# 前言

隨著資訊科技時代的快速發展，典型的「計算機系統」，例如：個人電腦、筆記型電腦、平板電腦、智慧型手機、遊戲主機、嵌入式系統等，已成為人類現代生活中不可或缺的重要工具。不僅如此，人類對於資訊科技領域在硬體、軟體、網路、多媒體、人工智慧等方面的需求，也不斷與日俱增。概括而言，計算機系統歷經數十年的持續研發，主要的優勢在於快速的計算與資料處理能力，因此被廣泛用來解決許多科學或實際問題。

然而，隨著資訊科技時代的日新月異，無論是科學問題，或是實際問題，其中牽涉的計算複雜度也愈來愈高，使得人類對於電腦計算能力的需求與日俱增。電腦科學領域中，目前科學家已知有許多計算問題，若是使用傳統電腦，甚至是超級電腦，都無法在有限的時間內解決。量子電腦的出現，主要是基於量子力學，在計算效能上具有優於傳統電腦的潛力，因此將可能用來解決傳統電腦無法解決的計算問題。

筆者在一次偶然的機會，認識台大量子電腦中心主任張慶瑞教授，並邀請張教授至本系演講。張慶瑞教授與其指導的研究團隊，對於量子電腦與量子計算領域的教學、研究、應用與推廣等方面不遺餘力。筆者在多次接觸這個課題後，逐漸產生濃厚的興趣。

考慮國內量子電腦或量子計算相關的教材仍然相當欠缺，因此萌生編寫本書的動機，目的是期望能提供具體的教材，同時帶動國內學術界或產業界的研發人才培育工作，除了建立量子電腦與量子計算領域的基礎概念之外，並發展本領域的實際應用。

碁峰 www.gotop.com.tw

本書適用於資優高中生，或是資訊、電機、電子、工工、物理、應數、化工、生科等相關科系的大專學生。本書也適用於產業界的研發工程師、資訊工程師、軟體工程師、資料科學家、大數據分析師、人工智慧工程師、化學工程師、生物醫學工程師、金融分析師等，或是對於量子電腦與量子計算領域具有興趣的創客玩家等。

本書採用主題介紹方式，強調循序漸進、深入淺出。除了介紹量子電腦與量子計算的理論基礎之外，同時搭配 IBM Q Experience 的實作過程，強調理論與實務的緊密結合，實現「做中學」的學習理念，期望協助您快速入門，探討量子電腦與量子計算領域的概貌。本書採用 Python 程式語言，若您具備 Python 程式設計的經驗，將更容易上手。

筆者為電機 / 電子背景，目前任教於資訊工程系，開授的資訊專業課程以「工程數學」(Engineering Mathematics) 與「演算法分析」(Algorithm Analysis) 為主，授課經驗超過 16 年。工程數學課程的討論範疇，主要是以「工程上使用的數學」為主，例如：微分方程式、微分方程式系統、拉普拉斯轉換、傅立葉轉換等。演算法分析課程的討論範疇，包含：具有代表性的演算法、演算法的設計策略、時間複雜度分析等。以電腦科學領域而言，目前仍然存在許多傳統電腦無法在有限時間內解決的問題，例如：「NP 完備問題」(NP-Complete Problems) 等。

近年來，由於量子電腦的快速發展，結合量子力學的物理特性，例如：疊加態、糾纏態、可逆計算等，同時佐以量子計算與量子演算法的學術研究，具備優於傳統電腦的計算能力。雖然這個領域目前仍處於萌芽階段，相信未來將可針對複雜的計算問題，或是最佳化問題，提供可能的解決方案與無限契機。

隨著第二次量子革命時代的來臨，量子科技領域，例如：量子電腦、量子計算、量子演算法、量子通訊、量子金融、量子人工智慧等，目前已成為世界強權國家，包含：美國、中國、歐盟、日本等所重視的研究領域，紛紛投注大量的研究人力與資源，期望在量子科技競賽中取得國際領先地位。最近有科學家指出：「量子電腦是未來資訊科技時代的核子武器」，其重要性可見一斑。

碁峰 www.gotop.com.tw

量子電腦與量子計算領域中，「量子霸權」(Quantum Supermacy) 是指：「展示可程式化的量子計算設備，能夠解決傳統電腦在有限時間內無法解決的問題。」近年來，美國 IBM、Google 等知名的電腦產業，陸續推出量子電腦，宣稱將掌握「量子霸權」。量子電腦的科技競賽，其實已經揭開序幕。

台灣半導體產業以台積電為首，所構成的上下游產業鏈，目前已經成為國際上相當具有競爭力的產業結構，不僅是台灣重要的經濟命脈，同時也是台灣堅實的國防，形成所謂的「矽屏障」。然而，聯電前董座曾經警告，台灣在量子電腦的投資，連中國的 1% 都不到，成為不容忽視的「國安級隱憂」。

反觀中國在量子科技領域的發展，例如：阿里巴巴集團、華為等大型企業，近年來不斷投注大量的研究人力與資源，發展先進的量子技術，例如：量子電腦、量子通訊等。以量子通訊而言，中國甚至具備超越美國的實力。因此，以量子科技領域而言，台灣在國際上扮演的角色定位與未來發展，其所牽涉的經濟體系，以至於國防等層面，確實是一項值得深思的議題。

本書經過多次校對，但人非聖賢，若有謬誤或疏漏之處，敬請學者先進不吝賜教與指正。

最後，不知道您是否準備好了嗎？邀請您懷著快樂與期待的心情，讓我們開始量子電腦與量子計算領域的奇妙旅程吧！

## 致謝

感謝參與本書編輯與校閱工作的碁峰編輯部同仁，使得本書在內容與編排上更加嚴謹且完善。

張元翔 謹識

中原大學資訊工程系

碁峯 www.gotop.com.tw

# 05

# 量子計算

本章介紹**量子計算** (Quantum Computing)，將先討論量子力學 (量子計算) 的數學基礎，包含：Bra-Ket 表示法、希爾伯特空間、布洛赫球面、量子位元、張量運算、么正矩陣等。接著，介紹量子邏輯閘、量子邏輯閘的串並聯、量子疊加態與糾纏態、高階量子邏輯閘、等效量子邏輯閘、量子邏輯閘的數位邏輯運算等課題。最後，針對量子計算的特性以比喻說明之，並介紹量子計算的過程。

**學習單元**

- 基本概念
- Bra-Ket 表示法
- 希爾伯特空間
- 布洛赫球面
- 量子位元
- 張量運算
- 么正矩陣
- 量子邏輯閘
- 量子邏輯閘的串並聯
- 量子疊加態
- 量子糾纏態
- 高階量子邏輯閘
- 等效量子邏輯閘
- 量子邏輯閘的數位邏輯運算
- 量子計算的比喻
- 量子計算的過程

碁峰
www.gotop.com.tw

# 5.1 基本概念

**量子計算** (Quantum Computing) 是**量子資訊** (Quantum Information) 的子領域，目的是運用量子力學的物理特性，例如：疊加態、糾纏態等，進行計算工作，藉以解決複雜的問題。傳統電腦是基於 0 與 1 的數位邏輯，基本的處理單位稱為**位元** (Bit)；量子電腦則是基於量子邏輯，基本的處理單位稱為**量子位元** (Quantum Bit, Qubit)。量子計算是一種可逆計算，因此在能量消耗方面，也比傳統計算來得低。

量子計算可以分成兩大類，分別稱為**類比** (Analog) 與**數位** (Digital)。類比的量子計算包含：**量子模擬** (Quantum Simulation)、**量子退火** (Quantum Annealing)、**絕熱量子計算** (Adiabatic Quantum Computation) 等。數位的量子計算，包含：**數位退火** (Digital Annealing)、**量子邏輯閘** (Quantum Logic Gate) 等。在此，我們是以量子邏輯閘構成的**量子電路** (Quantum Circuit) 為主要的討論範疇。

量子計算的應用範圍相當廣泛且多元，例如：科學發展的突破、新穎材料與藥品的研製、人工智慧技術的發展與應用、金融科技的投資組合與管理、最佳化問題、生產管理排程、交通路徑規劃等，都可以透過量子計算領域的持續研發，提供可能的解決方案與無限契機，成為第二次量子革命一項重要的核心技術 [1]。

本章介紹**量子計算** (Quantum Computing)，將先討論量子力學 (量子計算) 的數學基礎，包含：Bra-Ket 表示法、希爾伯特空間、布洛赫球面、量子位元、張量運算、么正矩陣等。接著，介紹量子邏輯閘、量子邏輯閘的串並聯、量子疊加態與糾纏態、高階量子邏輯閘、等效量子邏輯閘、量子邏輯閘的數位邏輯運算等課題。最後，針對量子計算的特性以比喻說明之，並介紹量子計算的過程。

---

[1] 以量子電腦的硬體技術層面而言。例如：**量子晶片** (Quantum Chip) 等，台灣確實已經處於落後的局面。然而，以量子電腦的軟體技術層面而言，例如：**量子資訊** (Quantum Information)、**量子計算** (Quantum Computing)、**量子演算法** (Quantum Algorithms) 等，台灣的學者專家仍然有很大的發展空間。

碁峯 www.gotop.com.tw

## 5.2 Bra-Ket 表示法

**Bra-Ket 表示法** (Bra-Ket Notation) 是由**保羅．狄拉克** (Paul Dirac) 所提出，因此也稱為**狄拉克表示法** (Dirac Notation)。

狄拉克

**保羅．狄拉克** (Paul Dirac) 是英國理論物理學家，同時是量子力學的奠基者之一。狄拉克在物理學上有許多開創性的貢獻，並發展出量子力學的基礎數學架構。1933 年，狄拉克與薛丁格因為「發現原子理論中很有用的形式」，即量子力學的基本方程式：**狄拉克方程式**與**薛丁格方程式**，共同獲得諾貝爾物理學獎。

Bra-Ket 表示法是一種**複數希爾伯特空間** (Complex Hilbert Space) 的向量表示法，適合用來表示量子狀態。Bra-Ket 其實是英文 Bracket 拆字的結果，其中 Bracket 是「括號」的意思，數學符號為 < > 。

**定義：Ket**

**Ket** 可以定義為希爾伯特空間 $\mathcal{H}$ 的向量，表示成：

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$$

其中 $a_1, a_2, \cdots, a_n \in \mathbb{C}$，$n$ 稱為**維度** (Dimension)。

Ket 是一個**行向量** (Column Vector)，也可以表示成 $|a\rangle = (a_1, a_2, \cdots, a_n)^T$ ，其中向量的元素 $a_1, a_2, \cdots, a_n$ 可以是實數，也可以是複數，因此可以用來表示許多不同的量子狀態。換言之，複數希爾伯特空間中，$|a\rangle$ 是一個 $n$ 維的複數向量，因此也可以表示成 $|a\rangle \in \mathbb{C}^n$ 。

碁峰 www.gotop.com.tw

由於 Ket 表示法中包含一個右括號，因此也經常稱為**右向量**[2]。此外，Ket 表示法中的 $a$，可以是數字、英文字母或數學符號，例如：$|0\rangle$、$|1\rangle$、$|a\rangle$、$|b\rangle$、$|\psi\rangle$、$|\phi\rangle$ 等。

以下是典型的 Ket 範例：

$$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}、\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}、\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}、\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\i\end{pmatrix}、\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix}、\begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix} 等$$

**定義：Bra**

Bra 可以定義為希爾伯特空間 $\mathcal{H}$ 的向量，表示成：

$$\langle a| = \left(a_1^*, a_2^*, \cdots, a_n^*\right)$$

其中 $a_1, a_2, \cdots, a_n \in \mathbb{C}$，星號 * 代表共軛複數。

Bra 稱為 Ket 的**伴隨向量** (Co-Vector)。由於 Bra 表示法中包含一個左括號，因此也經常稱為**左向量**[3]。請注意，Ket 為行向量，Bra 為列向量。兩者的關係可以表示成：

$$|a\rangle^\dagger = \langle a| \text{ 或 } \langle a|^\dagger = |a\rangle$$

其中，符號 † 稱為**共軛轉置** (Conjugate Transpose)，或稱為**厄米特共軛** (Hermitian Conjugate)[4]。因此，Bra 與 Ket 的關係也可以表示如下：

---

2 中國相關書籍有時將 Ket 翻譯為右矢，因此也有右箭頭的意義。以數學符號而言，確實是蠻貼切的。

3 中國相關書籍有時將 Bra 翻譯為左矢，因此也有左箭頭的意義。

4 數學符號†的英文是 Dagger，中文翻譯為「匕首」。數學符號的形狀就如同一把「匕首」。數學領域中，†通常用來表示**伴隨運算子** (Adjoint Operator)。概念上，如同作戰時除了主要的武器 (槍枝) 之外，還要準備一把匕首，以備不時之需。

碁峯 www.gotop.com.tw

$$|a\rangle^\dagger = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}^\dagger = \left(a_1^*, a_2^*, \cdots, a_n^*\right) = \langle a|$$

或

$$\langle a|^\dagger = \left(a_1^*, a_2^*, \cdots, a_n^*\right)^\dagger = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = |a\rangle$$

以下是典型的 Bra 範例 (分別對應上述的 Ket 範例)：

$$(1,0)\ 、\ (0,1)\ 、\ \frac{1}{\sqrt{2}}(1,1)\ 、\ \frac{1}{\sqrt{2}}(1,-i)\ 、\ (1,0,0,0)\ 、\ (0,1,0,0)\ \text{等}$$

其中，請特別注意：

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,-i)$$

**定義：範數**

給定 Ket $|a\rangle$，則**範數** (Norm) 可以定義為：

$$\|\,|a\rangle\,\| = \sqrt{a_1^* a_1 + a_2^* a_2 + \cdots + a_n^* a_n}$$

其中，* 代表共軛複數。

Ket 的**範數** (Norm) 與線性代數討論的**範數** (Norm)，概念上是相通的，用來表示 Ket 的**模數** (Modulus)、**大小**或**強度** (Magnitude)。

碁峰 www.gotop.com.tw

Ket 的**範數** (Norm)，若取其平方，則可以表示成：

$$\langle a \mid a \rangle = \lvert a \rangle^{\dagger} \lvert a \rangle = (a_1^*, a_2^*, \cdots, a_n^*) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = a_1^* a_1 + a_2^* a_2 + \cdots + a_n^* a_n$$

因此，Ket 的範數 (Norm) 也可以表示成 $\sqrt{\langle a \mid a \rangle}$。

**定義：內積**

給定 Ket $\lvert a \rangle$ **與** $\lvert b \rangle$，則向量的**內積** (Inner Product) 可以定義為：

$$\langle a \mid b \rangle = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \cdots + a_n^* b_n$$

其中，* 代表共軛複數。

內積也稱為**點積** (Dot Product) 或**純量積** (Scalar Product)，結果是一個純量。內積也可以表示成：

$$\langle a \mid b \rangle = \lvert a \rangle^{\dagger} \lvert b \rangle = (a_1^*, a_2^*, \cdots, a_n^*) \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \cdots + a_n^* b_n$$

**範例**

**給定 Ket** $\lvert a \rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ **、** $\lvert b \rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ **，求內積** $\langle a \mid b \rangle$

**解**

$$\langle a \mid b \rangle = \lvert a \rangle^{\dagger} \lvert b \rangle = (1, 0)^* \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1$$

❑

碁峯 www.gotop.com.tw

**範例**

給定 Ket $|a\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 、$|b\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix}$ ，**求內積** $\langle a \mid b \rangle$

**解**

$$\langle a \mid b \rangle = |a\rangle^{\dagger} |b\rangle = (1, 0)^{*} \begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix} = 0$$

❑

內積具有下列性質：

- $\langle a \mid a \rangle \geq 0$
- $\langle a \mid a \rangle = 0$ 若且唯若 $|a\rangle = 0$ [5]
- $\langle a \mid b \rangle = \langle b \mid a \rangle^{*}$

**定義：外積**

給定 Ket $|a\rangle$ **與** $|b\rangle$，則 Ket 的**外積** (Outer Product) 可以定義為：

$$|a\rangle\langle b| = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \left( b_1^{*}, b_2^{*}, \cdots, b_n^{*} \right) = \begin{pmatrix} a_1 b_1^{*} & a_1 b_2^{*} & \cdots & a_1 b_n^{*} \\ a_2 b_1^{*} & a_2 b_2^{*} & \cdots & a_2 b_n^{*} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_n b_1^{*} & a_n b_2^{*} & \cdots & a_n b_n^{*} \end{pmatrix}$$

因此，外積是使用乘法運算而得，結果是一個矩陣。若 $|a\rangle$ **與** $|b\rangle$ 均為 $n \times 1$ 向量，則外積的結果為 $n \times n$ 矩陣。

5 數學與邏輯學中，**若且唯若** (if and only if) 是常見的敘述。給定邏輯敘述「$p$ 若且唯若 $q$」，表示「若 $p$ 則 $q$」成立，而且「若 $q$ 則 $p$」也成立。

碁峰 www.gotop.com.tw

**範例**

給定 Ket $|a\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 、$|b\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ，求外積 $|a\rangle\langle b|$

**解**

$$|a\rangle\langle b| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}(1,0)^* = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}(1,0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

❑

**範例**

給定 Ket $|a\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 、$|b\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix}$ ，求外積 $|a\rangle\langle b|$

**解**

$$|a\rangle\langle b| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}(0,i)^* = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}(0,-i) = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

❑

基本上，Bra-Ket 表示法與線性代數討論的向量，概念上其實是相通的。然而，線性代數討論的向量，通常僅限於實數運算；量子計算 (或量子力學) 的理論基礎，則經常牽涉複數運算，因此請勿混淆。

## 5.3 希爾伯特空間

物理學家發現，量子力學的理論基礎與數學家討論的向量抽象概念，具有密切的關聯性。數學領域中，**希爾伯特空間** (Hilbert Space) 是完備的內積空間，也可以說是帶有內積的完備向量空間。希爾伯特空間是歐幾里得空間的延伸，不再侷限於實數，但又不失完備性。

碁峯 www.gotop.com.tw

**定義：希爾伯特空間**

**希爾伯特空間** (Hilbert Space)，表示為 $\mathcal{H}$，可以根據**向量加法**與**純量乘法**定義之。

給定向量 $|u\rangle$、$|v\rangle$、$|w\rangle$ 與純量 $\alpha$、$\beta$，則希爾伯特空間 $\mathcal{H}$ 滿足下列性質：

**向量加法公理：**

- **封閉性：**若 $|u\rangle, |v\rangle \in \mathcal{H}$，則 $|u\rangle + |v\rangle \in \mathcal{H}$
- **交換率：**$|u\rangle + |v\rangle = |v\rangle + |u\rangle$
- **結合率：**$(|u\rangle + |v\rangle) + |w\rangle = |u\rangle + (|v\rangle + |w\rangle)$
- 存在**零向量** 0，使得 $|u\rangle + 0 = |u\rangle$
- 存在**反向量** $-|u\rangle$，使得 $|u\rangle + (-|u\rangle) = 0$

**純量乘法公理：**

- **封閉性：**若 $\alpha$ 為任意純量且 $|u\rangle \in \mathcal{H}$，則 $\alpha|u\rangle \in \mathcal{H}$
- **分配率：**$\alpha(|u\rangle + |v\rangle) = \alpha|u\rangle + \alpha|v\rangle$
- **純量分配率：**$(\alpha + \beta)|u\rangle = \alpha|u\rangle + \beta|u\rangle$
- **純量結合率：**$\alpha(\beta|u\rangle) = (\alpha\beta)|u\rangle$

量子力學討論的希爾伯特空間 $\mathcal{H}$ 為複數向量空間。若與線性代數討論的實數向量空間 $\boldsymbol{V}$ 相比較，其中有許多性質是相通的。在此，為求數學理論的完整性詳細列出，您不必刻意記憶這些公理。

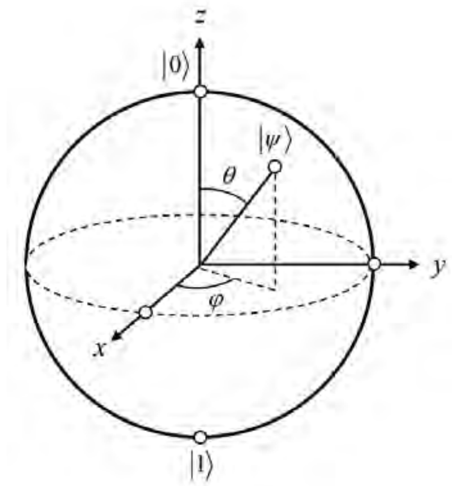
## 5.4 布洛赫球面

**定義：布洛赫球面**

量子力學中，**布洛赫球面** (Bloch Sphere) 是一種雙態量子系統中，純態空間的幾何表示法。

碁峯 www.gotop.com.tw

**布洛赫球面** (Bloch Sphere) 是根據瑞士物理學家**費利克斯．布洛赫** (Felix Bloch) 的姓氏命名，如圖 5-1。量子力學在討論量子狀態時，布洛赫球面是經常被應用的一種幾何表示法。




▲ 圖 5-1　布洛赫球面

布洛赫球面的北極與南極，分別表示成 $|0\rangle$ 與 $|1\rangle$，是最基本的量子狀態。這兩種量子狀態也可以使用希爾伯特空間的向量表示成：

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

構成標準的**正交基底** (Orthogonal Basis) 或**正交規範基底** (Orthonormal Basis) [6]。

布洛赫球面上的量子狀態 ，可以表示成：

$$|\psi\rangle=\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle$$

其中，$\alpha$、$\beta \in \mathbb{C}$，且滿足下列條件：

$$|\alpha|^2+|\beta|^2=1$$

因此，量子狀態可以表示成落在布洛赫球面上的一點，與球心的距離為 1。換言之，洛赫球面上任意的量子狀態 $|\psi\rangle$，都可以表示成 $|0\rangle$ 與 $|1\rangle$ 的**線性組合** (Linear

6　請注意，量子狀態向量 $|0\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，與線性代數討論的零向量 $\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}$ 並不相同，請勿混淆。

碁峰 www.gotop.com.tw

Combination)，其中 $\alpha$、$\beta$ 為複數係數。

布洛赫球面上的量子狀態，也可以表示成：

$$|\psi\rangle = \cos(\theta/2)|0\rangle + e^{i\phi}\sin(\theta/2)|1\rangle$$

其中，

$$\alpha = \cos(\theta/2) \text{ 、 } \beta = e^{i\phi}\sin(\theta/2)$$

$$0 \le \theta \le \pi,\ 0 \le \phi < 2\pi$$

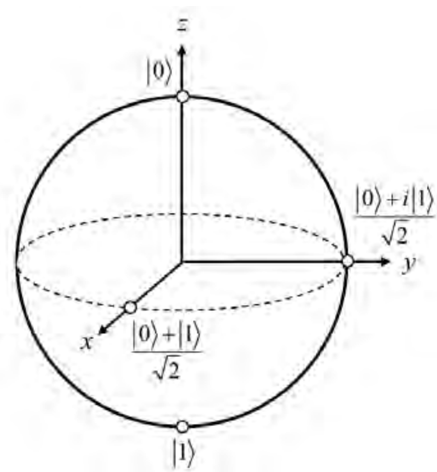
且 $i$ 為虛數單位，$i = \sqrt{-1}$ 或 $i^2 = -1$。

布洛赫球面在 $x$、$y$、$z$ 軸方向的量子狀態，如圖 5-2，分別表示成：

$x$ 軸：$\dfrac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$

$y$ 軸：$\dfrac{|0\rangle + i|1\rangle}{\sqrt{2}} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \dfrac{i}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\i\end{pmatrix}$

$z$ 軸：$|0\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$




▲ 圖 5-2　布洛赫球面在 $x$、$y$、$z$ 軸的狀態向量

碁峯 www.gotop.com.tw

除了標準的正交基底 $|0\rangle$ 與 $|1\rangle$ 之外，在此介紹另外兩組正交基底。典型的正交基底，稱為**加** (Plus) 與**減** (Minus) 基底，表示如下：

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

$$|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$$

落在布洛赫球面 $x$ 軸的兩邊。

另一組典型的正交基底，稱為**順時針** (Clockwise) 與**逆時針** (Counter-clockwise) 基底，表示如下：

$$|\circlearrowright\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + i|1\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\i\end{pmatrix}$$

$$|\circlearrowleft\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle - i|1\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-i\end{pmatrix}$$

落在布洛赫球面 $y$ 軸的兩邊。

## 5.5 量子位元

**定義：量子位元**

**量子位元** (Quantum Bit)，簡稱 **Q 位元** (Qubit)，是量子資訊或量子計算的基本計量單位。

以傳統電腦而言，一個位元在同一時間，只能是 0 或 1。換言之，每個位元在同一時間，不是 0 就是 1，不是 1 就是 0，只能存在一種**數位邏輯** (Digital Logic) 狀態。以量子電腦而言，量子具有**疊加態** (Superposition) 的物理性質；因此，量子位元容許 0 與 1 同時存在，稱為**量子邏輯** (Quantum Logic) 狀態。

碁峰 www.gotop.com.tw

### 5.5.1 量子狀態與量子測量

以單一的量子位元而言，量子狀態可以表示成：

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

其中，$\alpha, \beta \in \mathbb{C}$，是量子狀態的兩個複數係數，且滿足下列條件：

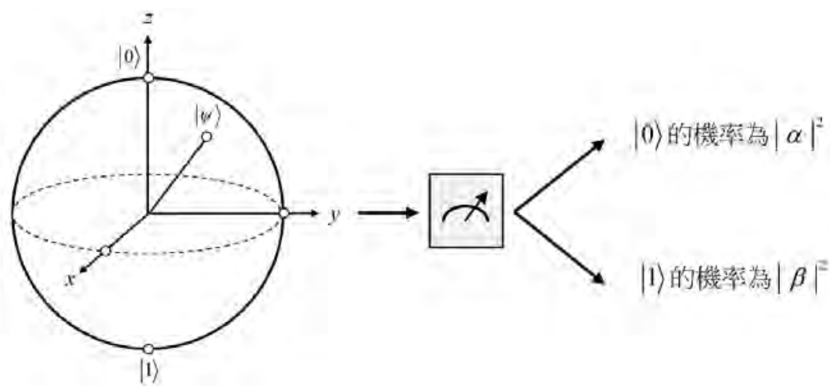
$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

因此，與傳統電腦位元的「非 0 即 1」的狀態不同，量子位元容許「又 0 又 1」的疊加態，其中包含無限多種 $(\alpha, \beta)$ 的可能組合。這個物理性質使得量子電腦在解決某些計算問題時，具有優於傳統電腦的計算能力，甚至是完成傳統電腦無法做到的工作。

當進行**量子測量** (Quantum Measurement) 時，將會造成量子狀態的**崩潰** (Collapse)，形成 $|0\rangle$ 或 $|1\rangle$ 兩種基本的量子狀態，而且會根據特定的機率出現，分別如下：

$$\begin{cases} |0\rangle \text{ 的機率為 } |\alpha|^2 \\ |1\rangle \text{ 的機率為 } |\beta|^2 \end{cases}$$

其中，總機率為 1 (或 100%)。若以布洛赫球面的量子狀態 $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ 而言，經過量子測量後，結果如圖 5-3。




▲ 圖 5-3　量子測量

碁峰 www.gotop.com.tw

由於量子測量的方式會直接影響測量後的結果，因此若未特別說明，通常是指 **z 測量** (z Measurement)，意指在布洛赫球面上以 z 軸的方向進行量子測量，進而產生的測量結果。

範例

**給定量子疊加態為：**

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

**求量子測量的結果**

解

$$|+\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$$

因此，$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}$ 、 $\beta = \frac{1}{\sqrt{2}}$

若進行量子測量，將會造成量子狀態的崩潰，形成 $|0\rangle$ 或 $|1\rangle$ 兩種

基本的量子狀態，而且會根據特定的機率出現：

$$\begin{cases} |0\rangle \text{ 的機率為} \left| 1/\sqrt{2} \right|^2 = 1/2 \text{ (或 50\%)} \\ |1\rangle \text{ 的機率為} \left| 1/\sqrt{2} \right|^2 = 1/2 \text{ (或 50\%)} \end{cases}$$

❑

進一步說明，若量子狀態處於北半球面，則量子狀態崩潰為 $|0\rangle$ 的機率較高；若量子狀態處於南半球面，則量子狀態崩潰為 $|1\rangle$ 的機率較高。相對而言，若量子狀態處於赤道，則崩潰為 $|0\rangle$ 或 $|1\rangle$ 的機率相等，皆為 50%。

## 5.5.2 標準表示法

量子力學中，量子狀態可以表示成標準**正交規範基底** (Orthonormal Basis) 的線性組合 (或線性疊加)。在此，標準正交規範基底的表示法，或稱為**標準表示法**

碁峰 www.gotop.com.tw

(Standard Representations)，可以使用 Bra-Ket 表示法或希爾伯特空間的向量表示法表示之。

以 $n$ 量子位元的基底而言，**標準表示法**的定義如下：

- **單量子位元** ($n$ = 1)

  Bra-Ket 表示法 (二進制)：$|0\rangle$、$|1\rangle$

  Bra-Ket 表示法 (十進制)：$|0\rangle$、$|1\rangle$

  希爾伯特空間的向量表示法：

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{、} |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

- **雙量子位元** ($n$ = 2)

  Bra-Ket 表示法 (二進制)：$|00\rangle$、$|01\rangle$、$|10\rangle$、$|11\rangle$

  Bra-Ket 表示法 (十進制)：$|0\rangle$、$|1\rangle$、$|2\rangle$、$|3\rangle$

  希爾伯特空間的向量表示法：

$$|00\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \text{、} |01\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \text{、} |10\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{、} |11\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

- ***n* 量子位元**

  Bra-Ket 表示法 (二進制)：$|00\cdots00\rangle$、$|00\cdots01\rangle$、$|00\cdots10\rangle$、...、$|11\cdots11\rangle$

  Bra-Ket 表示法 (十進制)：$|0\rangle$、$|1\rangle$、$|2\rangle$、$|3\rangle$、...、$|2^n - 1\rangle$

  希爾伯特空間的向量表示法：

$$|00\cdots00\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \text{、} |00\cdots01\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \text{、} |00\cdots10\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \text{、...、} |11\cdots11\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$$

碁峰 www.gotop.com.tw

簡言之，$n$ 量子位元的量子狀態，不僅可以使用 Bra-Ket 表示法，也可以使用 $2^n$ 維的希爾伯特空間向量表示法。然而，若 $n$ 較大時，通常是以 Bra-Ket 表示法為主，避免使用希爾伯特空間的向量表示法。有時甚至是使用十進制的 Bra-Ket 表示法，相對較為簡潔。

## 5.5.3 密度矩陣

**定義：密度矩陣**

量子力學中，**密度矩陣** (Density Matrix) 是量子狀態的一種表示法，根據希爾伯特空間向量的外積計算而得。

根據外積的定義，則：

$$|0\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \text{、} |0\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \text{、} |1\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \text{、} |1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

以常見的量子狀態為例，則**密度矩陣** (Density Matrix) 分別為：

$|0\rangle$ 的**密度矩陣**為：$|0\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}(1, 0)^* = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$

$|1\rangle$ 的**密度矩陣**為：$|1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}(0, 1)^* = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

$|+\rangle$ 的**密度矩陣**為：$|+\rangle\langle +| = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}(1 \quad 1)^* = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$

$|-\rangle$ 的**密度矩陣**為：$|-\rangle\langle -| = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}(1 \quad -1)^* = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$

以 $n$ 量子位元而言，希爾伯特空間向量的維度為 $2^n \times 1$，因此密度矩陣的維度為 $2^n \times 2^n$。例如，當 $n = 3$ 時，則密度矩陣的維度為 $8 \times 8$。

碁峰 www.gotop.com.tw