论对于海森堡验证他的想法非常重要，那就是通过普朗克对黑体辐射公式的推导，海森堡知道，一个线性谐振子的能量是量子化的，并且量子化为 $n\hbar\omega$ 的形式， n 就是线性谐振子的第 n 个能级。海森堡当然也知道，玻尔的定态和定态跃迁概念不只是适用于氢原子，也同样适用于一个可以发出电磁辐射的线性谐振子。其实，很可能在海森堡看来，定态和定态跃迁是普适性的物理学观念。

2.4.2 海森堡的思路

前面说过，海森堡坚持原子物理应该回到可观测的量，也就是谱线频率和谱线强度。玻尔的原子模型当然对谱线频率的解释很不错，尤其是完全推导出了氢原子的所有光谱线，但是玻尔氢原子模型并没有涉及谱线的

强度。因此海森堡想推进当时的物理学，那就要研究谱线的强度，核外电子从 m 态跃迁到 n 态时所发出的这条谱线的强度当然取决于单位时间之内它从 m 态自发跃迁到 n 态的概率 A_{nm} ，而这是一个当时的物理学家已经提出来了物理量，只是当时还没有人会计算这个量，海森堡要做的，就是研究如何计算出这个量。但是这个量涉及到原子和电磁场的相互作用，而当时对电磁场的量子理论还只是知道一个光量子假设再加上爱因斯坦的受激辐射理论，对于原子和电磁场如何相互作用的量子理论还一无所知，毕竟，量子力学的正确理论还正有赖于海森堡目前正在工作的这一工作呢。因此海森堡只能转而去看经典理论是如何计算电磁波辐射的，通过经典电动力学我们知道，一个加速运动的电子会辐射电磁波，电动力学也推导出了其辐射功率为

$$P = \frac{e^2}{3\pi\epsilon_0 c^3} \ddot{\mathbf{x}}^2. \quad (2.131)$$

但是，海森堡知道这个经典公式(2.131)肯定是对的，不仅因为它的表达式中涉及到了核外电子轨道 $\mathbf{x}(t)$ 这样一个在海森堡看来无法观测的量，更重要的是，它和定态以及定态跃迁的概念是相矛盾的。当然，玻尔引入定态和定态跃迁的原因之一本就是为了避免由于(2.131)这一经典公式而导致的原子稳定性问题。因此海森堡首先要做的就是改造这个经典公式(2.131)，使得它和定态以及定态跃迁的概念相容。

根据定态跃迁假设，核外电子只在从一个定态 n 跃迁到另一个定态 m 时才辐射，注意，跃迁总是涉及到两个定态， n 和 m 。因此海森堡想到，经典意义上的 $\mathbf{x}(t)$ 是不可观测的，是没有意义的，取而代之的应该是一个类似于 $[\mathbf{x}]_{mn} e^{i\omega_{mn} t}$ 这样的涉及两个定态的量。其中海森堡将这个量对时间的依赖因子写成 $e^{i\omega_{mn} t}$ 的原因在于，通过普朗克对黑体辐射公式的推导，海森堡知道，原子定态跃迁发出电磁辐射的过程可以看成是一种简谐振动，写成指数形式而不是cos形式的原因可能是因为当时德布罗意引入物质波的时候就是这样做的，更重要的原因是，后面我们会看到，当将两个物理量相乘时，如果这两个量对时间的依赖因子是cos形式，那是不可能满足里兹组合规则的，写成指数形式则很轻易就可以满足这一点。总之，海森堡将 $[\mathbf{x}]_{mn} e^{i\omega_{mn} t}$ 代入公式(2.131)就得到

$$P(n \rightarrow m) = \frac{e^2 \omega_{mn}^4}{3\pi\epsilon_0 c^3} |[\mathbf{x}]_{mn}|^2. \quad (2.132)$$

注意，现在的这个新公式(2.132)不光用到了定态跃迁的概念，它和定态假设也是相容的，由于 $\omega_{nn} = 0$ ，因此就有 $P(n \rightarrow n) = 0$ ，这当然与

定态假设一致。经典的轨道 $\mathbf{x}(t)$ 不可观测，但是现在的 $[\mathbf{x}]_{mn}$ 是可以观测的，这是因为，从 n 态跃迁到 m 态的辐射功率等于单位时间辐射概率 A_{mn} 乘以辐射出来的光子能量 $\hbar\omega_{nm}$ ，因此由(2.132)我们就可以得到 A_{mn} 的表达式， $A_{mn} \propto |[\mathbf{x}]_{mn}|^2$ 。 A_{mn} 当然可以直接观测，因此 $[\mathbf{x}]_{mn}$ (严格来说是其模 $|[\mathbf{x}]_{mn}|$)就可以观测。不仅如此，注意到 $e^{i\omega_{nm}t} = e^{-i\omega_{mn}t} = [e^{i\omega_{mn}t}]^*$ ，海森堡还进一步规定

$$[\mathbf{x}]_{nm} = [\mathbf{x}]_{mn}^*. \quad (2.133)$$

这样一来，对应经典物理里面的位置坐标，海森堡就引入了一个新的物理量 $[\mathbf{x}]_{nm}$ 。用我们今天的话来说，这个量是一个厄米矩阵，但除非我们能论证它满足矩阵的乘法，否则我们说它是矩阵就并没有多大意义。更何况，当时的海森堡根本不知道存在矩阵这样的数学概念，对他来说 $[\mathbf{x}]_{nm}$ 不过是一张有无穷行无穷列的数据表，将位置坐标这样的概念变成一张这样的数据表，这本身就蕴含了最高的革命性。由于海森堡是在定态跃迁思想的指引下引入 $[\mathbf{x}]_{nm}$ 的，我们不妨称之为跃迁元。

当我们有了位置物理量 $[\mathbf{x}]_{mn}e^{i\omega_{mn}t}$ 以后，将它对时间求导当然就得到速度 $[\mathbf{v}]_{mn}e^{i\omega_{mn}t} = i\omega_{mn}[\mathbf{x}]_{mn}e^{i\omega_{mn}t}$ ，进而就有动量 $[\mathbf{p}]_{mn}e^{i\omega_{mn}t} = im_e\omega_{mn}[\mathbf{x}]_{mn}e^{i\omega_{mn}t}$ ，这里 m_e 表示电子质量，而且很容易验证

$$[\mathbf{p}]_{nm}^* = [\mathbf{p}]_{mn}. \quad (2.134)$$

现在，动量也变成了一张跃迁元数据表。因此在海森堡想来，一切物理量都应该变成跃迁元数据表，只有跃迁元才是可观测的。有了位置的跃迁元数据表和动量的跃迁元数据表以后，原则上应该就可以构造出其它一切物理量的跃迁元数据表。由于定态跃迁可以看成是一种谐振动，海森堡知道所有这些跃迁元应该都具有 $[A]_{mn}e^{i\omega_{mn}t}$ 这样的形式。但是这里有一个重要的问题，比方说动能 T ，它在经典物理里面是这样的 $T = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e}$ ，这里涉及到动量的平方。更一般地，假设物理量 C 等于两个物理量 A 和 B 的乘积，即 $C = AB$ 。那么根据海森堡的跃迁元思想，就需要将 C 的跃迁元 $[C]_{mn}e^{i\omega_{mn}t}$ ，用 A 的跃迁元 $[A]_{mn}e^{i\omega_{mn}t}$ 和 B 的跃迁元 $[B]_{mn}e^{i\omega_{mn}t}$ 的乘积的形式表达出来。但现在 A 和 B 的所有跃迁元都分别构成了一张无穷行无穷列的数据表，两张这样的数据表该怎么乘，就是海森堡需要解决的大难题。

正是在这里，里兹组合规则，或者等价地说玻尔的公式 $\omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar$ 给了海森堡必要的指引。由于按照定义 $[C]_{mn}e^{i\omega_{mn}t} = [AB]_{mn}e^{i\omega_{mn}t}$ ，而按照里兹组合规则， ω_{mn} 总是可以分裂成两部分的组合， $\omega_{mn} = \omega_{ml} +$

ω_{ln} , 所以海森堡想到可以令 $[AB]_{mn}e^{i\omega_{mnt}} = [A]_{ml}e^{i\omega_{mlt}}[B]_{ln}e^{i\omega_{lnt}}$, 也就是说, 应该有 $[C]_{mn} = [A]_{ml}[B]_{ln}$, 看来问题就解决了。但是海森堡最天才的地方就在这里, 他注意到里兹组合规则对中间的 l 态没有任何限制, 也就是说 l 有无穷多种可能性, 怎么对付这无穷多种可能性呢? 海森堡的处理办法很简单, 他说, 把所有的可能性都加起来! 因此海森堡给出

$$[C]_{mn} = \sum_l [A]_{ml}[B]_{ln}. \quad (2.135)$$

当然这就是我们熟悉的矩阵乘法, 但是海森堡并没有学过矩阵乘法, 对他来说, 之所以要这么乘, 是因为有无穷多种中间可能性都满足要求, 我们需要把所有的中间可能性都加起来! 今天看来, 这是一个极其原创性的想法, 因为它把握住了量子力学相干叠加的本质!

这就是为什么在量子力学里面物理量要变成线性算符的根本原因, 因为线性算符的乘法是一种矩阵乘法, 而只有矩阵乘法才蕴含着把中间的所有可能性都加起来这一量子相干叠加的本质! 当然, 今天的量子力学书通常是反过来处理这个问题的, 我们是先引入量子态的线性叠加原理, 然后再要求物理量保持这一原理, 从而只能是线性算符。但是正如我们已经阐述过的, 海森堡的革命性是双重的, 他不只是想到了要把所有中间可能性都加起来, 他更引入了跃迁元的思想(我们今天常常称之为跃迁矩阵元), 这一思想的好处就是它和观测联系很密切, 非常有物理内涵, 不像抽象的线性算符。对于所有刚开始学习量子力学的人而言, 最难以理解的事情之一无疑就是, 物理量怎么就变成算符了呢? 从量子态跃迁以及跃迁元入手无疑要好理解得多。当然, 跃迁元思想也有其不便之处, 人们最好是同时掌握几种不同的思想。

下一小节我们将采用今天的现代观点来对海森堡的这两个原创性想法进行更具一般性的阐述, 从而将之与我们通常更熟悉的量子力学原理更密切地联系起来。

但在我们进一步做这样的事情之前, 我们首先得像海森堡一样说服自己, 跃迁元和矩阵相乘这两个想法的确是Work的。海森堡是怎么说服自己的呢? 他想到首先将他的思想用到线性谐振子上。也即是说, 假设发出电磁辐射的是一个带电线性谐振子(而不是更复杂的氢原子), 一个线性谐振子从一个定态能级跃迁到另外一个定态能级从而辐射出电磁波。根据普朗克对黑体辐射公式的推导, 线性谐振子的能量应该是量子化的, 而且其量子化能级具有 $n\hbar\omega$ 这样的形式。由于线性谐振子比氢原子简单得多, 所以海森堡可以用线性谐振子的结果来检验他的新思想。结合其他人对线性谐

振子的一些研究，海森堡可以用他的新理论推导出两个重要结论：1. 一维线性谐振子的定态能级由 $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ 给出，正吻合普朗克推导普朗克公式的时候作出来的假设，而普朗克公式当然和黑体辐射的观测完全吻合，因此海森堡知道他的跃迁矩阵和矩阵乘法应该是对的。2. 通过对一维线性谐振子的研究，海森堡还导出了坐标跃迁矩阵 X 和动量跃迁矩阵 P 之间必定满足

$$[X, P] = XP - PX = i\hbar. \quad (2.136)$$

这当然是量子力学中最著名的结论之一，也是最重要的结论之一。

2.4.3 海森堡思想的现代版本

这一节我们将要给出海森堡思想的现代版本，值得说明的是，这个现代版本当然是很多物理学家工作的结果，比如，其中有一些贡献要归功于费曼，相关的阐述读者可以在费曼的经典论文《Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics》以及著作《费曼物理学讲义第三卷》和《量子力学与路径积分》中找到。

首先，在量子力学的世界，一个系统有多种可能性，我们将系统的一组可以相互确定地区分的可能性完备集记作 $\mathcal{S} = \{i, i = 1, 2, 3, \dots\}$ 。所谓可能性的完备集，我们是指，在确保能收集到这些可能性所列举的信息的同时，你不可能再额外收集到系统更多的信息，只要你采用适当的方式观测这个系统，你总会发现它一定处在这些可能性中的某一个，从某种意义上来说，这一完备集穷尽了你的观测所能收集到的所有可能性。而所谓可以确定地区分，是指你总是可以100%地将系统这些可能性中的任何两个区分开来，也就是说，每次你看到系统处于这组可能性中的某一个，那怕只看一次，你也能100%地将它和其它可能性区分开来。比方说一个束缚态的氢原子，它的所有用 n, l, m, m_s 这四个量子数标记的可能性集合就构成了这样一组可能性完备集。比方说，当我们仅关心电子自旋的时候，它的向上向下两种自旋可能性 $\{\uparrow, \downarrow\}$ 也构成了这样一组可能性完备集。当然，一个量子比特的 $\{0, 1\}$ 两种可能性也构成了这样的可确定区分可能性完备集。而 n 个量子比特的所有从 $000\dots 0$ 到 $111\dots 1$ 的 n 位二进制数也是这样的可能性完备集。但是，一个系统的可确定区分可能性完备集不是唯一的，而是有无穷多组，比方说，你只关心电子的自旋，那么 $\{\uparrow, \downarrow\}$ 两种自旋可能性是这样一个可能性完备集，但是 $\{\rightarrow, \leftarrow\}$ 同样是一个这样的可能性完备集。

在我们的海森堡思想的现代版本中，这样的一组可能性完备集就相当于海森堡原始思想中的定态。因为很显然，从现在的观点来看，对于氢原子系统，海森堡思想中的定态就是一组用 n, l, m, m_s 这四个量子数标记的不同可能性，这当然属于我们这个可能性完备集的一个例子。

仿照海森堡的跃迁元思想，我们可以说，每个物理量都应该表示成两种可能性之间的跃迁元，不过这两种可能性都必须是从一个预先选定的可确定区分可能性完备集 \mathcal{S} 中选出来的，我们可以将这两种可能性分别标示在跃迁元的左边和右边，也即是说，对于某个物理量 A ，我们可以将它的跃迁元记为 $\langle j|A|i\rangle$ ，它就相应于我们之前的记号 $[A]_{ji}$ 。

请大家暂时忘掉算符，忘掉量子态的希尔伯特空间，忘记单位算符1的分解定理，也不必把我们这里的 $|i\rangle$ 和 $\langle j|$ 看成是量子态的狄拉克记号，甚至你可以像海森堡一样不知道矩阵的概念，这些都不需要。我们下面也会避免使用诸如希尔伯特空间内积的性质之类的东西。现在的这个跃迁元记号 $\langle j|A|i\rangle$ 中的 A 就代表物理量 A 本身，左边的 j 和右边的 i 只是表示这个可能性完备集中的两种可能性，之所以把 j 放在左边，而把 i 放在右边，仅仅只是在强调这个跃迁元 $\langle j|A|i\rangle$ 代表的是，在物理量 A 的影响下系统从可能性 i 跃迁到可能性 j 所对应的跃迁元。

同样，假设另有一个物理量 B ，那么它的跃迁元就可以记为 $\langle j|B|i\rangle$ 。海森堡告诉我们，当我们把两个物理量 A 和 B 相乘得出物理量 AB 时，我们是把 B 的从可能性 i 到可能性 j 的跃迁元 $\langle j|B|i\rangle$ 乘上 A 的从可能性 j 到可能性 k 的跃迁元 $\langle k|A|j\rangle$ ，当然因为我们考虑的是 AB ，因此要把 A 的跃迁元放到左边， B 的跃迁元放到右边，进而得到 $\langle k|A|j\rangle\langle j|B|i\rangle$ ，注意， A 右边的可能性必须要和 B 左边的可能性一样，只有这样我们才可以将这两个跃迁元乘起来。可以直观地将 $\langle k|A|j\rangle\langle j|B|i\rangle$ 理解成，系统在物理量 B 的作用下先从可能性 i 跃迁到了中间可能性 j ，然后再在物理量 A 的作用下接着从可能性 j 跃迁到可能性 k ，因此总的来说 $\langle k|A|j\rangle\langle j|B|i\rangle$ 相应于系统在 AB 的联合作用下从可能性 i 到可能性 k 的一个跃迁。但它只是对 AB 的跃迁元 $\langle k|AB|i\rangle$ 的贡献之一，海森堡告诉我们，为了得到完整的跃迁元 $\langle k|AB|i\rangle$ ，我们需要把所有的中间可能性 j 都加起来，因此就有

$$\langle k|AB|i\rangle = \sum_j \langle k|A|j\rangle\langle j|B|i\rangle. \quad (2.137)$$

这就是海森堡告诉我们的一条量子力学基本原理，它有两个要点：第一，物理量要用左右两种可能性之间的跃迁元来表示，物理量相乘就是将相应

的跃迁元首尾相乘。第二，为了得到正确的联合作用物理量的跃迁元，我们需要对所有的中间可能性进行求和。这就是海森堡给出来的跃迁元概念及其乘法规则。

那么物理上可观测的是什么呢？一般来说，并不是跃迁元本身，而是跃迁元的模方。因此，由于海森堡的跃迁元乘法规则(2.137)，如果你测量的是 $|\langle k|AB|i\rangle|^2$ ，那你就会发现不同的中间可能性之间会产生干涉，因此，海森堡的对所有中间可能性进行求和，实际上就是在量子力学中处于最本质地位的量子力学的相干叠加。

另外，仔细研究海森堡的跃迁元思想及其乘法规则，你会发现，实际上跃迁元左右两边的可能性根本不必属于同一个可确定区分可能性完备集。只需要注意在相乘的时候让它们首尾相乘(即乘积前面一个跃迁元右边的可能性要和后一个跃迁元左边的可能性相对应)就可以了。比方说，我们完全可以设想有三个不同的可确定区分可能性完备集， $\mathcal{S} = \{i, i = 1, 2, 3, \dots\}$, $\mathcal{S}' = \{j', j' = 1, 2, 3, \dots\}$, 以及 $\mathcal{S}'' = \{k'', k'' = 1, 2, 3, \dots\}$ ，我们同样可以写出类似于(2.137)的跃迁元乘法规则

$$\langle k''|AB|i\rangle = \sum_{j' \in \mathcal{S}'} \langle k''|A|j'\rangle \langle j'|B|i\rangle. \quad (2.138)$$

上面这种推广虽然看起来很显然，但其实非常重要，因为它使得我们可以定义不同时刻的可确定区分可能性完备集(而不是原来的相同时刻的可确定区分可能性完备集)，比方说，我们可以让上面的 \mathcal{S} 定义在某个初始时刻 t_0 , \mathcal{S}' 定义在某个中间时刻 t_1 , 而 \mathcal{S}'' 则定义在某个末尾时刻 t_2 。相应的，我们可以设想物理量 A 和物理量 B 分别为某个实验装置，其中 B 只在初始时刻 t_0 和中间时刻 t_1 的期间起作用，而实验装置 A 只在 t_1 和 t_2 的期间起作用。这种推广以后的海森堡跃迁元乘法规则就不是在定义通常的物理量乘积，而是将不同时刻的物理量乘起来。

当然，海森堡的跃迁元乘法规则并没有包含所有的量子力学基本原理。除了还需要给出具体如何计算跃迁元的办法以外，至少还有一条重要的原理我们还没有涉及到。那就是，当海森堡说到将所有的中间可能性加起来的时候，是默认我们没有对这些中间可能性进行测量，我们不确定系统经过 B 和 A 的连续作用从 i 最后跃迁到 k'' 时中间都经过了些什么，也就是说，我们不确定在 B 起作用之后， A 起作用之前，系统到底经过的是什么中间可能性，这就是我们所谓的没有对中间可能性 j' 进行测量。如果我们在这中间，对中间可能性 j' 进行了测量，那我们定义物理量乘积 AB 的时候就不能

将所有的中间可能性都加起来了，因为我们已经知道了(假定我们的测量是完全有效的)系统都经过了什么中间可能性了。相反，这时候我们需要对每一种中间可能性 j' 分别定义一个 $(AB)_{j'}$ ，它简单地由下式给出

$$\langle k''|(AB)_{j'}|i\rangle = \langle k''|A|j'\rangle\langle j'|B|i\rangle. \quad (2.139)$$

这就是量子力学另一条最基本的原理，它说的就是，一旦我们可以确定系统经过的中间可能性具体是什么，我们就不能再把所有的中间可能性都加起来了。为了看清楚这一条原理的含义，假设我们计算跃迁元的模方测量值 $|\langle k''|(AB)_{j'}|i\rangle|^2$ ，我们就会发现，中间可能性的相干叠加消失了。事实上这时候 $|\langle k''|(AB)_{j'}|i\rangle|^2 = |\langle k''|A|j'\rangle|^2|\langle j'|B|i\rangle|^2$ 。由于我们可以对任意的物理量 A 和 B 进行这样的考察，因此我们不妨记 $B|i\rangle = |\psi\rangle$, $\langle k''|A = \langle \phi|$, 那刚才的结果就变成了 $|\langle \phi|j'\rangle|^2|\langle j'|\psi\rangle|^2$ ，这就是我们通常更熟悉的语言所谓的测量导致量子态的塌缩，这一结果就可以解释成，已知系统初末两个时刻的状态 $|\psi\rangle$ 和 $|\phi\rangle$ ，测量导致系统在中间时刻塌缩到 j' 可能性的概率。这当然是一条关于测量的量子力学基本原理。

一般来说，两个物理量相乘，结果当然是一个新的物理量。但是，有一种特别重要的物理量例外，那就是单位1，1和1相乘结果当然还是1。这也就是说，1的跃迁元乘以1的跃迁元，结果还是1的跃迁元。注意，由于跃迁元左右两边可以选择不同的可确定区分可能性完备集，所以1的跃迁元一般来说并不是平凡的。假设我们有两个不同的可能性完备集， $\mathcal{S} = \{i, i = 1, 2, 3, \dots\}$ 和 $\mathcal{S}' = \{j', j' = 1, 2, 3, \dots\}$ ，那么 $\langle j'|i\rangle = \langle j'|1|i\rangle$ 就是一个1的跃迁元。通常我们会把1的跃迁元叫做跃迁幅， $\langle j'|i\rangle$ 就是一个跃迁幅。当然，我们也可以让1的跃迁元左右两边的可能性属于同一个可能性完备集，那这时候的跃迁幅是什么呢？很显然，根据可确定区分的概念，属于同一可能性完备集的两个不同可能性之间仅在1的作用下是不可能相互跃迁的，因此即有 $\langle j|i\rangle = 0, j \neq i$ 。另外，很显然可能性 i 到其自身的跃迁幅应该为1，因此我们即有

$$\langle j|i\rangle = \delta_{ji}, \quad (2.140)$$

这就是通常人们所说的正交归一性。

由于单位1自乘结果还是1，所以跃迁幅乘以跃迁幅结果还是跃迁幅，只不过要将所有中间可能性都加起来。这就是跃迁幅特有的美妙性质，费曼的量子力学路径积分表述就是利用跃迁幅的这一美妙性质建立起来的。

我们可以在前文的公式(2.138)中将物理量A和B都取作1，从而将这一性质写成，

$$\langle k''|i\rangle = \sum_{j' \in S'} \langle k''|j'\rangle \langle j'|i\rangle. \quad (2.141)$$

另外，我们前面已经说过了，跃迁幅的模方，比如说 $|\langle j'|i\rangle|^2$ ，就是测量导致系统从可能性*i*塌缩到可能性*j'*的概率，由于所有不同的*j'*可能性都可以确定地区分并且完备，因此总概率等于1的概率守恒就要求

$$1 = \sum_{j' \in S'} |\langle j'|i\rangle|^2 = \sum_{j' \in S'} \langle j'|i\rangle^* \langle j'|i\rangle. \quad (2.142)$$

另外，利用正交归一性和(2.141)，我们又有

$$1 = \langle i|i\rangle = \sum_{j' \in S'} \langle i|j'\rangle \langle j'|i\rangle. \quad (2.143)$$

比较这两个式子我们就有

$$\langle i|j'\rangle = \langle j'|i\rangle^*, \quad (2.144)$$

这就是我们熟悉的希尔伯特空间内积的基本性质，因此终于我们知道了，跃迁幅代表的是某种希尔伯特空间内积。

现在，我们来考虑另外一个有意思的情形，即任何物理量A与单位1相乘，结果当然还是A，即 $A = A \cdot 1$ 。假设我们取两组不同的可确定区分可能性完备集 $\{i, i = 1, 2, 3, \dots\}$ 和 $\{m, m = 1, 2, 3, \dots\}$ ，那这就告诉我们

$$\langle i|A|m\rangle = \sum_j \langle i|A|j\rangle \langle j|m\rangle. \quad (2.145)$$

其中 $\langle i|A|j\rangle$ 左右两边的可能性既然是属于同一可能性完备集，那它就是通常的矩阵的矩阵元(因此这时候跃迁元的概念就变成了我们通常所说的跃迁矩阵元)。上面这个式子就告诉我们，可以把 $|m\rangle$ 看成是某个线性空间里的列矢量，其第*j*分量就是 $\langle j|m\rangle$ ，而物理量A就可以看成是线性算符，其在 $|m\rangle$ 上的作用就是线性的矩阵相乘。算符A所对应的这个矩阵的第*i*行第*j*列就是 $\langle i|A|j\rangle$ (我们有时候也记作 \hat{A}_{ij})。因此我们就可以将跃迁元的语言翻译成线性叠加的量子态和线性算符的语言。这也就是为什么我们会采用狄拉克符号这样的记号来标记跃迁元的基本原因，因为最终我们会发现跃迁元及其乘法规则和通常的量子态及线性算符，它们只不过是表述同一套量子力学原理的不同语言。