

## 单量子比特门

量子门需要满足的限制--么正性（变换前后概率守恒），Bloch球上的一点变换到球上的另一点，只要变换前后态都在球面上，那么变换就是么正的。

令人惊讶的是除此之外没有其它限制

### Pauli矩阵

从三个特殊的量子门开始(Z表象下的Pauli矩阵):

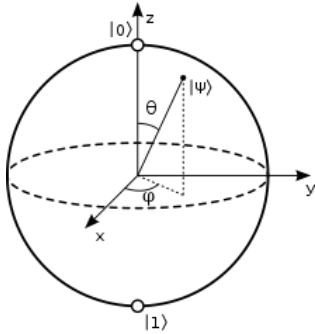
$$X \equiv \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, Y \equiv \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, Z \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

让我们再次强调下之前关于自旋和Bloch球的讨论

任意一个量子态

$$|\psi\rangle = \left( \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle \right)$$

可以——对应Bloch球面上的一点



在z方向上，向上和向下的本征态分别记为：

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

可以看出他是Pauli矩阵Z的本征态，对应本征值分别为1, -1（实际上Pauli矩阵是通过要求这样的本征值求出来的，这里我们可以不做推导先看结构，有兴趣的可以自己去推到Pauli矩阵）。

这时，x方向的向上和向下（Bloch球中）在Z表象下为：

$$|0\rangle_x = \cos \frac{\pi}{4} |0\rangle + e^{i0} \sin \frac{\pi}{4} |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$|1\rangle_x = \cos \left( -\frac{\pi}{4} \right) |0\rangle + e^{i0} \sin \left( -\frac{\pi}{4} \right) |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

同理y方向有：

$$|0\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix}, |1\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix}$$

他们恰好是Pauli矩阵X和Y的本征态。

让我们再次重申一下这里的物理意义：

上一次说过力学量对应相应的厄米算符，这里X, Y, Z三个矩阵（z表象下）分别对应x, y, z三个方向上的自旋物理量，它们的本征态明显对应Bloch上x, y, z三个方向上的单位矢量，如上，由于除了么正性之外我们对量子门没有更多的要求，所以X, Y, Z三个矩阵我们也可以视为量子门。

接下来我们考虑如下的旋转算符：

$$R_x(\theta) \equiv e^{-i\theta X/2} = \cos \frac{\theta}{2} I - i \sin \frac{\theta}{2} X = \begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -i \sin \frac{\theta}{2} \\ -i \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{bmatrix}$$

$$R_y(\theta) \equiv e^{-i\theta Y/2} = \cos \frac{\theta}{2} I - i \sin \frac{\theta}{2} Y = \begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -\sin \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{bmatrix}$$

$$R_z(\theta) \equiv e^{-i\theta Z/2} = \cos \frac{\theta}{2} I - i \sin \frac{\theta}{2} Z = \begin{bmatrix} e^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2} \end{bmatrix}$$

其中第二个等号用到了X, Y, Z的平方等于单位阵, 展开即可得到, 这三个算符作用在一个态上表示这个态沿着x, y, z三个轴旋转 $\theta$ 角度。例如Z:  
Z作用在任意一个量子态下为:

$$R_z(\theta)|\psi\rangle = e^{-i\theta Z/2}(a|0\rangle_z + b|1\rangle_z)$$

注意等号右边是用Z的本征态分解

$$= e^{-i\theta/2}a|0\rangle_z + e^{i\theta/2}b|1\rangle_z$$

$$= e^{-i\theta/2} (a|0\rangle_z + e^{i\theta}b|1\rangle_z)$$

可以看出相对相位增加了 $\theta$ 即旋转了 $\theta$ 角度。 $R_x(\theta)$ 和 $R_y(\theta)$ 同理, 按照X, Y的本征态分解(所以此时是X, Y表象)可以得到同样的结论。

更进一步定义算符:

$$R_n(\theta) \equiv \exp(-i\theta \hat{n} \cdot \sigma/2) = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)I - i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)(n_x X + n_y Y + n_z Z)$$

其中 $\sigma$ 表示向量(X, Y, Z), 向量元是矩阵。第二个等号可以由X, Y, Z相互是反对易的得到 $(\hat{n} \cdot \sigma)^2 = I$ 然后展开等得到。

同理换到 $\hat{n}$ 表象下可以得到一样的结论:  $R_n(\theta)$ 将任意量子态绕 $\hat{n}$ 向量旋转 $\theta$ 角度。

## 单量子门的分解

单量子门所要完成的事情为将Bloch球面上的一点变换到另一点, 这个事情总是可以通过绕某个向量的旋转来完成的, 所以任意一个单量子比特门可以表示为:

$$U = e^{i\alpha} R_n(\theta)$$

$e^{i\alpha}$ 是一个整体相位, 在上述的证明中已经出现了(带整体相位的是一个东西, 但不代表某些情况下, 某一个的写法比另一个更好)

此外任意一个单量子比特门还可以表示为:

$$U = e^{i\alpha} R_z(\beta) R_y(\gamma) R_z(\delta)$$

构造方法如下:

单量子比特门可以写为:

$$U = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$

要满足么正性即

$$1. \quad a^2 + b^2 = 1$$

$$2. \quad b^2 + d^2 = 1$$

$$3. \quad ac^* + bd^* = 0$$

$$4. \quad ad - bc = 1$$

其中满足1,2,4条件的矩阵可以直接写出：

$$U = \begin{bmatrix} \cos \frac{\gamma}{2} & -\sin \frac{\gamma}{2} \\ \sin \frac{\gamma}{2} & \cos \frac{\gamma}{2} \end{bmatrix}$$

此时我们可以在矩阵元上加上相位，这保持1,2条件

$$U = \begin{bmatrix} e^{i\theta_1} \cos \frac{\gamma}{2} & -e^{i\theta_2} \sin \frac{\gamma}{2} \\ e^{i\theta_3} \sin \frac{\gamma}{2} & e^{i\theta_4} \cos \frac{\gamma}{2} \end{bmatrix}$$

加上的相位要满足3,4条件，于是：

$$\theta_1 = -\theta_4, \theta_2 = -\theta_3$$

再做变量代换：

$$\theta_1 = -\frac{\beta}{2} - \frac{\delta}{2}, \quad \theta_2 = -\frac{\beta}{2} + \frac{\delta}{2}$$

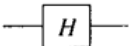
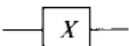
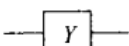
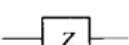
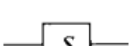
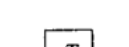
加上整体相位因子可得：

$$U = \begin{bmatrix} e^{(\alpha-\beta/2-\delta/2)} \cos \frac{\gamma}{2} & -e^{i(\alpha-\beta/2+\delta/2)} \sin \frac{\gamma}{2} \\ e^{(\alpha+\beta/2-\delta/2)} \sin \frac{\gamma}{2} & e^{i(\alpha+\beta/2+\delta/2)} \cos \frac{\gamma}{2} \end{bmatrix}$$

此即为：

$$U = e^{i\alpha} R_z(\beta) R_y(\gamma) R_z(\delta)$$

## 一些经常出现的单量子门

Hadamard 门		$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$
Pauli-X 门		$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$
Pauli-Y 门		$\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$
Pauli-Z 门		$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$
相位门		$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix}$
$\frac{\pi}{8}$ 门		$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{bmatrix}$

最后一个有时也可以称为  $Z_{\frac{1}{4}}$  门

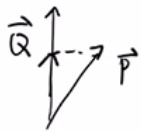
$$Z_{\frac{1}{4}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{bmatrix}$$

## 额外介绍：空间旋转和四元数简介

感谢知乎作者 lxygc 非常详细的关于四元数与空间旋转的笔记

### • 点积和叉积

考虑两个向量：



$$\vec{P} = \begin{bmatrix} P_x \\ P_y \\ P_z \end{bmatrix}, \quad \vec{Q} = \begin{bmatrix} Q_x \\ Q_y \\ Q_z \end{bmatrix}$$

$\vec{P}$ 在 $\vec{Q}$ 上的投影为

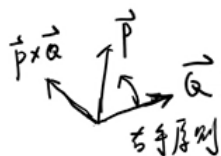
$$\begin{aligned} \text{proj}_{\vec{Q}} \vec{P} &= \frac{\vec{P} \cdot \vec{Q}}{|\vec{Q}|^2} \vec{Q} \\ &= \frac{1}{|\vec{Q}|^2} \begin{bmatrix} P_x & P_y & P_z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_x \\ Q_y \\ Q_z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_x \\ Q_y \\ Q_z \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{|\vec{Q}|^2} \begin{bmatrix} Q_x \\ Q_y \\ Q_z \end{bmatrix} \left( [Q_x, Q_y, Q_z] \begin{bmatrix} P_x \\ P_y \\ P_z \end{bmatrix} \right) \\ &= \frac{1}{|\vec{Q}|^2} \begin{bmatrix} Q_x Q_x & Q_x Q_y & Q_x Q_z \\ Q_y Q_x & Q_y Q_y & Q_y Q_z \\ Q_z Q_x & Q_z Q_y & Q_z Q_z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_x \\ P_y \\ P_z \end{bmatrix} \end{aligned}$$

其中

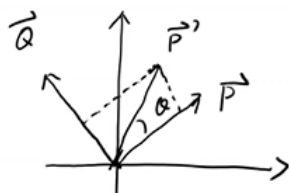
$$\begin{bmatrix} Q_x \\ Q_y \\ Q_z \end{bmatrix} [Q_x, Q_y, Q_z] = \begin{bmatrix} Q_x Q_x & Q_x Q_y & Q_x Q_z \\ Q_y Q_x & Q_y Q_y & Q_y Q_z \\ Q_z Q_x & Q_z Q_y & Q_z Q_z \end{bmatrix}$$

称为并矢，他们在右乘上一个矢量的计算上保持结果一致  
两个矢量的叉积为：

$$\vec{P} \times \vec{Q} = \begin{bmatrix} 0 & -P_z & P_y \\ P_z & 0 & -P_x \\ -P_y & P_x & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_x \\ Q_y \\ Q_z \end{bmatrix}$$



## • 二维旋转



考虑 $\vec{P}$ 旋转到 $\vec{P}'$ ，此时 $\vec{Q}$ 为垂直于 $\vec{P}$ 的向量，以 $\vec{Q}, \vec{P}$ 为基底有 $\vec{Q} - \vec{P}$ 坐标系，在此坐标系下 $\vec{P}'$ 表示为：

$$\vec{P}' = \vec{P} \cos \theta + \vec{Q} \sin \theta$$

$\vec{P}$ ,  $\vec{Q}$ 在原坐标系下表示为:

$$\vec{P} = \begin{bmatrix} P_x \\ P_y \end{bmatrix}, \vec{Q} = \begin{bmatrix} -P_y \\ P_x \end{bmatrix}$$

于是有:

$$\begin{bmatrix} P'_x \\ P'_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_x \\ P_y \end{bmatrix} \cos \theta + \begin{bmatrix} -P_y \\ P_x \end{bmatrix} \sin \theta$$

得到二维旋转变换:

$$\vec{P}' = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \vec{P}$$

这可以拓展到特殊的绕三个坐标轴的三维旋转变换:

$$\mathbf{R}_z(\theta) = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{R}_x(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \mathbf{R}_y(\theta) = \begin{bmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{bmatrix}$$

其中绕y轴的旋转符号不一样是因为手征性质。

### • 三维旋转

现在讨论绕三维空间任意一个轴的旋转, 我们令沿着这个轴的一个单位矢量为 $\vec{A}$



$\vec{A}$ ,  $\vec{P}$  张成一个平面,  $\vec{Q}$  为与此平面垂直并且长度等于 $\vec{P}$ 的长度的矢量。显然 $\vec{P}$ 可以分解为与 $\vec{A}$ 平行的量和与 $\vec{A}$ 垂直的量, 由于 $\vec{A}$ 是单位矢量, 于是与 $\vec{A}$ 平行的分量:

$$\text{proj}_{\vec{A}} \vec{P} = (\vec{A} \cdot \vec{P}) \vec{A}$$

与 $\vec{A}$ 垂直的分量:

$$\text{perp}_{\vec{A}} \vec{P} = \vec{P} - (\vec{A} \cdot \vec{P}) \vec{A}$$

并且 $\vec{Q}$ 为:

$$\vec{Q} = \vec{A} \times \vec{P}$$

参考二维旋转, 与 $\vec{A}$ 垂直的分量在旋转后变为:

$$\begin{aligned} \text{perp}_{\vec{A}} \vec{P}' &= \text{perp}_{\vec{A}} \vec{P} \cos \theta + \vec{Q} \sin \theta \\ &= (\vec{P} - (\vec{A} \cdot \vec{P}) \vec{A}) \cos \theta + (\vec{A} \times \vec{P}) \sin \theta \end{aligned}$$

与 $\vec{A}$ 平行的分量显然不变, 于是旋转后矢量为:

$$\begin{aligned} \vec{P}' &= (\vec{A} \cdot \vec{P}) \vec{A} + (\vec{P} - (\vec{A} \cdot \vec{P}) \vec{A}) \cos \theta + (\vec{A} \times \vec{P}) \sin \theta \\ &= \vec{P} \cos \theta + (\vec{A} \times \vec{P}) \sin \theta + \vec{A}(\vec{A} \cdot \vec{P})(1 - \cos \theta) \end{aligned}$$

### • 四元数

四元数可以写为 (代数形式):

$$q = w + xi + yj + zk$$

也可写为矢量形式：

$$q = s + \vec{v}$$

其中 $i, j, k$ 为三个虚部，他们分别遵循以下运算性质：

$$i^2 = j^2 = k^2 = -1$$

以及 $ij = -ji = k, jk = -kj = i, ki = -ik = j$

可以看出四元数没有乘法交换律。

他们的乘法可以写为矢量形式：

$$\begin{aligned} q_1 q_2 &= (w_1 + x_1 i + y_1 j + z_1 k) (w_2 + x_2 i + y_2 j + z_2 k) \\ &= w_1 w_2 + w_1 (x_2 i + y_2 j + z_2 k) + w_2 (x_1 i + y_1 j + z_1 k) + (x_1 i + y_1 j + z_1 k) (x_2 i + y_2 j + z_2 k) \\ &= w_1 w_2 + w_1 \vec{v}_2 + w_2 \vec{v}_1 - (x_1 x_2 + y_1 y_2 + z_1 z_2) + x_1 y_2 i j + x_1 z_2 i k + y_1 x_2 j i + y_1 z_2 j k + z_1 x_2 k i + z_1 y_2 k j \\ &= w_1 w_2 + w_1 \vec{v}_2 + w_2 \vec{v}_1 - \vec{v}_1 \cdot \vec{v}_2 + \begin{bmatrix} i & j & k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -z_1 & y_1 \\ z_1 & 0 & -x_1 \\ -y_1 & x_1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

即：

$$q_1 q_2 = w_1 w_2 + w_1 \vec{v}_2 + w_2 \vec{v}_1 - \vec{v}_1 \cdot \vec{v}_2 + \vec{v}_1 \times \vec{v}_2$$

此外四元数的共轭为：

$$\begin{aligned} \bar{q} &= \overline{s + \vec{v}} = s - \vec{v} \\ \bar{q} &= \overline{w + xi + yj + zk} = w - xi - yj - zk \end{aligned}$$

四元数的，模为：

$$|q|^2 = w^2 + x^2 + y^2 + z^2 = q\bar{q} = \bar{q}q$$

于是逆元为：

$$q^{-1} = \frac{\bar{q}}{|q|^2}$$

## • 证明四元数可以表示空间旋转

我们认为空间旋转为一个函数 $\phi$ ，它需要满足一些关系为：

1. 长度保持不变：

$$\|\phi(\vec{p})\| = \|\vec{p}\|$$

2. 角度保持不变：

$$\phi(\vec{p}_1) \cdot \phi(\vec{p}_2) = \vec{p}_1 \cdot \vec{p}_2$$

3. 手征性质保持不变：

$$\phi(\vec{p}_1) \times \phi(\vec{p}_2) = \phi(\vec{p}_1 \times \vec{p}_2)$$

可能会奇怪为何2的等式右手没有 $\phi$ ，而3的右手有，因为2的点乘出的是标量，标量一般认为在坐标变换下不变，而3叉乘出的是矢量，矢量在坐标变换下一般是变的。所以这里标量在变换下保持不变是隐含的，另外变换是线性的应该也是隐含的。

如果我们将 $\vec{p}_1, \vec{p}_2$ 视为四元数，则如下变换隐含2,3条件：

4.

$$\phi(\vec{p}_1)\phi(\vec{p}_2) = \phi(\vec{p}_1\vec{p}_2)$$

证，因为：

$$\begin{aligned}\phi(\vec{p}_1)\phi(\vec{p}_2) &= s_1s_2 - \phi(\vec{v}_1) \cdot \phi(\vec{v}_2) + s_1\phi(\vec{v}_2) + s_1\phi(\vec{v}_1) + \phi(\vec{v}_1) \times \phi(\vec{v}_2) \\ &= \phi(s_1s_2 - v_1 \cdot v_2 + s_1v_2 + s_2v_1 + v_1 \times v_2)\end{aligned}$$

由于是线性运算：

$$= s_1s_2 - (v_1 \cdot v_2) + s_1\phi(v_2) + s_2\phi(v_1) + \phi(v_1 \times v_2)$$

可得：

$$-\phi(\vec{v}_1) \cdot \phi(\vec{v}_2) + \phi(\vec{v}_1) \times \phi(\vec{v}_2) = -(\vec{v}_1 \cdot \vec{v}_2) + \phi(\vec{v}_1 \times \vec{v}_2)$$

由于叉乘和点乘一个是矢量，一个是标量，于是分别相等，即为2,3条件，于是我们只需满足1,4条件即可，而：

$$\phi_q(\vec{p}) = q\vec{p}q^{-1}$$

即可满足1,4条件（这里将 $\vec{p}$ 看为标量部分为0的四元数）：

- $\|\phi_q(\vec{p})\| = |q|\|\vec{p}\||q^{-1}| = \frac{|q|\|\vec{p}\||\bar{q}|}{|q|^2} = \|\vec{p}\|$
- $\phi_q(\vec{p}_1)\phi_q(\vec{p}_2) = q\vec{p}_1q^{-1}q\vec{p}_2q^{-1} = q\vec{p}_1\vec{p}_2q^{-1} = \phi_q(\vec{p}_1, \vec{p}_2)$

于是我们证明了四元数可以表示旋转，但是具体的表示应该如何写呢？

### • 四元数表示空间旋转的具体形式

我们令 $q$ 为一个单位四元数即 $|q| = 1$ ，对 $\vec{p}$ 做旋转有（此时 $\vec{p}$ 视为标量分量为0的四元数）：

$$\begin{aligned}q\vec{p}q^{-1} &= (s + \vec{v})\vec{p}(s - \vec{v}) \\ &= (s\vec{p} - \vec{v} \cdot \vec{p} + \vec{v} \times \vec{p})(s - \vec{v}) \\ &= [-\vec{v} \cdot \vec{p} + (s\vec{p} + \vec{v} \times \vec{p})](s - \vec{v}) \\ &= -s\vec{v} \cdot \vec{p} + (\vec{v} \cdot \vec{p})\vec{v} + s(s\vec{p} + \vec{v} \times \vec{p}) + \vec{v} \cdot (s\vec{p} + \vec{v} \times \vec{p}) - (s\vec{p} + \vec{v} \times \vec{p}) \times \vec{v}\end{aligned}$$

其中 $\vec{v} \cdot \vec{v} \times \vec{p} = 0$ ，于是：

$$= (\vec{v} \cdot \vec{p})\vec{v} + s^2\vec{p} + 2s\vec{v} \times \vec{p} - \vec{v} \times \vec{p} \times \vec{v}$$

由于 $\vec{v} \times \vec{p} \times \vec{v} = (\vec{v} \cdot \vec{v})\vec{p} - (\vec{v} \cdot \vec{p})\vec{v}$ ，有：

$$= 2(\vec{v} \cdot \vec{p})\vec{v} + s^2\vec{p} + 2s\vec{v} \times \vec{p} - (\vec{v} \cdot \vec{v})\vec{p}$$

令 $\vec{v} = t\vec{A}$ ， $\vec{A}$ 是一个单位矢量：

$$= 2t^2(\vec{A} \cdot \vec{p})\vec{A} + s^2\vec{p} + 2st\vec{A} \times \vec{p} - t^2\vec{p}$$

即：

$$q\vec{p}q^{-1} = (s^2 - t^2)\vec{p} + 2st\vec{A} \times \vec{p} + 2t^2(\vec{A} \cdot \vec{p})\vec{A}$$

对比之前推出的三维旋转的变换为：

$$\vec{P}' = \vec{P} \cos \theta + (\vec{A} \times \vec{P}) \sin \theta + \vec{A}(\vec{A} \cdot \vec{P})(1 - \cos \theta)$$

可得——对应关系为：

$$s^2 - t^2 = \cos \theta, \quad 2st = \sin \theta, \quad 2t^2 = 1 - \cos \theta$$

解出：

$$t = \sin \frac{\theta}{2}, \quad s = \cos \frac{\theta}{2}$$

四元数 $q$ 的矢量表示为：

$$q = s + \vec{v} = \cos \frac{\theta}{2} + \vec{A} \sin \frac{\theta}{2}$$

$\vec{A}$ 即为所绕旋转轴， $\theta$ 即为旋转角度。  
同时也给出代数表示为：

$$q = \cos \frac{\theta}{2} + A_x \sin \frac{\theta}{2} i + A_y \sin \frac{\theta}{2} j + A_z \sin \frac{\theta}{2} k$$

## • 四元数的指数表示

首先对四元数做指数运算有：

$$e^q = e^{\omega + \vec{v}} = e^{\omega} e^{\vec{v}}$$

其中指数函数的展开为：

$$e^x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!}$$

于是：

$$e^q = e^{\omega} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\vec{v}^k}{k!}$$

由于：

$$\vec{v}^2 = (xi + yj + zk)^2 = -|\vec{v}|^2$$

于是

$$e^q = e^{\omega} \left( \sum_{k=2n}^{\infty} \frac{(-|\vec{v}|^2)^n}{k!} + \sum_{k=2n+1}^{\infty} \frac{(-|\vec{v}|^2)^n \vec{v}}{k!} \right), \quad n \in \{0, 1, 2 \dots\}$$

由于三角函数的展开为：

$$\begin{aligned} \cos \theta &= \sum_{n=2n}^{\infty} \frac{(-\theta^2)^n}{k!} \\ \sin \theta &= \sum_{k=2k+1}^{\infty} \frac{(-\theta^2)^n}{k!} \theta \end{aligned}$$

代入得：

$$e^q = e^{\omega} \left( \cos |\vec{v}| + \frac{\vec{v}}{|\vec{v}|} \sin |\vec{v}| \right)$$

此时我们选取 $\vec{u}$ 为不带标量的单位四元数， $\theta$ 是任意一标量，有：

$$\begin{aligned} e^{\vec{u}\theta} &= \cos |\vec{u}\theta| + \frac{\sin |\vec{u}\theta|}{|\vec{u}\theta|} \vec{u}\theta \\ &= \cos \theta + \vec{u} \sin \theta \end{aligned}$$

可以看出这可以表示任意一个单位四元数，给出单位四元数的三种表示形式以及他们的关系为：

### • 代数形式

$$q = \cos \theta + u_x \sin \theta i + u_y \sin \theta j + u_z \sin \theta k$$

### • 矢量形式

$$q = [\cos \theta, \vec{u} \sin \theta]$$

### • 指数形式



$$q = e^{\vec{u}\theta}$$

我们回到前面，量子态绕任意轴的旋转为：

$$R_n(\theta) \equiv \exp(-i\theta\hat{n} \cdot \sigma/2) = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)I - i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)(n_xX + n_yY + n_zZ)$$

实际上Pauli算符X, Y, Z相互之间有如下关系：

$$XY = iZ \Rightarrow (-iX)(-iY) = -iZ$$

将 $-iX$ ,  $-iY$ ,  $-iZ$ 视为四元数的 i, j, k, 则：

$$\cos\frac{\theta}{2} + n_x\sin\frac{\theta}{2}i + n_y\sin\frac{\theta}{2}j + n_z\sin\frac{\theta}{2}k = e^{\frac{\theta}{2}\vec{n}}$$

其中：

$$\vec{n}|_{\text{向量}}(-i\vec{\sigma}) = \begin{bmatrix} n_x & n_y & n_z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -iX \\ -iY \\ -iZ \end{bmatrix} = n_x i + n_y j + n_z k = \vec{n}|_{\text{四元数}}$$

所以量子态的旋转和三维旋转虽不一样，但还是可以用四元数表示。