# 单量子比特门

量子门需要满足的限制--幺正性(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,那么变换就是幺正的。

令人惊讶的是除此之外没有其它限制

#### Pauli矩阵

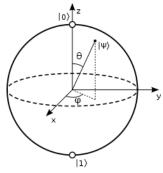
从三个特殊的量子门开始(Z表象下的Pauli矩阵):

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

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

$$|\psi
angle = \left(\cosrac{ heta}{2}|0
angle + e^{iarphi}\sinrac{ heta}{2}|1
angle
ight)$$

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:

$$|0
angle = egin{bmatrix} 1 \ 0 \end{bmatrix}, \quad |1
angle = egin{bmatrix} 0 \ 1 \end{bmatrix}$$

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:

$$|0
angle_x=\cosrac{\pi}{4}|0
angle+e^{i0}\sinrac{\pi}{4}|1
angle=rac{1}{\sqrt{2}}egin{bmatrix}1\1\end{bmatrix} \ |1
angle_x=\cos\left(-rac{\pi}{4}
ight)|0
angle+e^{i0}\sin\left(-rac{\pi}{4}
ight)|1
angle=rac{1}{\sqrt{2}}egin{bmatrix}1\-1\end{bmatrix}$$

同理y方向有:

$$|0
angle_y=rac{1}{\sqrt{2}}iggl[ rac{1}{i}iggr], |1
angle_y=rac{1}{\sqrt{2}}iggl[ rac{1}{-i}iggr]$$

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,由于除了幺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:

$$egin{aligned} R_x( heta) &\equiv \mathrm{e}^{-i heta X/2} = \cosrac{ heta}{2}I - \mathrm{i}\sinrac{ heta}{2}X = egin{bmatrix} \cosrac{ heta}{2} & -\mathrm{i}\sinrac{ heta}{2} \ -\mathrm{i}\sinrac{ heta}{2} & \cosrac{ heta}{2} \end{bmatrix} \ R_y( heta) &\equiv \mathrm{e}^{-i heta Y/2} = \cosrac{ heta}{2}I - i\sinrac{ heta}{2}Y = egin{bmatrix} \cosrac{ heta}{2} & -\sinrac{ heta}{2} \ \sinrac{ heta}{2} & \cosrac{ heta}{2} \end{bmatrix} \ R_z( heta) &\equiv \mathrm{e}^{-i heta Z/2} = \cosrac{ heta}{2}I - \mathrm{i}\sinrac{ heta}{2}Z = egin{bmatrix} \mathrm{e}^{-i heta/2} & 0 \ 0 & \mathrm{e}^{i heta/2} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

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:

$$R_z( heta)|\psi
angle=e^{-i heta Z/2}(a|0
angle_z+b|1
angle_z)$$

注意等号右边是用Z的本征态分解

$$=e^{-i heta/2}a|0
angle_z+e^{i heta/2}b|1
angle_z 
onumber \ =e^{-i heta/2}\left(a|0
angle_z+e^{i heta}b|1
angle_z
ight)$$

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:

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

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们可以表示为:

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

 $e^{ilpha}$ 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:

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

要满足幺正性即

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

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

$$ac^* + bd^* = 0$$

4. 
$$ad-bc=1$$

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

$$U = egin{bmatrix} e^{i heta_1}\cosrac{\gamma}{2} & -e^{i heta_2}\sinrac{\gamma}{2} \ e^{i heta_3}\sinrac{\gamma}{2} & e^{i heta_4}\cosrac{\gamma}{2} \end{bmatrix}$$

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:

$$heta_1=-rac{eta}{2}-rac{\delta}{2},\quad heta_2=-rac{eta}{2}+rac{\delta}{2}$$

加上整体相位因子可得:

$$U = egin{bmatrix} \mathrm{e}^{(lpha-eta/2-\delta/2)}\cosrac{\gamma}{2} & -\mathrm{e}^{\mathrm{i}(lpha-eta/2+\delta/2)}\sinrac{\gamma}{2} \ \mathrm{e}^{(lpha+eta/2-\delta/2)}\sinrac{\gamma}{2} & \mathrm{e}^{\mathrm{i}(lpha+eta/2+\delta/2)}\cosrac{\gamma}{2} \end{bmatrix}$$

此即为:

$$U=\mathrm{e}^{\mathrm{i}lpha}R_z(eta)R_y(\gamma)R_z(\delta)$$

# 一些经常出现的单量子门

Hadamard 门 
$$\longrightarrow$$
  $H$   $\longrightarrow$   $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$ 
Pauli- $X$  门  $\longrightarrow$   $X$   $\longrightarrow$   $X$   $\longrightarrow$   $X$   $\longrightarrow$   $Y$   $\longrightarrow$ 

最后一个有时也可以称为 Z 1 门

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

# 额外介绍:空间旋转和四元数简介

感谢知乎作者lxycg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:

$$ec{P} = egin{bmatrix} P_y \ P_y \ P_z \end{bmatrix}, \quad ec{Q} = egin{bmatrix} Q_x \ Q_y \ Q_z \end{bmatrix}$$

 $\vec{P}$ 在 $\vec{Q}$ 上的投影为

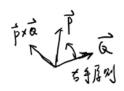
$$\begin{aligned} \operatorname{proj}_{Q}\vec{P} &= \frac{\vec{P} \cdot \vec{Q}}{|\vec{Q}|^{2}} \vec{Q} \\ &= \frac{1}{|\vec{Q}|^{2}} \left( \begin{bmatrix} P_{x} & P_{y} & P_{z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_{x} \\ Q_{y} \\ Q_{z} \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} Q_{x} \\ Q_{y} \\ Q_{z} \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{|\vec{Q}|^{2}} \begin{bmatrix} Q_{x} \\ Q_{y} \\ Q_{z} \end{bmatrix} \left( \begin{bmatrix} Q_{x}, Q_{y}Q_{z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_{x} \\ P_{y} \\ P_{z} \end{bmatrix} \right) \\ &= \frac{1}{|\vec{Q}|^{2}} \begin{bmatrix} Q_{x}Q_{x} & Q_{x}Q_{y} & Q_{x}Q_{z} \\ Q_{y}Q_{x} & Q_{y}Q_{y} & Q_{y}Q_{z} \\ Q_{z}Q_{x} & Q_{z}Q_{y} & Q_{z}Q_{z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_{x} \\ P_{y} \\ P_{z} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

其中

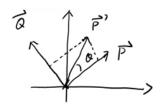
$$egin{bmatrix} Q_x \ Q_y \ Q_z \end{bmatrix} [Q_x,Q_yQ_z] = egin{bmatrix} Q_xQ_x & Q_xQ_y & Q_xQ_z \ Q_yQ_x & Q_yQ_y & Q_yQ_z \ Q_zQ_x & Q_zQ_y & Q_zQ_z \end{bmatrix}$$

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:

$$ec{P} imesec{Q} = egin{bmatrix} 0 & -P_z & P_y \ P_z & 0 & -P_x \ -P_y & P_x & 0 \end{bmatrix} egin{bmatrix} Q_x \ Q_y \ Q_z \end{bmatrix}$$



## • 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:

$$ec{P}' = ec{P}\cos heta + ec{Q}\sin heta$$

 $\vec{P}$ ,  $\vec{Q}$ 在原坐标系下表示为:

$$ec{P} = egin{bmatrix} P_x \ P_y \end{bmatrix}, ec{Q} = egin{bmatrix} -P_y \ P_x \end{bmatrix}$$

于是有:

$$egin{bmatrix} P_x' \ P_y' \end{bmatrix} = egin{bmatrix} P_x \ P_y \end{bmatrix} \cos heta + egin{bmatrix} -P_y \ P_x \end{bmatrix} \sin heta$$

得到二维旋转变换:

$$ec{P}' = egin{bmatrix} \cos heta & -\sin heta \ \sin heta & \cos heta \end{bmatrix} ec{P}$$

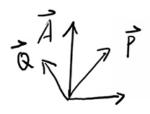
这可以拓展到特殊的绕三个坐标轴的三维旋转变换:

$$\mathbf{R}_{z}(\theta) = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{R}_{x}(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \mathbf{R}_{y}(\theta) = \begin{bmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{bmatrix}$$

其中绕v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 $ilde{A}$ 



 $\vec{A}$ , $\vec{P}$  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:

$$\operatorname{proj}_{ec{A}} ec{P} = (ec{A} \cdot ec{P}) ec{A}$$

与 4 垂直的分量:

$$\operatorname{perp}_{ec{A}} ec{P} = ec{P} - (ec{A} \cdot ec{P}) ec{A}$$

并且 ②为:

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

参考二维旋转,与A垂直的分量在旋转后变为:

$$egin{aligned} &\operatorname{perp}_{ec{A}} ec{P}' = \operatorname{perp}_{ec{A}} ec{P} \cos heta + ec{Q} \sin heta \end{aligned}$$
 $&= (ec{P} - (ec{A} \cdot ec{P}) ec{A}) \cos heta + (ec{A} imes ec{P}) \sin heta \end{aligned}$ 

与 Ā平行的分量显然不变,于是旋转后矢量为:

$$ec{P}' = (ec{A} \cdot ec{P})A + (ec{P} - (ec{A} \cdot ec{P})ec{A})\cos\theta + (ec{A} imes ec{P})\sin\theta$$

$$= ec{P}\cos\theta + (ec{A} imes ec{P})\sin\theta + ec{A}(ec{A} \cdot ec{P})(1 - \cos\theta)$$

#### • 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:

$$q=s+ec{v}$$

其中i, j, k为三个虚部, 他们分别遵循以下运算性质:

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

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:

$$egin{aligned} q_1q_2 &= \left(w_1+x_1i+y_1j+z_1k
ight)\left(w_2+x_2i+y_2j+z_2k
ight) \ &= \omega_1\omega_2+\omega_1\left(x_2i+y_2j+z_2k
ight)+\omega_2\left(x_1i+y_1j+z_1k
ight)+\left(x_1i+y_1j+z_1k
ight)\left(x_2i+y_2j+z_2k
ight) \ &= w_1w_2+w_1ec{v}_2+w_2ec{v}_1-\left(x_1^2+x_2^2+x_3^2
ight)+x_1y_2ij+x_1z_2ik+y_1x_2ji+y_1z_2yk+z_1x_2k_2+z_1y_2kj \ &= w_1w_2+w_1ec{v}_2+w_2ec{v}_1-ec{v}_1\cdotec{v}_2+\left[i-j-k
ight]egin{bmatrix} 0 & -z_1 & y_1 \ z_1 & 0 & -x_1 \ -y_1 & x_1 & 0 \end{bmatrix}egin{bmatrix} x_2 \ y_2 \ z_2 \ z_2 \ \end{bmatrix}$$

即:

$$q_1q_2 = w_1w_2 + w_1ec{v}_2 + w_2ec{v}_1 - ec{v}_1 \cdot ec{v}_2 + ec{v}_1 imes ec{v}_2$$

此外四元数的共轭为:

$$ar{q}=\overline{s+ec{v}}=s-ec{v}$$
  $ar{q}=\overline{w+xi+yj+zk}=w-xi-yj-zk$ 

四元数的,模为:

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

于是逆元为:

$$q^{-1}=rac{ar{q}}{|q|^2}$$

#### • 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:

$$\phi\left(ec{p}_{1}
ight)\cdot\phi\left(ec{p}_{2}
ight)=p_{1}\cdot p_{2}$$

3. 手征性质保持不变:

$$\phi\left(\vec{p}_{1}
ight) imes\phi\left(\vec{p}_{2}
ight)=\phi\left(\vec{p}_{1} imes\vec{p}_{2}
ight)$$

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.

$$\phi\left(ec{p}_{1}
ight) imes\phi\left(ec{p}_{2}
ight)=\phi\left(ec{p}_{1} imesec{p}_{2}
ight)$$

证,因为:

$$egin{aligned} \phi\left(ec{p}_1
ight)\phi\left(ec{p}_2
ight) &= s_1s_2 - \phi\left(ec{v}_1
ight)\cdot\phi\left(ec{v}_2
ight) + s_1\phi\left(ec{v}_2
ight) + s_1\phi\left(ec{v}_1
ight) + \phi\left(ec{v}_1
ight) imes\phi\left(ec{v}_2
ight) \ &= \phi\left(s_1s_2 - v_1\cdot v_2 + s_1v_2 + s_2v_1 + v_1 imes v_2
ight) \end{aligned}$$

由于是线性运算:

$$=s_1s_2-\phi\left(v_1\cdot v_2
ight)+s_1\phi\left(v_2
ight)+s_2\phi\left(v_1
ight)+\phi\left(v_1 imes v_2
ight)$$

可得:

$$-\phi\left(ec{v}_{1}
ight)\cdot\phi\left(ec{v}_{2}
ight)+\phi\left(ec{v}_{1}
ight) imes\phi\left(ec{v}_{2}
ight)=-\phi\left(ec{v}_{1}\cdotec{v}_{2}
ight)+\phi\left(ec{v}_{1} imesec{v}_{2}
ight)$$

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:

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

即可满足1,4条件(这里将营着为标量部分为0的四元数):

 $ig \|\phi_q(ec p)ig \| = |q||ec p|\left|q^{-1}
ight| = rac{|q||ec p|ec q}{|q|^2} = |ec p|$ 

 $egin{aligned} igl(\phi_q\left(ec{p}_1
ight)\phi_q\left(ec{p}_2
ight) = qec{p}_1q^{-1}qec{p}_2q^{-1} = qec{p}_1ec{p}_2q^{-1} = \phi_q\left(ec{p}_1,ec{p}_2
ight) \end{aligned}$ 

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):

$$egin{aligned} qec pq^{-1} &= (s+ec v)ec p(s-ec v) \ \\ &= (sec p-ec v\cdotec p+ec v imesec p)(s-ec v) \ \\ &= [-ec v\cdotec p+(sec p+ec v imesec p)](s-ec v) \ \\ &= -sec v\cdotec p+(ec v\cdotec p)ec v+s(sec p+ec v imesec p)+ec v\cdot(sec p+ec v imesec p)-(sec p+ec v imesec p) imesec v \end{aligned}$$

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

$$=(ec{v}\cdotec{p})ec{v}+s^2ec{p}+2sec{v} imesec{p}-ec{v} imesec{p} imesec{v}$$

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:

$$=2(ec{v}\cdotec{p})ec{v}+s^2ec{p}+2sec{v} imesec{p}-(ec{v}\cdotec{v})ec{p}$$

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

$$=2t^2(ec{A}\cdotec{p})ec{A}+s^2ec{p}+2stec{A} imesec{p}-t^2ec{p}$$

即:

$$qec{p}q^{-1}=ig(s^2-t^2ig)ec{p}+2stec{A} imesec{p}+2t^2(ec{A}\cdotec{p})ec{A}$$

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:

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

解出:

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

四元数q的矢量表示为:

$$q=s+ec{v}=\cosrac{ heta}{2}+ec{A}\sinrac{ heta}{2}$$

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

$$q=\cosrac{ heta}{2}+A_xi+A_yj+A_zk$$

# • 四元数的指数表示

首先对四元数做指数运算有:

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

其中指数函数的展开为:

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

于是:

$$e^q=e^\omega\sum_{k=0}^\inftyrac{ec{v}^k}{k!}$$

由于:

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

于是

$$e^q = e^w \left( \sum_{k=2n}^{\infty} rac{\left( -|ec{v}|^2 
ight)^n}{k!} + \sum_{k=2n+1}^{\infty} rac{\left( -|ec{v}|^2 
ight)^n ec{v}}{k!} 
ight), \quad n \in \{0,1,2\cdots\}$$

由于三角函数的展开为:

$$\cos \theta = \sum_{n=2n}^{\infty} \frac{\left(-\theta^2\right)^n}{k!}$$

$$\sin \theta = \sum_{k=2k+1}^{\infty} \frac{\left(-\theta^2\right)^n}{k!} \theta$$

代入得:

$$e^q = e^\omega \left( \cos |ec{v}| + rac{ec{v}}{|ec{v}|} \sin |ec{v}| 
ight)$$

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:

$$e^{ec{u} heta} = \cos |ec{u} heta| + rac{\sin |ec{u} heta|}{|ec{u} heta|}ec{u} heta$$
 $= \cos heta + ec{u}\sin heta$ 

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

$$q=e^{ec{u} heta}$$

我们回到前面,量子态绕任意轴的旋转为:

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

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:

$$\cosrac{ heta}{2}+n_x\sinrac{ heta}{2}i+n_y\sinrac{ heta}{2}j+n_z\sinrac{ heta}{2}k=e^{rac{ heta}{2}ec{n}}$$

其中:

$$egin{aligned} ec{n}ig|_{ ext{n}\equiv}\left(-iec{\sigma}
ight) = \left[n_x \quad n_y \quad n_z
ight]egin{bmatrix} -iX \ -iY \ -iZ \end{bmatrix} = n_x i + n_y j + n_z k = ec{n}ig|_{ ext{MTT}} \end{aligned}$$

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。