

量子计算 —基础篇

Quantum Computer

网址: www.qubits.top

Calvin Tang

179209347@qq.com

介绍

教程简介：

- 面向对象：量子计算初学者
- 依赖课程：线性代数，解析几何，量子力学（非必需）

知乎专栏：

https://www.zhihu.com/column/c_1501138176371011584

Github & Gitee 地址：

<https://github.com/mymagicpower/quantum>

<https://gitee.com/mymagicpower/quantum>

* 版权声明：

- 仅限用于个人学习，或者大学授课使用
（大学授课如需ppt原件，请用学校邮箱联系我获取）
- 禁止用于任何商业用途

酉（么正）变换

酉（么正）变换是一种矩阵，它作用在量子态上得到的是一个量子态。使用 U 来表达酉矩阵， U^\dagger 表示酉矩阵的转置共轭矩阵，二者满足运算关系 $UU^\dagger = I$ ，说明酉变换是一种可逆变换。

$|\psi\rangle$ 狄拉克符号 ket，代表列向量. $\langle\psi|$ 狄拉克符号 bra，代表行向量

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \rightarrow \langle\psi| = \alpha^* \langle 0| + \beta^* \langle 1|$$

向量内积称为 bracket，也称为归一化条件。

$$\langle\psi|\psi\rangle = |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

一般酉变换在量子态上的作用是变换矩阵左乘以右矢进行计算的。例如一开始有一个量子态 $|\psi\rangle$ ，则状态的变换为一个矩阵，变换后得到：

$$|\psi\rangle \rightarrow U|\psi\rangle$$

在对偶空间，我们可得到下面的变换：

$$\langle\psi| \rightarrow \langle\psi|U^\dagger, U^\dagger = (U^T)^* \text{ 称为转置共轭矩阵}$$

此时，我们需要两个矢量的内积经过同一个酉变换之后保持不变，保持前后的归一化：

$$\langle\psi|U^\dagger U|\psi\rangle = 1 \quad \text{意味着：} \quad UU^\dagger = I \Rightarrow U^\dagger = U^{-1}$$

*也可以通过酉变换表示密度矩阵的演化 $\rho = U\rho_0 U^\dagger$ 这样就连混合态的演化也包含在内了。

酉 (么正) 变换性质

$$1. UU^\dagger = U^\dagger U = I \Rightarrow U^\dagger = U^{-1}$$

2. 如果 : $U \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 是么正矩阵 , 对于所有的 $v, w \in \mathbb{C}^n$

$$\langle Uv, Uw \rangle = \langle v, w \rangle \quad \langle Uv, w \rangle = \langle v, U^\dagger w \rangle$$

$$\text{证明 : } \langle Uv, Uw \rangle = (Uv)^\dagger (Uw) = v^\dagger U^\dagger U w = v^\dagger I w = \langle v, w \rangle$$

3. 如果 : $U \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 是么正矩阵 , 对于所有的 $v \in \mathbb{C}^n$

$$\|Uv\| = \|v\|$$

$$\text{证明 : } \|Uv\| = \sqrt{\langle Uv, Uv \rangle} = \sqrt{\langle v, v \rangle} = \|v\|$$

4. 如果 : $U \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 是么正矩阵 , 对于所有的 $v, w \in \mathbb{C}^n$

$$d(Uv, Uw) = d(v, w)$$

$$\text{证明 : } d(Uv, Uw) = |Uv - Uw| = |U(v - w)| = |v - w| = d(v, w)$$

厄米共轭算符公式

给定一个线性算符 A ，它的厄米共轭算符（转置共轭）定义为：

$$\langle u|A|v\rangle = \langle A^\dagger u|v\rangle = \langle v|A^\dagger|u\rangle^* \quad A^\dagger = (A^*)^T$$

由上述定义可得：

$$\langle e_j|A|e_k\rangle = \langle e_k|A^\dagger|e_j\rangle^*$$

于是有：

$$(c^\dagger)_{jk} = c^*_{kj}$$

根据上述定义，可得：

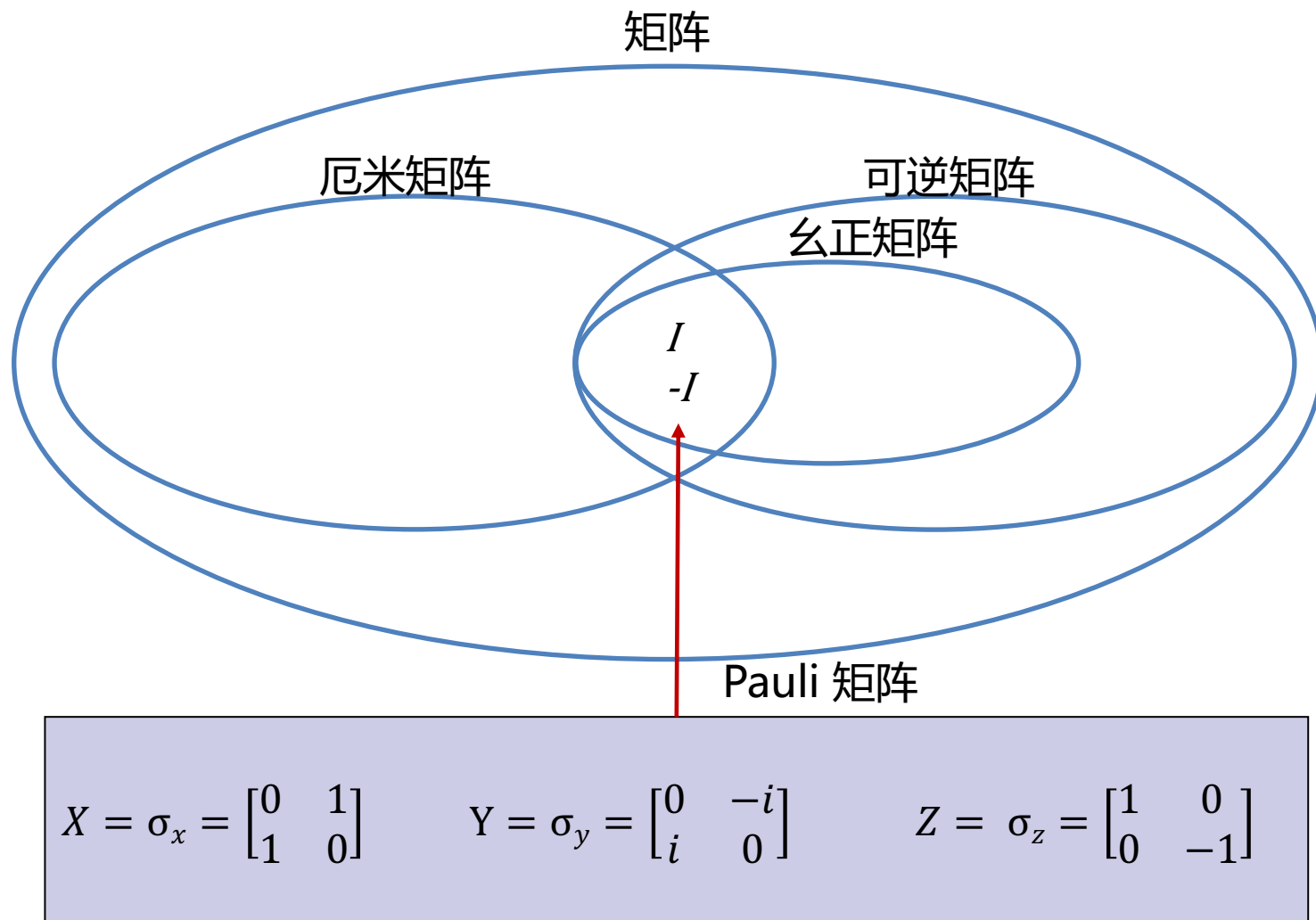
$$|x\rangle^\dagger = (x_1^*, \dots, x_n^*) = \langle x|$$

$$(\sum_i a_i A_i)^\dagger = \sum_i a_i^* A_i^\dagger \quad (cA)^\dagger = c^* A^\dagger \quad (A + B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger \quad (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$$

$$(A|v\rangle)^\dagger = \langle v|A^\dagger \quad (|u\rangle\langle v|)^\dagger = |v\rangle\langle u|$$

$$||\langle u|A|v\rangle||^2 = \langle u|A|v\rangle \langle v|A^\dagger|u\rangle$$

酉 (幺正) 变换 - 矩阵类型



单量子比特逻辑门

根据量子计算的原理：

- ✓ 任意的单量子比特逻辑门可以拆分为绕 X 轴旋转的量子逻辑门和绕 Y 轴旋转量子逻辑门的序列；
- ✓ 任意的两量子比特逻辑门可以拆分为由 CNOT/CZ 门和单量子比特逻辑门的序列。

在经典计算机中，单比特逻辑门只有一种——非门(NOT gate)，但是在量子计算机中，量子比特情况相对复杂，存在**叠加态**和**相位**，所以单量子比特逻辑门会有更多的种类。

经典计算线路由连线和门组成，量子线路也同样如此。

单量子比特门是一个二阶的酉矩阵 U ，满足 $UU^\dagger = I$ ，作用在量子比特 $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$ 上，相当于将 $|\psi\rangle$ 左乘上 U 矩阵，变换为：

$$|\psi'\rangle = U \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$$

每一个酉矩阵 U 都对应着一个有效的量子门，即对于量子门来说唯一显示就是酉性(unitary)。量子门的作用都是线性的。

单量子比特逻辑门

$|0\rangle$ 变换后的量子态为 $|\varphi_0\rangle$, $|1\rangle$ 变换后的量子态为 $|\varphi_1\rangle$, 则U变换的表达式为 :

$$U|0\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = |\varphi_0\rangle$$

$$U|1\rangle = \alpha'|0\rangle + \beta'|1\rangle = \begin{bmatrix} \alpha' \\ \beta' \end{bmatrix} = |\varphi_1\rangle$$

因为: $|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ $|1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$

两边分别同乘 $\langle 0|$, $\langle 1|$, 有 :

$$\textcircled{1} U|0\rangle\langle 0| = |\varphi_0\rangle\langle 0| = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} \langle 0| = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} [1 \ 0] = \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ \beta & 0 \end{bmatrix}$$

$$\textcircled{2} U|1\rangle\langle 1| = |\varphi_1\rangle\langle 1| = \begin{bmatrix} \alpha' \\ \beta' \end{bmatrix} \langle 1| = \begin{bmatrix} \alpha' \\ \beta' \end{bmatrix} [0 \ 1] = \begin{bmatrix} 0 & \alpha' \\ 0 & \beta' \end{bmatrix}$$

1, 2 两式相加 :

$$U|0\rangle\langle 0| + U|1\rangle\langle 1| = U(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) = \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ \beta & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & \alpha' \\ 0 & \beta' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha & \alpha' \\ \beta & \beta' \end{bmatrix}$$

由于 :

$$|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} [1 \ 0] + \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} [0 \ 1] = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = I$$

可得 :

$$U(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) = UI = U = \begin{bmatrix} \alpha & \alpha' \\ \beta & \beta' \end{bmatrix} = |\varphi_0\rangle\langle 0| + |\varphi_1\rangle\langle 1|$$

单量子比特逻辑门 - 么正变换矩阵的计算方法

$|0\rangle$ 变换后的量子态为 $|\varphi_0\rangle$, $|1\rangle$ 变换后的量子态为 $|\varphi_1\rangle$:

$$|0\rangle \rightarrow |\varphi_0\rangle$$

$$|1\rangle \rightarrow |\varphi_1\rangle$$

根据之前的就算 , 可得 U 变换的通用表达式为 :

$$U = |\varphi_0\rangle \langle 0| + |\varphi_1\rangle \langle 1|$$

单量子比特么正变换矩阵的计算方法 :

$$U = |\varphi_0\rangle \langle 0| + |\varphi_1\rangle \langle 1|$$

将每个量子态变换前的对偶向量 (如 : $|0\rangle$ 的对偶向量为 $\langle 0|$) 右乘变换后的量子态 , 然后相加。

H (Hadamard) 门 - 矩阵计算

Hadamard 门是一种可以将基态变为叠加态的量子逻辑门，简称 H 门。

H 门作用在基态：

$$\begin{aligned} \textcircled{1} H|0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \\ \textcircled{2} H|1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad \text{因为: } |0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

两边分别同乘 $\langle 0|$, $\langle 1|$:

$$\begin{aligned} \textcircled{1} H|0\rangle \langle 0| &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \langle 0| \\ \textcircled{2} H|1\rangle \langle 1| &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \langle 1| \end{aligned}$$

1, 2 两式相加：

$$\begin{aligned} H|0\rangle \langle 0| + U|1\rangle \langle 1| &= H(|0\rangle \langle 0| + |1\rangle \langle 1|) = H I = H \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \langle 0| + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \langle 1| \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$


完整计算一次，加深理解，后面直接套用公式：

$$U = |\varphi_0\rangle \langle 0| + |\varphi_1\rangle \langle 1|$$

H (Hadamard) 门

Hadamard 门是一种可以将基态变为叠加态的量子逻辑门，简称H门。

$$\text{矩阵形式 } H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

量子线路符号： 

H 门作用在任意量子态 $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$ ，得到的新的量子态为：

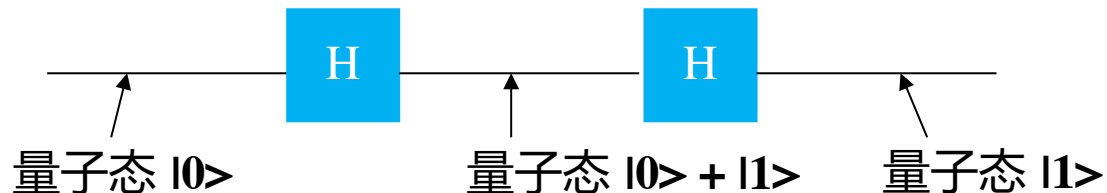
$$|\psi'\rangle = H|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \alpha + \beta \\ \alpha - \beta \end{bmatrix} = \frac{\alpha + \beta}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{\alpha - \beta}{\sqrt{2}}|1\rangle$$

H 门其它性质：

$$H^2 = I \quad H^\dagger = H \quad H = \frac{1}{\sqrt{2}}(X+Z)$$

$$HXH = Z \quad HZH = X \quad HYH = -Y$$

$$HR_x(\theta)H = \cos(\theta/2) I - i \sin(\theta/2) Z = R_z(\theta)$$



注：两个H门连用，相当于NOT门

H (Hadamard) 门

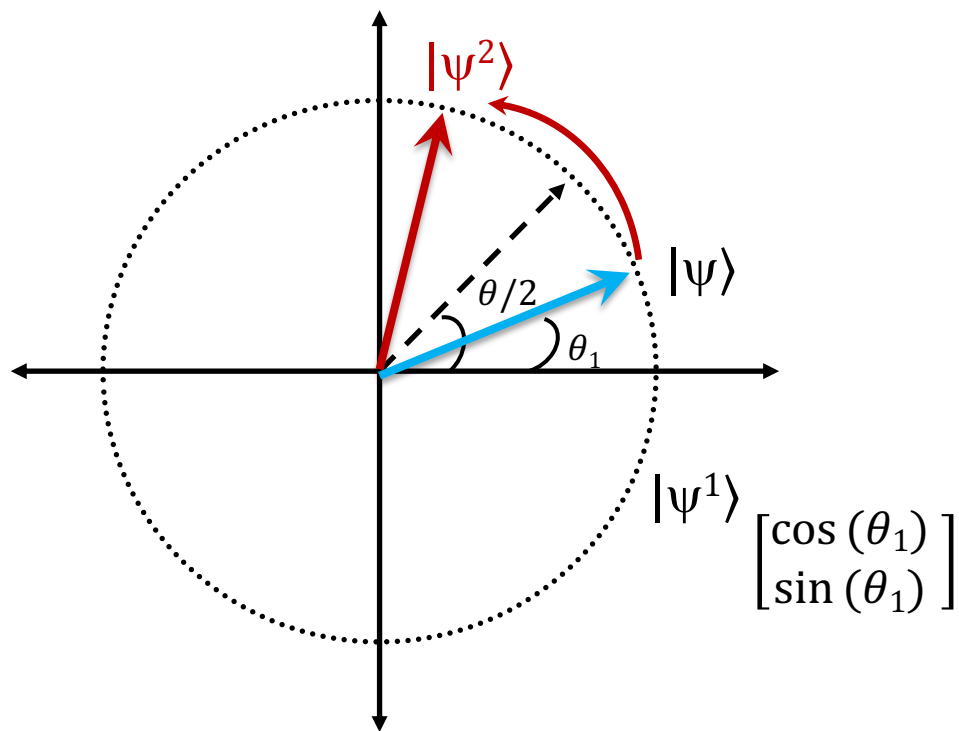
Hadamard 门是一种可以将基态变为叠加态的量子逻辑门，简称H门。

$$\text{矩阵形式 } H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

H 门作用在任意量子态 $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$ ，得到的新的量子态为：

$$\begin{aligned} |\psi'\rangle &= H|\psi\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \alpha + \beta \\ \alpha - \beta \end{bmatrix} \\ &= \frac{\alpha + \beta}{\sqrt{2}} |0\rangle + \frac{\alpha - \beta}{\sqrt{2}} |1\rangle \end{aligned}$$

常用几何变换 – 镜像



$$|\psi\rangle = \cos(\theta/2) |0\rangle + \sin(\theta/2) |1\rangle = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \end{bmatrix}$$

$$Q = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ \sin(\theta) & -\cos(\theta) \end{bmatrix}$$

* 关于通过原点、方向和水平轴夹角为 $\theta/2$ 直线镜像;

证明：

$$\begin{aligned} |\psi^2\rangle &= Q |\psi^1\rangle \\ &= \begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ \sin(\theta) & -\cos(\theta) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(\theta_1) \\ \sin(\theta_1) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos(\theta) \cos(\theta_1) + \sin(\theta) \sin(\theta_1) \\ \sin(\theta) \cos(\theta_1) - \cos(\theta) \sin(\theta_1) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos(\theta - \theta_1) \\ \sin(\theta - \theta_1) \end{bmatrix} \end{aligned}$$

关于通过原点、方向和水平轴夹角为 $\theta/2$ 直线镜像，
 可以理解为逆时针旋转 $2\left(\frac{\theta}{2} - \theta_1\right)$ ，则：

$$|\psi^2\rangle = \begin{bmatrix} \cos(\theta_1 + 2(\frac{\theta}{2} - \theta_1)) \\ \sin(\theta_1 + 2(\frac{\theta}{2} - \theta_1)) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\theta - \theta_1) \\ \sin(\theta - \theta_1) \end{bmatrix}$$

H (Hadamard) 门 – 举例 (α 和 β 都为实数)

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\frac{\pi}{4}) & \sin(\frac{\pi}{4}) \\ \sin(\frac{\pi}{4}) & -\cos(\frac{\pi}{4}) \end{bmatrix}$$

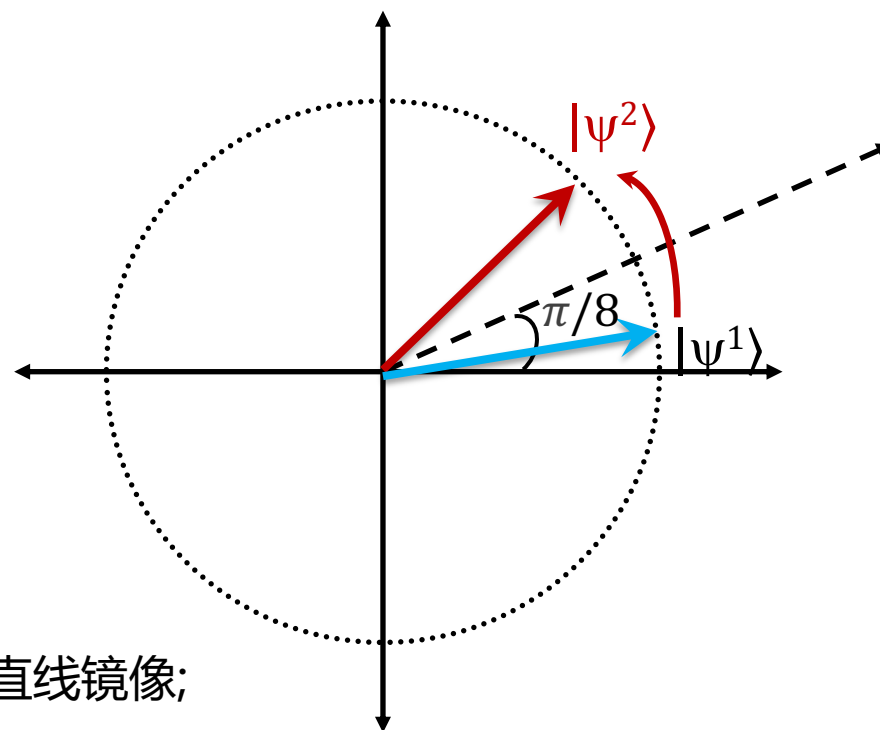
观察发现，符合镜像公式：

$$Q = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ \sin(\theta) & -\cos(\theta) \end{bmatrix}$$

* 关于通过原点、方向和水平轴夹角为 $\theta/2$ 直线镜像;

可知：

H门操作，相当于关于通过原点、方向和水平轴夹角为 $\frac{\theta}{2} = \frac{\pi}{8}$ 直线镜像;



H (Hadamard) 门 – 举例 (α 和 β 都为实数)

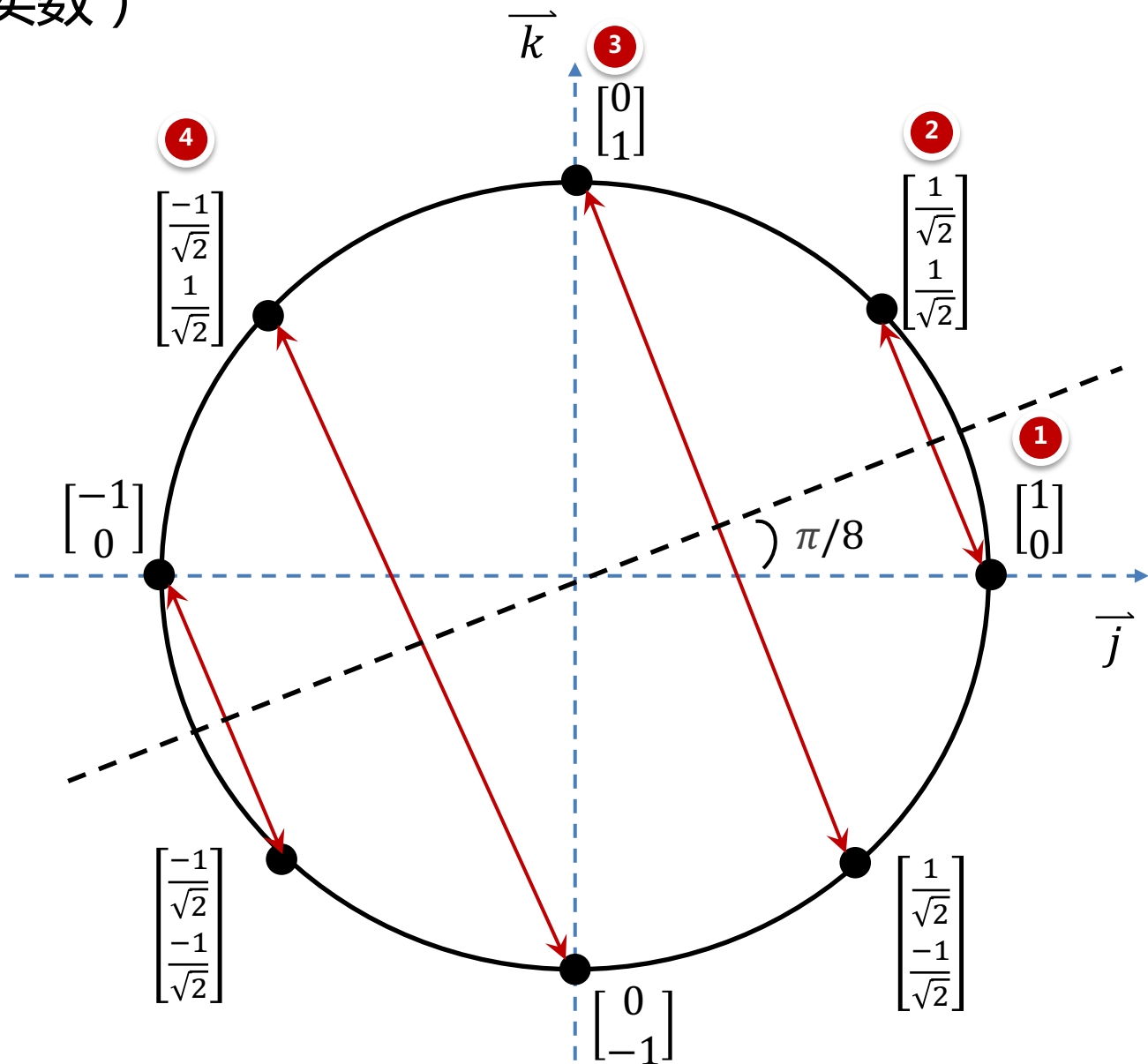
$$\textcircled{1} \quad H \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

$$\textcircled{2} \quad H \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\textcircled{3} \quad H \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

$$\textcircled{4} \quad H \begin{bmatrix} \frac{-1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{-1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix}$$

...



参考来源: Quantum Computing for Computer Scientists

泡利矩阵

泡利矩阵 (Pauli matrices) 有时也被称作自旋矩阵 (spin matrices)。
量子态的演化本质上可以看作是对量子态对应的矩阵做变换，即是做矩阵的乘法。
三个泡利矩阵表示的泡利算符代表着对量子态最基本的操作。
泡利算符是**一组三个2x2的么正厄米复矩阵**，一般都以希腊字母 σ (西格玛)来表示。
读作泡利 x，泡利 y，泡利 z。

$$X = \sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad Y = \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad Z = \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

每个泡利矩阵有两个特征值，1 和 -1，其对应的归一化特征向量为：

$$\psi_{x+} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \psi_{y+} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix} \quad \psi_{z+} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\psi_{x-} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \quad \psi_{y-} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix} \quad \psi_{z-} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

通常用 $|+\rangle$ 表示 ψ_{x+} ，用 $|-\rangle$ 表示 ψ_{x-} ，用 $|0\rangle$ 表示 ψ_{z+} ，用 $|1\rangle$ 表示 ψ_{z-} 。

泡利矩阵

如将 σ_x 作用到基态上：

$$\begin{aligned} X|0\rangle &= \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = |1\rangle \\ X|1\rangle &= \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = |0\rangle \end{aligned}$$

X 门作用在任意量子态 $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$ ，得到的新的量子态为：

$$|\psi'\rangle = X|\psi\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta \\ \alpha \end{bmatrix} = \beta|0\rangle + \alpha|1\rangle$$

泡利矩阵的线性组合是完备的二维酉变换生成元，即所有满足 $UU^\dagger = I$ 的 U 都可以通过下面的公式得到：

$$U(\theta) = e^{-i\theta(a\sigma_x + b\sigma_y + c\sigma_z)}$$

泡利算符

泡利算符的对应运算规则如下：

$$\sigma_x \sigma_x = \sigma_y \sigma_y = \sigma_z \sigma_z = I$$

证明：

$$\sigma_x \sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = I \quad \sigma_y \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = I \quad \sigma_z \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = I$$

顺序相乘的两个泡利矩阵个跟未参与计算的泡利矩阵是 i 倍关系，逆序则是 -i 倍关系：

$$\begin{aligned} \sigma_x \sigma_y &= i\sigma_z, & \sigma_y \sigma_x &= -i\sigma_z \\ \sigma_y \sigma_z &= i\sigma_x, & \sigma_z \sigma_y &= -i\sigma_x \\ \sigma_z \sigma_x &= i\sigma_y, & \sigma_x \sigma_z &= -i\sigma_y \end{aligned} \quad \begin{aligned} \det(\sigma_x) &= \det(\sigma_y) = \det(\sigma_z) = -1 \\ \text{tr}(\sigma_x) &= \text{tr}(\sigma_y) = \text{tr}(\sigma_z) = 0 \end{aligned}$$

证明：

$$\begin{aligned} \sigma_x \sigma_y &= \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} = i \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = i\sigma_z. \\ \sigma_y \sigma_x &= \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = -i \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = -i\sigma_z. \end{aligned}$$

Pauli-X 门 - 矩阵计算

Pauli-X 作用在单量子比特上，跟经典计算机的NOT门量子等价，将量子态翻转，量子态变换规律是：

$$|0\rangle \rightarrow |1\rangle$$

$$|1\rangle \rightarrow |0\rangle$$

单量子比特么正变换矩阵的计算方法：

$$U = |\varphi_0\rangle\langle 0| + |\varphi_1\rangle\langle 1|$$

根据变换矩阵计算公式，有：

$$\begin{aligned} X &= |1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{因为: } |0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Pauli-X 门

Pauli-X 门矩阵形式为泡利矩阵 σ_x ，即：

$$X = \sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$X |j\rangle = |j \oplus 1\rangle$$

Pauli-X 门矩阵又称为NOT门，其**量子线路符号**：



X 门作用在基态：

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

X 门作用在任意量子态 $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$ ，得到的新的量子态为：

$$|\psi'\rangle = X|\psi\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \beta|0\rangle + \alpha|1\rangle$$

Pauli-X 门

Pauli-X 门矩阵形式为泡利矩阵 σ_x , 即 :

$$X = \sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\frac{\pi}{2}) & \sin(\frac{\pi}{2}) \\ \sin(\frac{\pi}{2}) & -\cos(\frac{\pi}{2}) \end{bmatrix}$$

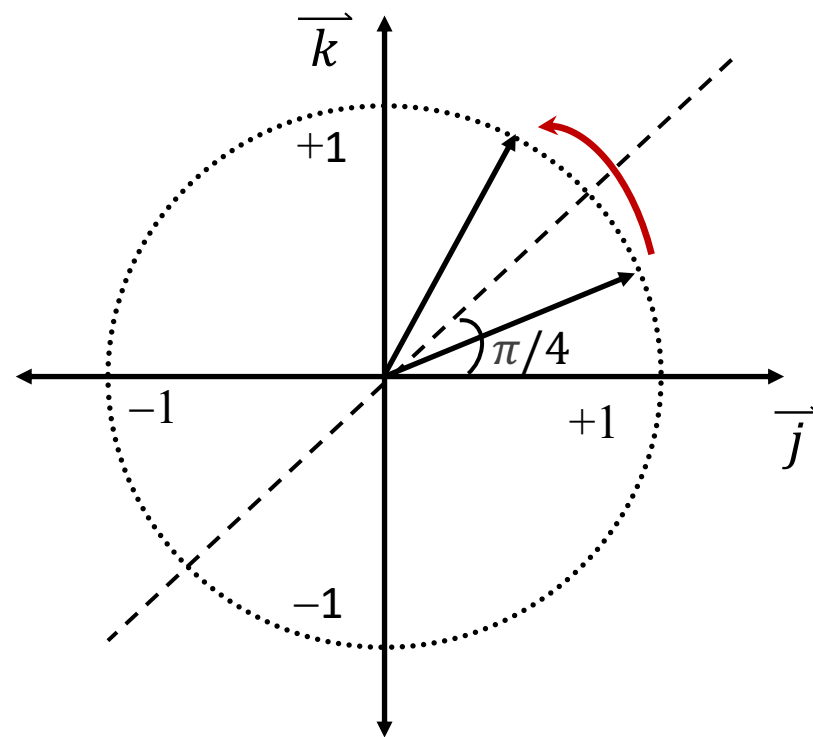
观察发现 , 符合镜像公式 :

$$Q = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ \sin(\theta) & -\cos(\theta) \end{bmatrix}$$

* 关于通过原点、方向和水平轴夹角为 $\theta/2$ 直线镜像;

可知 :

X 门操作 , 相当于关于通过原点、方向和水平轴夹角为 $\frac{\theta}{2} = \frac{\pi}{4}$ 直线镜像;



Pauli-X 门 – α 和 β 都为实数，且归一化 - 举例

X 门作用在基态：

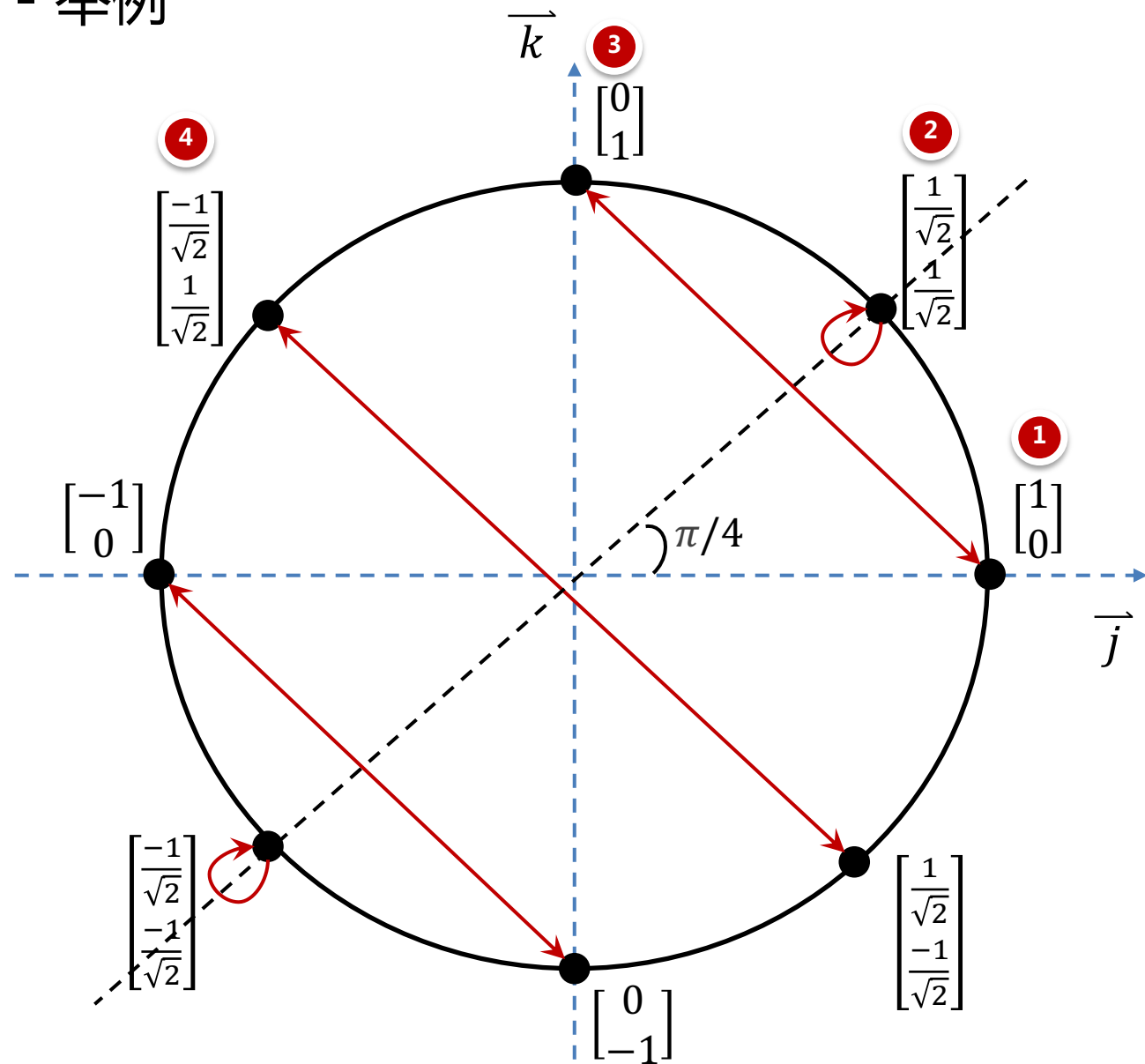
$$\textcircled{1} \quad X|0\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = |1\rangle$$

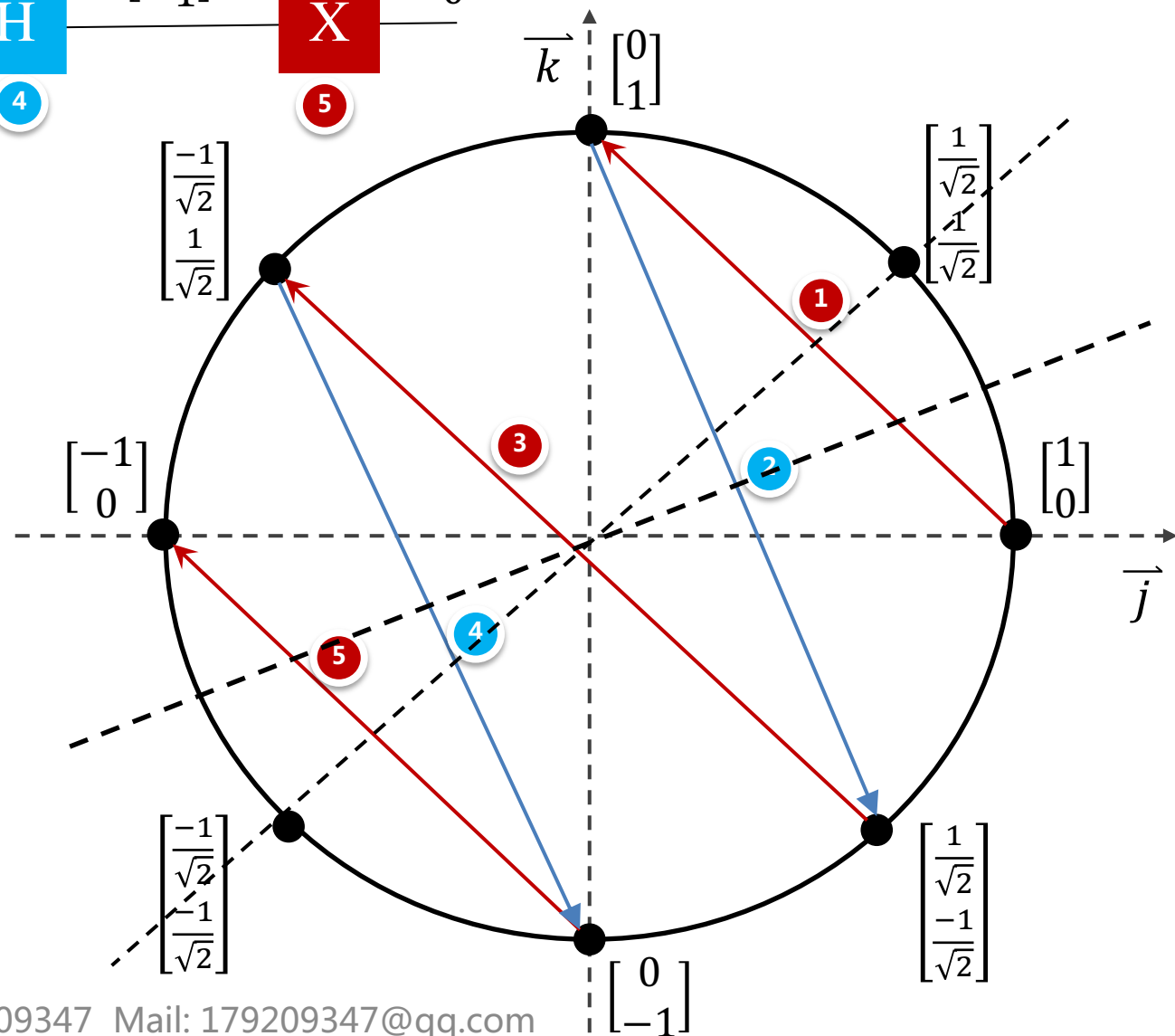
$$\textcircled{3} \quad X|1\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = |0\rangle$$

X 门作用在叠加态：

$$\textcircled{2} \quad X \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

$$\textcircled{4} \quad X \begin{bmatrix} \frac{-1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{-1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$





如图所示交替操作之后：

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Pauli-Y 门 - 矩阵计算

Pauli-Y 作用在单量子比特上，作用相当于绕布洛赫球 Y 轴旋转角度 π ，量子态变换规律是：

$$\begin{aligned} |0\rangle &\rightarrow i|1\rangle \\ |1\rangle &\rightarrow -i|0\rangle \end{aligned}$$

单量子比特么正变换矩阵的计算方法：

$$U = |\varphi_0\rangle\langle 0| + |\varphi_1\rangle\langle 1|$$

根据变换矩阵计算公式，有：

$$\begin{aligned} Y &= i|1\rangle\langle 0| - i|0\rangle\langle 1| = i \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} [1 \ 0] - i \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} [0 \ 1] \text{ 因为: } |0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \\ &= i \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} - i \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Pauli-Y 门

Pauli-Y 门矩阵形式为泡利矩阵 σ_y ，即：

$$Y = \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$$

其量子线路符号：



Y 门作用在基态：

$$Y|0\rangle = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ i \end{bmatrix} = i \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = i|1\rangle$$

$$Y|1\rangle = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -i \\ 0 \end{bmatrix} = -i \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = -i|0\rangle$$

Y 门作用在任意量子态 $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$ ，得到的新的量子态为：

$$|\psi'\rangle = Y|\psi\rangle = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -i\beta \\ i\alpha \end{bmatrix} = -i\beta|0\rangle + i\alpha|1\rangle$$

Pauli-Z 门 - 矩阵计算

Pauli-Z 作用在单量子比特上，作用相当于绕布洛赫球 Z 轴旋转角度 π ，量子态变换规律是：

$$\begin{aligned} |0\rangle &\rightarrow |0\rangle \\ |1\rangle &\rightarrow -|1\rangle \end{aligned}$$

单量子比特么正变换矩阵的计算方法：

$$U = |\varphi_0\rangle\langle 0| + |\varphi_1\rangle\langle 1|$$

根据变换矩阵计算公式，有：

$$\begin{aligned} Z = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1| &= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{因为: } |0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Pauli-Z 门

Pauli-Z 门矩阵形式为泡利矩阵 σ_z ，即：

$$Z = \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1| \quad (\text{谱分解})$$



谱分解的变形写法

其量子线路符号：



$$\begin{aligned} \textcircled{1} \quad I - 2|1\rangle\langle 1| &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} - 2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} - 2 \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \\ \textcircled{2} \quad 2|0\rangle\langle 0| - I &= 2 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = 2 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Z 门作用在基态：

$$Z|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = (-1)^0|0\rangle = |0\rangle$$

$$Z|1\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix} = (-1)^1|1\rangle = -|1\rangle$$



$$Z|j\rangle = (-1)^j|j\rangle$$

Z 门作用在任意量子态 $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$ ，得到的新的量子态为：

$$|\psi'\rangle = Z|\psi\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha \\ -\beta \end{bmatrix} = \alpha|0\rangle - \beta|1\rangle$$

矩阵的指数函数

泰勒公式：

$$e^x = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots + \frac{x^n}{n!}$$

利用函数的幂级数定义矩阵A的函数，

矩阵A的指数函数表示：

$$e^A = I + \frac{A}{1!} + \frac{A^2}{2!} + \frac{A^3}{3!} + \dots + \frac{A^n}{n!}$$

如果A是对角阵：

$$A = \text{diag}(A_{11}, A_{22}, A_{33}, \dots)$$

则(证明略)：

$$A^n = \text{diag}(A^n_{11}, A^n_{22}, A^n_{33}, \dots)$$

于是：

$$A^1 = \text{diag}(A_{11}, A_{22}, A_{33}, \dots)$$

$$A^2 = \text{diag}(A^2_{11}, A^2_{22}, A^2_{33}, \dots)$$

$$A^3 = \text{diag}(A^3_{11}, A^3_{22}, A^3_{33}, \dots)$$

$$\begin{aligned} e^A &= I + \frac{A}{1!} + \frac{A^2}{2!} + \frac{A^3}{3!} + \dots + \frac{A^n}{n!} \\ &= I + \text{diag}\left(\frac{A_{11}}{1!}, \frac{A_{22}}{1!}, \frac{A_{33}}{1!}, \dots\right) + \text{diag}\left(\frac{A^2_{11}}{2!}, \frac{A^2_{22}}{2!}, \frac{A^2_{33}}{2!}, \dots\right) \\ &\quad + \text{diag}\left(\frac{A^3_{11}}{3!}, \frac{A^3_{22}}{3!}, \frac{A^3_{33}}{3!}, \dots\right) + \dots \\ &= \text{diag}\left(1 + \frac{A_{11}}{1!} + \frac{A^2_{11}}{2!} + \frac{A^3_{11}}{3!} + \dots, 1 + \frac{A_{22}}{1!} + \frac{A^2_{22}}{2!} + \frac{A^3_{22}}{3!} + \dots, \dots\right) \\ &= \text{diag}(e^{A_{11}}, e^{A_{22}}, e^{A_{33}}, \dots) \end{aligned}$$

如果A不是对角阵，则可以通过酉变换将其对角化 $D = UAU^\dagger$

下面这种表达形式称为以A为生成元生成的酉变换：

$$U(\theta) = e^{(-i\theta A)}$$

矩阵的指数函数

如果A是2x2对角阵：

$$A = \begin{bmatrix} a_0 & 0 \\ 0 & a_1 \end{bmatrix}, \quad a_0, a_1 \text{ 为矩阵A的特征值。}$$

则：

$$A^k = \begin{bmatrix} a_0^k & 0 \\ 0 & a_1^k \end{bmatrix}$$

则：

$$e^A = I + \frac{A}{1!} + \frac{A^2}{2!} + \frac{A^3}{3!} + \dots + \frac{A^n}{n!} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} a_0 & 0 \\ 0 & a_1 \end{bmatrix} + \frac{1}{2!} \begin{bmatrix} a_0^2 & 0 \\ 0 & a_1^2 \end{bmatrix} + \frac{1}{3!} \begin{bmatrix} a_0^3 & 0 \\ 0 & a_1^3 \end{bmatrix} + \dots$$

由于：

$$|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

可得：

$$e^A = \text{diag}(e^{A_{11}}, e^{A_{22}}, e^{A_{33}} \dots) = \begin{bmatrix} e^{a_0} & 0 \\ 0 & e^{a_1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{a_0} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & e^{a_1} \end{bmatrix} = e^{a_0} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + e^{a_1} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = e^{a_0} |0\rangle\langle 0| + e^{a_1} |1\rangle\langle 1|$$

如果A为对角阵，容易根据特征值构造出矩阵指数函数的矩阵表达。

生成元 - 单位矩阵

以A为生成元生成的酉变换 $U(\theta) = e^{(-i\theta A)}$

单位矩阵 $I = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

以单位矩阵 I 作为生成元，则可以构建一种特殊的酉变换：

$$U(\theta) = e^{(-i\theta A)}$$

$$-i\theta A = -i\theta \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -i\theta & 0 \\ 0 & -i\theta \end{bmatrix}$$

$$U(\theta) = e^{(-i\theta A)} = \begin{bmatrix} e^{-i\theta} & 0 \\ 0 & e^{-i\theta} \end{bmatrix} = e^{-i\theta} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = e^{-i\theta} I$$

它作用在单量子态上，相当于对整体乘以一个系数。

如果带入密度矩阵表达式，这个参数会被消去。

这个系数称为量子态的整体相位。任何操作和测量都无法分辨两个相同的密度矩阵，所以整体相位一般情况下对系统无影响。

分别用不同的泡利矩阵作为生成元，可以构成RX, RY, RZ。

$R_x(\theta)$, $R_y(\theta)$, $R_z(\theta)$ 逻辑门公式证明

泰勒公式：

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!}$$

$$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \dots + (-1)^n \frac{x^{2n}}{(2n)!}$$

$$e^x = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots + \frac{x^n}{n!}$$

根据上述公式：

$$R_U(\gamma) = e^{(-i\gamma Y)} = I + \frac{A}{1!} + \frac{A^2}{2!} + \frac{A^3}{3!} + \dots + \frac{A^n}{n!}$$

$$= I + \frac{-i\gamma U}{1!} + \frac{(-i\gamma U)^2}{2!} + \frac{(-i\gamma U)^3}{3!} + \dots + \frac{(-i\gamma U)^n}{n!}$$

$$= \left(1 - \frac{\gamma^2}{2!} + \frac{\gamma^4}{4!} - \frac{\gamma^6}{6!} + \dots + (-1)^n \frac{\gamma^{2n}}{(2n)!} \right) I - i \left(\gamma - \frac{\gamma^3}{3!} + \frac{\gamma^5}{5!} - \frac{\gamma^7}{7!} + \dots + (-1)^n \frac{\gamma^{2n+1}}{(2n+1)!} \right) U$$

$$= \cos(\gamma) I - i \sin(\gamma) U$$

代入Y可得：

$$R_y(\gamma) = \cos(\gamma) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} - i \sin(\gamma) \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\gamma) & -\sin(\gamma) \\ \sin(\gamma) & \cos(\gamma) \end{bmatrix}$$

X Y Z 矩阵公式：

$$X = \sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$X^2 = \sigma_x \sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = I$$

$$Y = \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$$

$$Y^2 = \sigma_y \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = I$$

$$Z = \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$Z^2 = \sigma_z \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = I$$

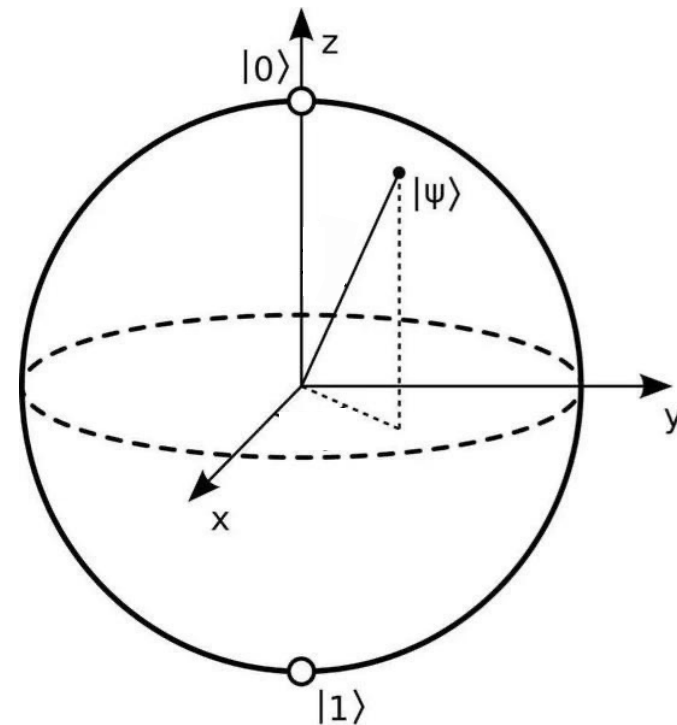
$R_x(\theta)$, $R_y(\theta)$, $R_z(\theta)$ 逻辑门公式

根据 $R_U(\gamma) = \cos(\gamma)I - i\sin(\gamma)U$
 可得：

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

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

$$\begin{aligned} R_z(\theta) &= e^{-i\theta Z/2} = \cos(\theta/2)I - i\sin(\theta/2)Z \\ &= \begin{bmatrix} e^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2} \end{bmatrix} = e^{-i\theta/2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{bmatrix} \end{aligned}$$



由于 $e^{-i\theta/2}$ 是一个整体相位，只考虑单门，则可以省略该参数。于是， R_z 门矩阵可简写为：

$$R_z(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{bmatrix}$$

RX(θ) 门

RX门由Pauli-X 矩阵作为生成元生成，其矩阵形式为：

$$R_x(\theta) = e^{-i\theta X/2} = \cos(\theta/2) I - i \sin(\theta/2) X$$

$$= \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) & -i \sin(\theta/2) \\ -i \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{bmatrix}$$

其量子线路符号：



RX(θ) 门作用在基态：

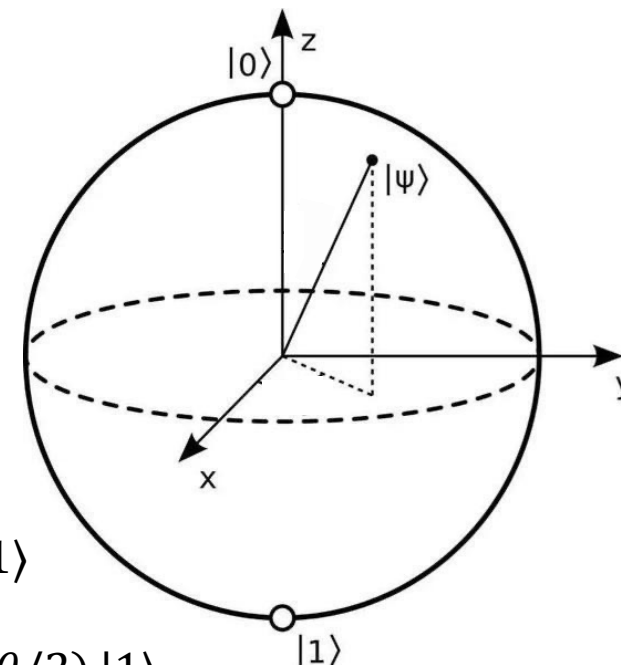
$$R_x(\theta) |0\rangle = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) & -i \sin(\theta/2) \\ -i \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) \\ -i \sin(\theta/2) \end{bmatrix} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle - i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle$$

$$R_x(\theta) |1\rangle = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) & -i \sin(\theta/2) \\ -i \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -i \sin(\theta/2) \\ \cos(\theta/2) \end{bmatrix} = -i \sin(\theta/2) |0\rangle + \cos(\theta/2) |1\rangle$$

$R_x(\pi/2)$ 门作用在任意量子态 $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$ ，得到的新的量子态为：

$$|\psi'\rangle = R_x(\pi/2) |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \alpha - i\beta \\ \beta - i\alpha \end{bmatrix} = \frac{\alpha - i\beta}{\sqrt{2}} |0\rangle + \frac{\beta - i\alpha}{\sqrt{2}} |1\rangle$$

RX操作将原来的态上绕X轴逆时针旋转 θ 角。
能导致概率振幅的变化。



RX(θ) 门 - 重要性质

两角和与差的三角函数公式：

$$\sin(\alpha \pm \beta) = \sin \alpha \cos \beta \pm \cos \alpha \sin \beta$$

$$\cos(\alpha \pm \beta) = \cos \alpha \cos \beta \mp \sin \alpha \sin \beta$$

$$Q = R_x(\theta) = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) & -i \sin(\theta/2) \\ -i \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} Q^2 &= \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) & -i \sin(\theta/2) \\ -i \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) & -i \sin(\theta/2) \\ -i \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos^2(\theta/2) - \sin^2(\theta/2) & -2i \cos(\theta/2) \sin(\theta/2) \\ -2i \cos(\theta/2) \sin(\theta/2) & \cos^2(\theta/2) - \sin^2(\theta/2) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos(\theta/2 + \theta/2) & -i \sin(\theta/2 + \theta/2) \\ -i \sin(\theta/2 + \theta/2) & \cos(\theta/2 + \theta/2) \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$$Q^3 = \begin{bmatrix} \cos(3\theta/2) & -i \sin(3\theta/2) \\ -i \sin(3\theta/2) & \cos(3\theta/2) \end{bmatrix}$$

....

$$Q^n = \begin{bmatrix} \cos(n\theta/2) & -i \sin(n\theta/2) \\ -i \sin(n\theta/2) & \cos(n\theta/2) \end{bmatrix}$$

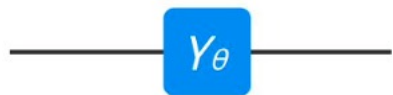
RY(θ) 门

RY门由Pauli-Y 矩阵作为生成元生成，其矩阵形式为：

$$R_y(\theta) = e^{-i\theta Y/2} = \cos(\theta/2) I - i \sin(\theta/2) Y$$

$$= \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{bmatrix}$$

其量子线路符号：



RY(θ) 门作用在基态：

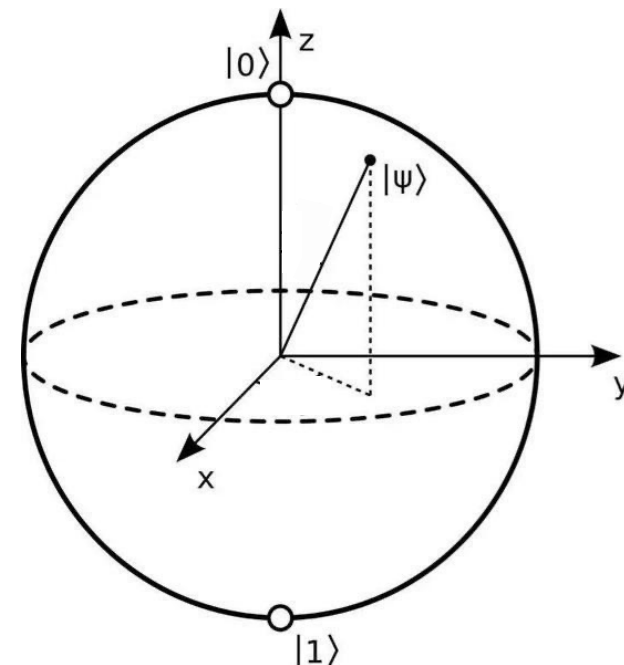
$$R_y(\theta) |0\rangle = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \end{bmatrix} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle$$

$$R_y(\theta) |1\rangle = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sin(\theta/2) \\ \cos(\theta/2) \end{bmatrix} = -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle$$

$R_y(\pi/2)$ 门作用在任意量子态 $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$ ，得到的新的量子态为：

$$|\psi'\rangle = R_x(\pi/2) |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \alpha - \beta \\ \alpha + \beta \end{bmatrix} = \frac{\alpha - \beta}{\sqrt{2}} |0\rangle + \frac{\alpha + \beta}{\sqrt{2}} |1\rangle$$

RY操作将原来的态上绕Y轴逆时针旋转 θ 角。
能导致概率振幅的变化。



RY(θ) 门 - 重要性质

两角和与差的三角函数公式：

$$\begin{aligned}\sin(\alpha \pm \beta) &= \sin \alpha \cos \beta \pm \cos \alpha \sin \beta \\ \cos(\alpha \pm \beta) &= \cos \alpha \cos \beta \mp \sin \alpha \sin \beta\end{aligned}$$

$$Q = R_y(\theta) = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned}Q^2 &= \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos^2(\theta/2) - \sin^2(\theta/2) & -2 \cos(\theta/2) \sin(\theta/2) \\ 2 \cos(\theta/2) \sin(\theta/2) & \cos^2(\theta/2) - \sin^2(\theta/2) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos(\theta/2 + \theta/2) & -\sin(\theta/2 + \theta/2) \\ \sin(\theta/2 + \theta/2) & \cos(\theta/2 + \theta/2) \end{bmatrix}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}Q^3 &= \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos(\theta) \cos(\theta/2) - \sin(\theta) \sin(\theta/2) & -\cos(\theta) \sin(\theta/2) - \sin(\theta) \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta) \cos(\theta/2) + \cos(\theta) \sin(\theta/2) & -\sin(\theta) \sin(\theta/2) + \cos(\theta) \cos(\theta/2) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos(3\theta/2) & -\sin(3\theta/2) \\ \sin(3\theta/2) & \cos(3\theta/2) \end{bmatrix}\end{aligned}$$

....

$$Q^n = \begin{bmatrix} \cos(n\theta/2) & -\sin(n\theta/2) \\ \sin(n\theta/2) & \cos(n\theta/2) \end{bmatrix}$$

矩阵几何意义：

每次作用于向量，相当于将向量逆时针旋转 $\frac{\theta}{2}$

RY(θ) 门 - 举例 (α 和 β 都为实数)

$$Q = R_y(\theta) = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{bmatrix}$$

* 每次作用于量子态(向量), 相当于逆时针旋转 $\frac{\theta}{2}$

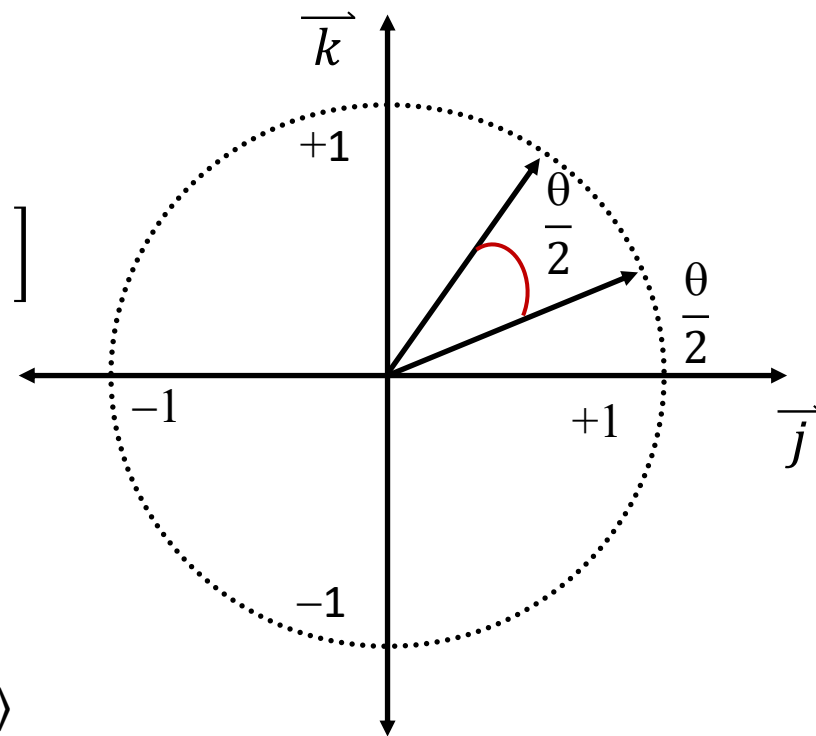
$$Q \text{ 作用在量子态 } |\psi\rangle = \cos(\theta/2) |0\rangle + \sin(\theta/2) |1\rangle = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \end{bmatrix}$$

$$Q^1 |\psi\rangle = Q^1 \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2 + \theta/2) \\ \sin(\theta/2 + \theta/2) \end{bmatrix}$$

$$Q^2 |\psi\rangle = \begin{bmatrix} \cos(2\theta/2 + \theta/2) \\ \sin(2\theta/2 + \theta/2) \end{bmatrix}$$

....

$$Q^n |\psi\rangle = \begin{bmatrix} \cos((n+1)\theta/2) \\ \sin((n+1)\theta/2) \end{bmatrix} = \cos((n+1)\theta/2) |0\rangle + \sin((n+1)\theta/2) |1\rangle$$



选取合适的旋转次数 n 使得 $\sin^2((n+1)\theta/2)$ 最接近 1, 即可完成**振幅放大**量子线路。

RZ(θ) 门

RZ门又称为相位转化门(phase-shift gate)，由Pauli-Z 矩阵作为生成元生成，其矩阵形式为：

$$R_z(\theta) = e^{-i\theta Z/2} = \cos(\theta/2) I - i \sin(\theta/2) Z$$

$$= \begin{bmatrix} e^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2} \end{bmatrix} = e^{-i\theta/2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{bmatrix}$$

RZ 操作将原来的态上绕 Z 轴逆时针旋转 θ 角。不会导致概率振幅的变化，只会改变相位。

其量子线路符号：



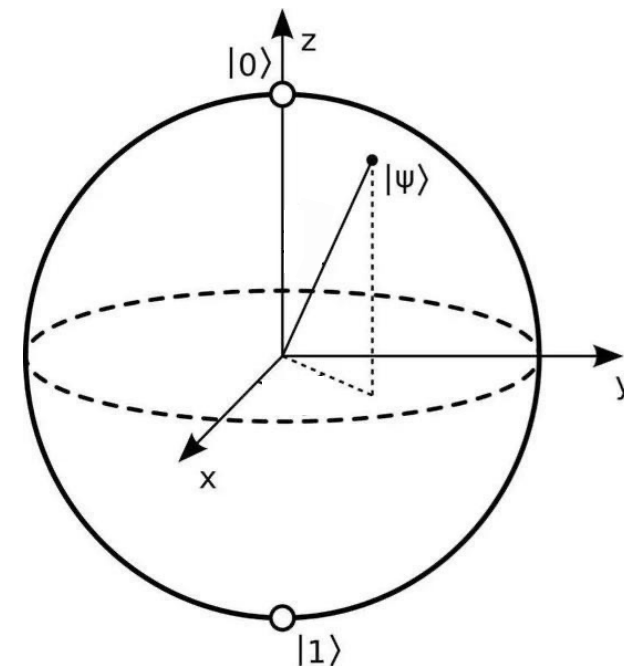
RZ门作用在基态：

$$R_z(\theta) |0\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = |0\rangle$$

$$R_z(\theta) |1\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ e^{i\theta} \end{bmatrix} = e^{i\theta} |1\rangle$$

$R_y(\pi/2)$ 门作用在任意量子态 $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$ ，得到的新的量子态为：

$$|\psi'\rangle = R_z(\pi/2) |\psi\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{1+i}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha \\ \frac{1+i}{\sqrt{2}} \beta \end{bmatrix} = \alpha|0\rangle + \frac{1+i}{\sqrt{2}} \beta|1\rangle$$



RZ(θ) 门

由于 $e^{-i\theta/2}$ 是一个全局相位，其没有物理意义，只考虑单门，则可以省略该参数。于是，RZ门矩阵可简写为：

$$R_z(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{bmatrix}$$

$e^{-i\theta/2}$ 并没有对计算基 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 做任何改变，而只是在原来的态上绕Z轴逆时针旋转 θ 角。

$$\begin{aligned} R_z(\theta) &= |0\rangle\langle 0| + e^{i\theta} |1\rangle\langle 1| \\ &= I - |1\rangle\langle 1| + e^{i\theta} |1\rangle\langle 1| & I &= |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| \\ &= I + e^{i\theta} |1\rangle\langle 1| - |1\rangle\langle 1| \end{aligned}$$

RZ(θ) 门

RZ 操作将原来的态上绕 Z 轴逆时针旋转 θ 角。不会导致概率振幅的变化，只会改变相位。

因为：

$$\textcircled{1} |\psi\rangle = r_0|0\rangle + r_1e^{i\varphi}|1\rangle = \cos(\theta)|0\rangle + \sin(\theta)e^{i\varphi}|1\rangle = \begin{bmatrix} \cos(\theta) \\ \sin(\theta)e^{i\varphi} \end{bmatrix}$$

$$\textcircled{2} R_z(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{bmatrix}$$

可得：

$$R_z(\theta)|\psi\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(\theta) \\ \sin(\theta)e^{i\varphi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\theta) \\ e^{i\theta}e^{i\varphi}\sin(\theta) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\theta) \\ e^{i(\theta+\varphi)}\sin(\theta) \end{bmatrix}$$

RZ(θ) 门其它性质：

$$X R_z(\theta) X = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & e^{i\theta} \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{i\theta} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = e^{i\theta} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-i\theta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-i\theta} \end{bmatrix} \quad (\text{舍去全局相位})$$

即：

$$X R_z(\theta) X = R_z(-\theta) = R_z(\theta)^{-1} = R_z(\theta)^+$$

$$R_z(\theta)^+ = (\cos(\theta/2)I - i\sin(\theta/2)Z)^+ = \cos(\theta/2)I + i\sin(\theta/2)Z = e^{i\theta Z/2}$$

$$\text{注：} X = \sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

RZ(θ) 门 – T 门, S 门, Z 门

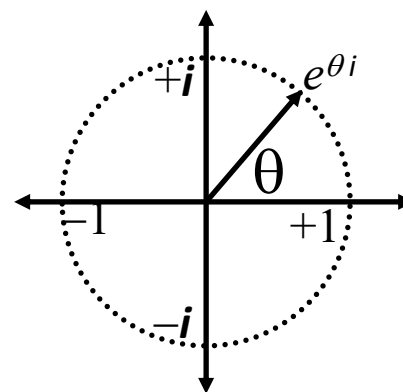
公式： $R_z(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{bmatrix}$

$$T = R_z(\pi/4) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{bmatrix}$$

$$S = R_z(\pi/2) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix}$$

$$S = T^2 \quad 45^\circ + 45^\circ = 90^\circ$$

$$Z = R_z(\pi) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$



$$e^{i\pi/2} = i$$

$$e^{i\pi} = -1 \quad (\text{欧拉恒等式})$$

$$e^{3\pi i/2} = -i$$

$$e^{2\pi i} = e^0 = 1$$



Thank

You