Qubits
qubits.top

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

张量积（tensor product）

张量积是两个或多个向量空间张成一个更大向量空间的运算。
在量子力学中，**量子的状态**由希尔伯特空间 (Hilbert spaces) 中的**单位向量**来描述。
本质上复合系统中量子态的演化也是矩阵的乘法，其与单个子系统相比，只是多了张量积的运算。

$$|00\rangle = |0\,,0\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle = \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}\\0\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix}$$

$$|01\rangle = |0\,,1\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle = \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}\\0\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\end{bmatrix}$$

$$|10\rangle = |1\,,0\rangle = |1\rangle \otimes |0\rangle = \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}\\1\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\end{bmatrix}$$

$$|11\rangle = |1\,,1\rangle = |1\rangle \otimes |1\rangle = \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}\\1\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0\\0\\0\\1\end{bmatrix}$$

张量积 – 重要公式

1. $A\otimes(B+C)=A\otimes B+A\otimes C$, $|a\rangle\otimes(|b\rangle+|c\rangle)=|a\rangle\otimes|b\rangle+|a\rangle\otimes|c\rangle$

2. $(A+B)\otimes C=A\otimes C+\mathrm{B}\otimes C$, $(|a\rangle+|b\rangle)\otimes|c\rangle=|a\rangle\otimes|c\rangle+|b\rangle\otimes|c\rangle$

3. $z(|a\rangle\otimes|\mathrm{b}\rangle)=(z|a\rangle)\otimes|\mathrm{b}\rangle=|a\rangle\otimes(z|b\rangle)$ z 为标量

4. $(A\otimes B)^{\dagger}=A^{\dagger}\otimes B^{\dagger}$ $\quad (A\otimes B)^{*}=A^{*}\otimes B^{*}$

5. $(A\otimes B)^{-1}=A^{-1}\otimes B^{-1}$ $\quad (A\otimes B)^{T}=A^{T}\otimes B^{T}$

6. $tr(A\otimes B)=tr(A)\,tr(B)$

7. $det(A\otimes B)=(detA)^{p}\,(detB)^{m}$

张量积 – 重要公式

1. 不同子空间的张量积的矩阵乘，相当于各自子空间下的矩阵乘，再把结果张量积。

① $(A \otimes B)\,(C \otimes D) = (AC) \otimes (BD)$

② $(A_1 \otimes B_1)\,(A_2 \otimes B_2)\,(A_3 \otimes B_3) = (A_1\,A_2\,A_3) \otimes (B_1\,B_2\,B_3)$

③ $(|a\rangle\langle b|) \otimes (|c\rangle\langle d|) = (|a\rangle \otimes |c\rangle)(\langle b| \otimes \langle d|) = |ac\rangle\langle bd|$ (公式1逆向狄拉克符号写法)

④ $(A \otimes B)\,(|x\rangle \otimes |y\rangle) = A\,|x\rangle \otimes B\,|y\rangle$

⑤ $(A \otimes B)\,(\sum_i c_i |x_i\rangle \otimes |y_i\rangle) = \sum_i c_i A|x_i\rangle \otimes B\,|y_i\rangle$

⑥ $(\sum_i c_i A_i \otimes B_i)\,(|x\rangle \otimes |y\rangle) = \sum_i c_i A_i |\mathrm{x}\rangle \otimes B_i |\mathrm{y}\rangle$

2. $H^{\otimes n} = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x,y} (-1)^{x \cdot y} |x\rangle\langle y|$ $\qquad (H|0\rangle)^{\otimes n} = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^{\mathrm{n}}-1} |x\rangle$

张量积 – 例子

例如，复合系统 H 由两能级系统 H1 和 H2 复合而成，
在 t1 时刻，两个系统的状态都为 $|0\rangle$ ，则复合系统的状态为 $|00\rangle$；
在 t2 时刻，第一个系统经过 X 门，状态变 为 $|1\rangle$，第二个系统经过 Z 门，状态为 $|0\rangle$，那么复合系统的状态经过的变换用矩阵运算表示为 ：

因为： $X = \sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ $Z = \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$

所以：$X \otimes Z = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} & 1\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \\ 1\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} & 0\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$

则有：$X \otimes Z\,|00\rangle = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = |10\rangle$

多量子比特逻辑门

不论是在经典计算还是量子计算中，两量子比特门无疑是建立量子比特之间联系的最重要桥梁。不同于经典计算中的与或非门及它们的组合，量子逻辑门要求所有的逻辑操作必须是酉变换，所以输入和输出的比特数量是相等的。

对于一个两量子比特的系统，其计算基分别为：

$$|00\rangle = \begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix} \quad |01\rangle = \begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\end{bmatrix} \quad |10\rangle = \begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\end{bmatrix} \quad |11\rangle = \begin{bmatrix}0\\0\\0\\1\end{bmatrix}$$

$$|00\rangle = |0,0\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle$$
$$|01\rangle = |0,1\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle$$
$$|10\rangle = |1,0\rangle = |1\rangle \otimes |0\rangle$$
$$|11\rangle = |1,1\rangle = |1\rangle \otimes |1\rangle$$

在本系列教程里约定：基态$|00\rangle$中 ，左侧0对应的位为高位，右侧的0对应的位为低位。
(不同厂商定义可能相反，此为人为约定)

两量子比特逻辑门

$|00\rangle$ 变换后的量子态为$|\varphi_0\rangle$ ，$|01\rangle$ 变换后的量子态为$|\varphi_1\rangle$ ，$|10\rangle$ 变换后的量子态为$|\varphi_2\rangle$ ，$|11\rangle$ 变换后的量子态为$|\varphi_3\rangle$ ，则U变换的表达式为：

$$U|00\rangle = |\varphi_0\rangle$$
$$U|01\rangle = |\varphi_1\rangle$$
$$U|10\rangle = |\varphi_2\rangle$$
$$U|11\rangle = |\varphi_3\rangle$$

两边分别同乘 $\langle 00|$, $\langle 01|$, $\langle 10|$, $\langle 11|$, 有：

$$U|00\rangle\langle 00| = |\varphi_0\rangle\langle 00|$$
$$U|01\rangle\langle 01| = |\varphi_1\rangle\langle 01|$$
$$U|10\rangle\langle 10| = |\varphi_2\rangle\langle 10|$$
$$U|11\rangle\langle 11| = |\varphi_3\rangle\langle 11|$$

上述公式左侧相加：

$$U|00\rangle\langle 00| + U|01\rangle\langle 01| + U|10\rangle\langle 10| + U|11\rangle\langle 11| = U\,I = U$$

上述公式右侧相加：

$$|\varphi_0\rangle\langle 00| + |\varphi_1\rangle\langle 01| + |\varphi_2\rangle\langle 10| + |\varphi_3\rangle\langle 11|$$

可得：

$$U = |\varphi_0\rangle\langle 00| + |\varphi_1\rangle\langle 01| + |\varphi_2\rangle\langle 10| + |\varphi_3\rangle\langle 11|$$

① $|00\rangle = \begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix}$ $|01\rangle = \begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\end{bmatrix}$ $|10\rangle = \begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\end{bmatrix}$ $|11\rangle = \begin{bmatrix}0\\0\\0\\1\end{bmatrix}$

② $|00\rangle\langle 00| + |01\rangle\langle 01| + |10\rangle\langle 10| + |11\rangle\langle 11| = I$

两量子比特逻辑门 - 幺正变换矩阵的计算方法

$|00\rangle$ 变换后的量子态为$|\varphi_0\rangle$ ，$|01\rangle$ 变换后的量子态为$|\varphi_1\rangle$ ，$|10\rangle$ 变换后的量子态为$|\varphi_2\rangle$ ，$|11\rangle$ 变换后的量子态为$|\varphi_3\rangle$ ：

$$|00\rangle \rightarrow |\varphi_0\rangle$$
$$|01\rangle \rightarrow |\varphi_1\rangle$$
$$|10\rangle \rightarrow |\varphi_2\rangle$$
$$|11\rangle \rightarrow |\varphi_3\rangle$$

根据之前的计算，可得 U 变换的通用表达式为：

$$U = |\varphi_0\rangle\langle 00| + |\varphi_1\rangle\langle 01| + |\varphi_2\rangle\langle 10| + |\varphi_3\rangle\langle 11|$$

两量子比特幺正变换矩阵的计算方法：

$$U = |\varphi_0\rangle\langle 00| + |\varphi_1\rangle\langle 01| + |\varphi_2\rangle\langle 10| + |\varphi_3\rangle\langle 11|$$

将每个量子态变换前的对偶向量（如：$|00\rangle$ 的对偶向量为 $\langle 00|$ ）右乘变换后的量子态，然后相加。

CNOT 门 - 矩阵计算 - 高位作为控制比特

CNOT 门作用在两量子比特上，高位为1时 (高位为控制比特)，将低位量子态翻转，量子态变换规律是：

Input　Output

A　B	A'　B'
$\|00\rangle$	$\|00\rangle$
$\|01\rangle$	$\|01\rangle$
$\|10\rangle$	$\|11\rangle$
$\|11\rangle$	$\|10\rangle$

$$|00\rangle = \begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix} \quad |01\rangle = \begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\end{bmatrix} \quad |10\rangle = \begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\end{bmatrix} \quad |11\rangle = \begin{bmatrix}0\\0\\0\\1\end{bmatrix}$$

两量子比特幺正变换矩阵的计算方法：

$$U = |\varphi_0\rangle\langle 00| + |\varphi_1\rangle\langle 01| + |\varphi_2\rangle\langle 10| + |\varphi_3\rangle\langle 11|$$

根据变换矩阵计算公式，有：

$$U_{CNOT} = |00\rangle\langle 00| + |01\rangle\langle 01| + |11\rangle\langle 10| + |10\rangle\langle 11|$$

$$= \begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix}\langle 00| + \begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\end{bmatrix}\langle 01| + \begin{bmatrix}0\\0\\0\\1\end{bmatrix}\langle 10| + \begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\end{bmatrix}\langle 11| = \begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&0&1\\0&0&1&0\end{bmatrix}$$

CNOT 门 - 矩阵计算 - 高位作为控制比特

根据公式 (倒过来看)：

$(|a\rangle\langle b|) \otimes (|c\rangle\langle d|) = (|a\rangle \otimes |c\rangle)(\langle b| \otimes \langle d|) = |ac\rangle\langle bd|$

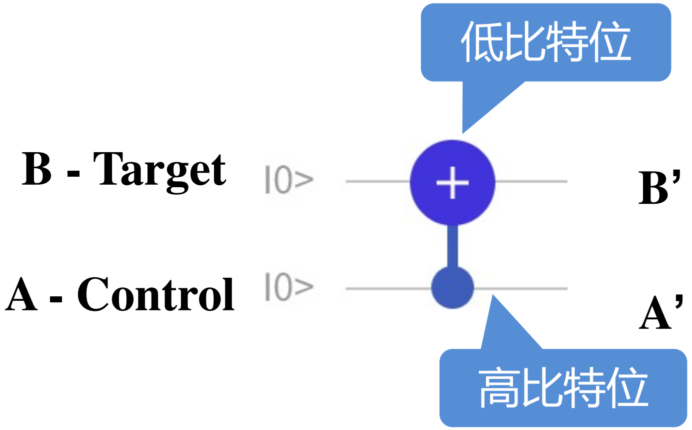
$$\begin{aligned}
U_{CNOT} &= |00\rangle\langle 00| + |01\rangle\langle 01| + |11\rangle\langle 10| + |10\rangle\langle 11| \\
&= |0\rangle\langle 0| \otimes |0\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 0| \otimes |1\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 1| \otimes |1\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| \otimes |0\rangle\langle 1| \\
&= |0\rangle\langle 0| \otimes (|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) + |1\rangle\langle 1| \otimes (|1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1|) \\
&= |0\rangle\langle 0| \otimes \mathrm{I} + |1\rangle\langle 1| \otimes X
\end{aligned}$$

CNOT 门 - 高位作为控制比特

控制非门(Control - NOT)，通常用 CNOT 表示，是一种普遍使用的两量子比特门。
如果高位作为控制比特，则它的矩阵形式：

$$\mathrm{CNOT} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

对应的 CNOT 门在线路中的显示：



约定：量子线路从上到下为从低比特到高比特位。
含实点的线路对应的量子比特为控制比特 (control qubit)，含+号的线路对应的量子比特为目标比特 (target qubit)。

CNOT 门 - 矩阵计算 - 低位作为控制比特

CNOT 门作用在两量子比特上，低位为1时 (高位为控制比特)，将高位量子态翻转，量子态变换规律是：

Input		Output	
B	A	B’	A’
$\vert 00\rangle$		$\vert 00\rangle$	
$\vert 01\rangle$		$\vert 11\rangle$	
$\vert 10\rangle$		$\vert 10\rangle$	
$\vert 11\rangle$		$\vert 01\rangle$	

$$|00\rangle = \begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix} \quad |01\rangle = \begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\end{bmatrix} \quad |10\rangle = \begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\end{bmatrix} \quad |11\rangle = \begin{bmatrix}0\\0\\0\\1\end{bmatrix}$$

两量子比特幺正变换矩阵的计算方法：

$$U = |\varphi_0\rangle\langle 00| + |\varphi_1\rangle\langle 01| + |\varphi_2\rangle\langle 10| + |\varphi_3\rangle\langle 11|$$

根据变换矩阵计算公式，有：

$$U_{CNOT} = |00\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 01| + |10\rangle\langle 10| + |01\rangle\langle 11|$$

$$= \begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix}\langle 00| + \begin{bmatrix}0\\0\\0\\1\end{bmatrix}\langle 01| + \begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\end{bmatrix}\langle 10| + \begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\end{bmatrix}\langle 11| = \begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&0&0&1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\end{bmatrix}$$

CNOT 门 - 矩阵计算 - 低位作为控制比特

根据公式 (倒过来看)：

$(|a\rangle\langle b|) \otimes (|c\rangle\langle d|) = (|a\rangle \otimes |c\rangle)(\langle b| \otimes \langle d|) = |ac\rangle\langle bd|$

$$
\begin{aligned}
U_{CNOT} &= |00\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 01| + |10\rangle\langle 10| + |01\rangle\langle 11| \\
&= |0\rangle\langle 0| \otimes |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 0| \otimes |1\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 1| \otimes |0\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| \otimes |1\rangle\langle 1| \\
&= (|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) \otimes |0\rangle\langle 0| + (|1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1|) \otimes |1\rangle\langle 1| \\
&= I \otimes |0\rangle\langle 0| + X \otimes |1\rangle\langle 1|
\end{aligned}
$$

CNOT 门 - 低位作为控制比特

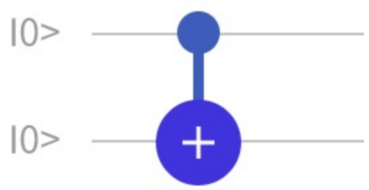
如果低位作为控制比特，则它的矩阵形式：

$$\mathrm{CNOT} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad \mathrm{CNOT\ CNOT} = \mathrm{I}$$

对应的 CNOT 门在线路中的显示：

A - Control

B - Target



A’

B’

CNOT 门 - 低位作为控制比特 – 计算例子

假设 CNOT 门分别作用于基态 $|\psi\rangle = |00\rangle$、$|01\rangle$、$|10\rangle$、$|11\rangle$，得到新的量子态为：

$$|\psi'\rangle = \mathrm{CNOT}\,|00\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = |00\rangle$$

$$|\psi'\rangle = \mathrm{CNOT}\,|01\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = |11\rangle$$

$$|\psi'\rangle = \mathrm{CNOT}\,|10\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = |10\rangle$$

$$|\psi'\rangle = \mathrm{CNOT}\,|11\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = |01\rangle$$

$$|00\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |01\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$|10\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad |11\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

SWAP 门 - 矩阵计算

SWAP门可以将 $|01\rangle$ 态变为 $|10\rangle$ ， $|10\rangle$ 变为 $|01\rangle$ ，量子态变换规律是：

Input A	Input B	Output A'	Output B'
$\|00\rangle$		$\|00\rangle$	
$\|01\rangle$		$\|10\rangle$	
$\|10\rangle$		$\|01\rangle$	
$\|11\rangle$		$\|11\rangle$	

$$|00\rangle = \begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix} \quad |01\rangle = \begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\end{bmatrix} \quad |10\rangle = \begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\end{bmatrix} \quad |11\rangle = \begin{bmatrix}0\\0\\0\\1\end{bmatrix}$$

两量子比特幺正变换矩阵的计算方法：

$$U = |\varphi_0\rangle\langle 00| + |\varphi_1\rangle\langle 01| + |\varphi_2\rangle\langle 10| + |\varphi_3\rangle\langle 11|$$

根据变换矩阵计算公式，有：

$$U_{SWAP} = |00\rangle\langle 00| + |10\rangle\langle 01| + |01\rangle\langle 10| + |11\rangle\langle 11|$$

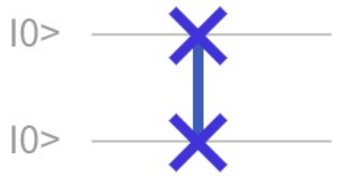
$$= \begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix}\langle 00| + \begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\end{bmatrix}\langle 01| + \begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\end{bmatrix}\langle 10| + \begin{bmatrix}0\\0\\0\\1\end{bmatrix}\langle 11| = \begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\0&0&0&1\end{bmatrix}$$

SWAP 门

SWAP门的矩阵形式：

$$\mathrm{SWAP} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

对应的 CNOT 门在线路中的显示：



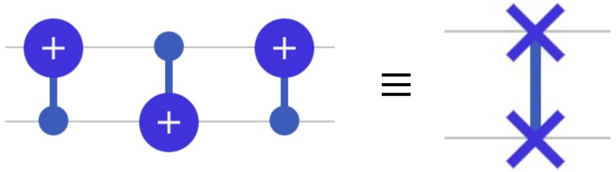
$$|\psi'\rangle = \mathrm{SWAP}\,|01\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = |10\rangle$$

$$|\psi'\rangle = \mathrm{SWAP}\,|10\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = |01\rangle$$

SWAP 门

SWAP 门性质：

$\text{SWAP}_{ij} = \text{CNOT}_{ij}\,\text{CNOT}_{ji}\,\text{CNOT}_{ij}$



$|00\rangle \rightarrow |00\rangle \rightarrow |00\rangle \rightarrow |00\rangle$
$|01\rangle \rightarrow |01\rangle \rightarrow |11\rangle \rightarrow |10\rangle$
$|10\rangle \rightarrow |11\rangle \rightarrow |01\rangle \rightarrow |01\rangle$
$|11\rangle \rightarrow |10\rangle \rightarrow |10\rangle \rightarrow |11\rangle$

低位为控制位 $\text{CNOT}_{ji} = I \otimes |0\rangle\langle 0| + X \otimes |1\rangle\langle 1|$
高位为控制位 $\text{CNOT}_{ij} = |0\rangle\langle 0| \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes X$

$$\text{SWAP}_{ij} = (|0\rangle\langle 0| \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes X)(I \otimes |0\rangle\langle 0| + X \otimes |1\rangle\langle 1|)(|0\rangle\langle 0| \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes X)$$

SWAP 门

$$\text{低位控制 CNOT} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad \text{低位控制 CNOT} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \qquad \text{SWAP} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

证明：

$$\begin{aligned} \mathrm{CNOT}_{ij}\,\mathrm{CNOT}_{ji}\,\mathrm{CNOT}_{ij} &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &= \mathrm{SWAP} \end{aligned}$$

iSWAP 门

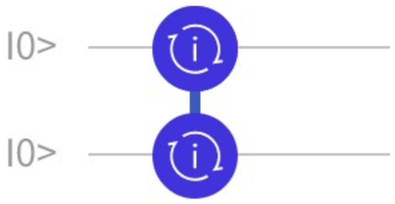
iSWAP门的主要作用是交换两个比特的状态，并且赋予其 π/2 的相位。
它是由 $\sigma_x \otimes \sigma_x + \sigma_y \otimes \sigma_y$ 作为生成元生成，需要将矩阵$\sigma_x \otimes \sigma_x + \sigma_y \otimes \sigma_y$ 对角化，它的矩阵形式：

$$\mathrm{iSWAP}(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\theta) & -isin(\theta) & 0 \\ 0 & -\mathrm{isin}(\theta) & \cos(\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

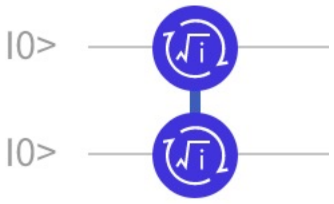
通常会用一个完整的翻转，即 θ = π/2 来指代iSWAP。当角度为iSWAP的一半，即 θ = π/4，称之为SQISWAP。对于iSWAP门而言，两个比特之间的地位是对等的，不存在控制与被控制的关系。

$$\mathrm{iSWAP} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad \mathrm{SQISWAP} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-i}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{-i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

iSWAP门在线路中的显示：



SQISWAP门在线路中的显示：

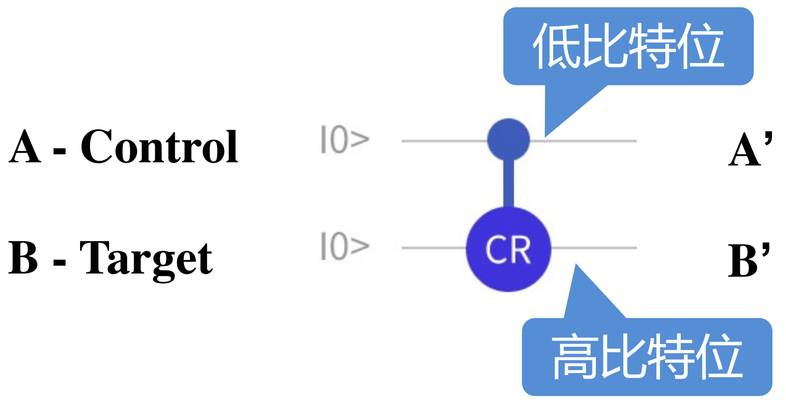


CR 门

控制相位门(Control phase gate) 和控制非门类似，通常用 CR（CPhase） 表示，它的矩阵形式：

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

对应的 CR 门在线路中的显示：



含实点的线路对应的量子比特为控制比特 (control qubit)，含CR的线路对应的量子比特为目标比特 (target qubit)。

当控制比特为|0⟩态时，目标比特不发生改变，当控制比特为|1⟩ 态时，对目标比特执行相转变门(phase-shift gate)，其特殊之处在于，控制相位门里交换控制比特和目标比特的角色，矩阵形式不会发生任何改变。

三量子比特逻辑门

U变换的表达式为：

$$U\,|000\rangle = |\varphi_0\rangle \qquad U\,|001\rangle = |\varphi_1\rangle$$
$$U\,|010\rangle = |\varphi_2\rangle \qquad U\,|011\rangle = |\varphi_3\rangle$$
$$U\,|100\rangle = |\varphi_4\rangle \qquad U\,|101\rangle = |\varphi_5\rangle$$
$$U\,|110\rangle = |\varphi_6\rangle \qquad U\,|111\rangle = |\varphi_7\rangle$$

两边分别同乘 $\langle 000|$, $\langle 001|$, $\langle 010|$, $\langle 011|$, $\langle 100|$, $\langle 101|$, $\langle 110|$, $\langle 111|$ 有：

$$U\,|000\rangle\langle 000| = |\varphi_0\rangle\langle 000| \qquad U\,|001\rangle\langle 001| = |\varphi_0\rangle\langle 001|$$
$$U\,|010\rangle\langle 010| = |\varphi_2\rangle\langle 010| \qquad U\,|011\rangle\langle 011| = |\varphi_3\rangle\langle 011|$$
$$U\,|100\rangle\langle 100| = |\varphi_4\rangle\langle 100| \qquad U\,|101\rangle\langle 101| = |\varphi_5\rangle\langle 101|$$
$$U\,|110\rangle\langle 110| = |\varphi_6\rangle\langle 110| \qquad U\,|111\rangle\langle 111| = |\varphi_7\rangle\langle 111|$$

上述公式左侧相加：

$$U\,|000\rangle\langle 000| + U\,|001\rangle\langle 001| + U\,|010\rangle\langle 010| + U\,|011\rangle\langle 011| + U\,|100\rangle\langle 100| + U\,|101\rangle\langle 101| + U\,|110\rangle\langle 110| + U\,|111\rangle\langle 111|$$
$$= U\,(|000\rangle\langle 000| + |001\rangle\langle 001| + |010\rangle\langle 010| + |011\rangle\langle 011| + |100\rangle\langle 100| + |101\rangle\langle 101| + |110\rangle\langle 110| + |111\rangle\langle 111|)$$

上述公式右侧相加：

$$|\varphi_0\rangle\langle 000| + |\varphi_1\rangle\langle 001| + |\varphi_2\rangle\langle 010| + |\varphi_3\rangle\langle 011| + |\varphi_4\rangle\langle 100| + |\varphi_5\rangle\langle 101| + |\varphi_6\rangle\langle 110| + |\varphi_7\rangle\langle 111|$$

三量子比特逻辑门

① $|000\rangle = \begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\\0\\0\\0\\0\end{bmatrix}$ $|001\rangle = \begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\\0\\0\\0\\0\end{bmatrix}$ $|010\rangle = \begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\\0\\0\\0\\0\end{bmatrix}$ $|011\rangle = \begin{bmatrix}0\\0\\0\\1\\0\\0\\0\\0\end{bmatrix}$ $|100\rangle = \begin{bmatrix}0\\0\\0\\0\\1\\0\\0\\0\end{bmatrix}$ $|101\rangle = \begin{bmatrix}0\\0\\0\\0\\0\\1\\0\\0\end{bmatrix}$ $|110\rangle = \begin{bmatrix}0\\0\\0\\0\\0\\0\\1\\0\end{bmatrix}$ $|111\rangle = \begin{bmatrix}0\\0\\0\\0\\0\\0\\0\\1\end{bmatrix}$

② $|000\rangle\langle000| + |001\rangle\langle001| + |010\rangle\langle010| + |011\rangle\langle011| + |100\rangle\langle100| + |101\rangle\langle101| + |110\rangle\langle110| + |111\rangle\langle111| = \mathrm{I}$

根据上面公式可得：

$\mathrm{U} = |\varphi_0\rangle\langle000| + |\varphi_1\rangle\langle001| + |\varphi_2\rangle\langle010| + |\varphi_3\rangle\langle011| + |\varphi_4\rangle\langle100| + |\varphi_5\rangle\langle101| + |\varphi_6\rangle\langle110| + |\varphi_7\rangle\langle111|$

三量子比特逻辑门 - 幺正变换矩阵的计算方法

量子态变换列表：

$|000\rangle \rightarrow |\varphi_0\rangle$ $|001\rangle \rightarrow |\varphi_1\rangle$

$|010\rangle \rightarrow |\varphi_2\rangle$ $|011\rangle \rightarrow |\varphi_3\rangle$

$|100\rangle \rightarrow |\varphi_4\rangle$ $|101\rangle \rightarrow |\varphi_5\rangle$

$|110\rangle \rightarrow |\varphi_6\rangle$ $|111\rangle \rightarrow |\varphi_7\rangle$

根据之前的计算，可得 U 变换的通用表达式为：

$$|\varphi_0\rangle\langle 000| + |\varphi_1\rangle\langle 001| + |\varphi_2\rangle\langle 010| + |\varphi_3\rangle\langle 011| + |\varphi_4\rangle\langle 100| + |\varphi_5\rangle\langle 101| + |\varphi_6\rangle\langle 110| + |\varphi_7\rangle\langle 111|$$

三量子比特幺正变换矩阵的计算方法：

$$U = |\varphi_0\rangle\langle 000| + |\varphi_1\rangle\langle 001| + |\varphi_2\rangle\langle 010| + |\varphi_3\rangle\langle 011| + |\varphi_4\rangle\langle 100| + |\varphi_5\rangle\langle 101| + |\varphi_6\rangle\langle 110| + |\varphi_7\rangle\langle 111|$$

将每个量子态变换前的对偶向量（如： $|000\rangle$ 的对偶向量为 $\langle 000|$ ）右乘变换后的量子态，然后相加。

Toffoli (CCNOT)- 矩阵计算

Toffoli门即CCNOT门，它涉及3个量子比特，两个控制比特，一个目标比特，两个高位都为1时 (高位为控制比特)，将低位量子态翻转，量子态变换规律是：

Input	Output
A B	A' B'
$\|000\rangle$	$\|000\rangle$
$\|001\rangle$	$\|001\rangle$
$\|010\rangle$	$\|010\rangle$
$\|011\rangle$	$\|011\rangle$
$\|100\rangle$	$\|100\rangle$
$\|101\rangle$	$\|101\rangle$
$\|110\rangle$	$\|111\rangle$
$\|111\rangle$	$\|110\rangle$

Toffoli (CCNOT)- 矩阵计算

三量子比特幺正变换矩阵的计算公式：

$$U = |\varphi_0\rangle\langle 000| + |\varphi_1\rangle\langle 001| + |\varphi_2\rangle\langle 010| + |\varphi_3\rangle\langle 011| + |\varphi_4\rangle\langle 100| + |\varphi_5\rangle\langle 101| + |\varphi_6\rangle\langle 110| + |\varphi_7\rangle\langle 111|$$

根据变换矩阵计算公式，有：

$$\begin{aligned} U_{CCNOT} &= |000\rangle\langle 000| + |001\rangle\langle 001| + |010\rangle\langle 010| + |011\rangle\langle 011| \\ &+ |100\rangle\langle 100| + |101\rangle\langle 101| + |111\rangle\langle 110| + |110\rangle\langle 111| \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

A B	A' B'
$\|000\rangle$	$\|000\rangle$
$\|001\rangle$	$\|001\rangle$
$\|010\rangle$	$\|010\rangle$
$\|011\rangle$	$\|011\rangle$
$\|100\rangle$	$\|100\rangle$
$\|101\rangle$	$\|101\rangle$
$\|110\rangle$	$\|111\rangle$
$\|111\rangle$	$\|110\rangle$

$$|000\rangle\langle 000| + |001\rangle\langle 001| + |010\rangle\langle 010| + |011\rangle\langle 011| + |100\rangle\langle 100| + |101\rangle\langle 101| + |110\rangle\langle 110| + |111\rangle\langle 111| = I$$

另有（证明略）：

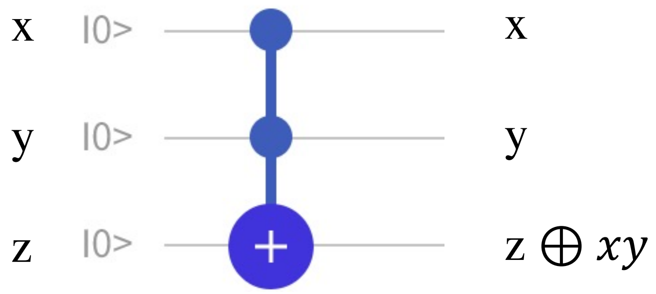
$$U_{CCNOT} = (|00\rangle\langle 00| + |01\rangle\langle 01| + |10\rangle\langle 10|) \otimes I + |11\rangle\langle 11| \otimes X$$

Toffoli（CCNOT）

Toffoli门，即CCNOT门的矩阵形式：

$$\text{Toffoli} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Toffoli门在线路中的显示：



(x, y, z) → (x, y, ($z \oplus xy$))

Toffoli (CCNOT) – 计算例子

假设 CCNOT 门分别作用于基态 $|\psi\rangle = |110\rangle$ 、 $|111\rangle$，得到新的量子态为：

$$\text{Toffoli}\,|110\rangle = \begin{bmatrix} 1&0&0&0&0&0&0&0 \\ 0&1&0&0&0&0&0&0 \\ 0&0&1&0&0&0&0&0 \\ 0&0&0&1&0&0&0&0 \\ 0&0&0&0&1&0&0&0 \\ 0&0&0&0&0&1&0&0 \\ 0&0&0&0&0&0&0&1 \\ 0&0&0&0&0&0&1&0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0\\0\\0\\0\\0\\0\\1\\0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0\\0\\0\\0\\0\\0\\0\\1 \end{bmatrix} = |111\rangle$$

$$\text{Toffoli}\,|111\rangle = \begin{bmatrix} 1&0&0&0&0&0&0&0 \\ 0&1&0&0&0&0&0&0 \\ 0&0&1&0&0&0&0&0 \\ 0&0&0&1&0&0&0&0 \\ 0&0&0&0&1&0&0&0 \\ 0&0&0&0&0&1&0&0 \\ 0&0&0&0&0&0&0&1 \\ 0&0&0&0&0&0&1&0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0\\0\\0\\0\\0\\0\\0\\1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0\\0\\0\\0\\0\\0\\1\\0 \end{bmatrix} = |110\rangle$$

Fredkin（CSWAP）- 矩阵计算

Fredkin门即CSWAP门，它涉及3个量子比特，一个控制比特，两个目标比特，高位为1时 (高位为控制比特)，将两个低位量子态交换，量子态变换规律是：

Input A B	Output A' B'
$\|000\rangle$	$\|000\rangle$
$\|001\rangle$	$\|001\rangle$
$\|010\rangle$	$\|010\rangle$
$\|011\rangle$	$\|011\rangle$
$\|100\rangle$	$\|100\rangle$
$\|101\rangle$	$\|110\rangle$
$\|110\rangle$	$\|101\rangle$
$\|111\rangle$	$\|111\rangle$

Fredkin （CSWAP）- 矩阵计算

三量子比特幺正变换矩阵的计算公式：

$$U = |\varphi_0\rangle\langle 000| + |\varphi_1\rangle\langle 001| + |\varphi_2\rangle\langle 010| + |\varphi_3\rangle\langle 011| + |\varphi_4\rangle\langle 100| + |\varphi_5\rangle\langle 101| + |\varphi_6\rangle\langle 110| + |\varphi_7\rangle\langle 111|$$

根据变换矩阵计算公式，有：

$$\begin{aligned}U_{\mathrm{CSWAP}} &= |000\rangle\langle 000| + |001\rangle\langle 001| + |010\rangle\langle 010| + |011\rangle\langle 011| \\ &\quad + |100\rangle\langle 100| + |101\rangle\langle 110| + |110\rangle\langle 101| + |111\rangle\langle 111| \\ &= \begin{bmatrix}1&0&0&0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0&0&0\\0&0&0&1&0&0&0&0\\0&0&0&0&1&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&1&0\\0&0&0&0&0&1&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&1\end{bmatrix}\end{aligned}$$

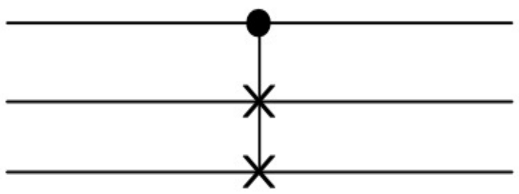
A B	A' B'
$\|000\rangle$	$\|000\rangle$
$\|001\rangle$	$\|001\rangle$
$\|010\rangle$	$\|010\rangle$
$\|011\rangle$	$\|011\rangle$
$\|100\rangle$	$\|100\rangle$
$\|101\rangle$	$\|110\rangle$
$\|110\rangle$	$\|101\rangle$
$\|111\rangle$	$\|111\rangle$

Fredkin（CSWAP）

Fredkin门的矩阵形式：

$$\text{Fredkin}=\begin{bmatrix}1&0&0&0&0&0&0&0\\0&1&0&0&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0&0&0\\0&0&0&1&0&0&0&0\\0&0&0&0&1&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&1&0\\0&0&0&0&0&1&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&1\end{bmatrix}$$

Fredkin 门在线路中的显示：



Fredkin（CSWAP）– 计算例子

假设 CSWAP 门分别作用于基态 $|\psi\rangle = |110\rangle$ 、 $|101\rangle$，得到新的量子态为：

$$\text{Fredkin}\,|110\rangle = \begin{bmatrix} 1&0&0&0&0&0&0&0\\ 0&1&0&0&0&0&0&0\\ 0&0&1&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&1&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&1&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&0&1&0\\ 0&0&0&0&0&1&0&0\\ 0&0&0&0&0&0&0&1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\0\\0\\0\\0\\0\\1\\0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0\\0\\0\\0\\0\\1\\0\\0\end{bmatrix} = |101\rangle$$

$$\text{Toffoli}\,|101\rangle = \begin{bmatrix} 1&0&0&0&0&0&0&0\\ 0&1&0&0&0&0&0&0\\ 0&0&1&0&0&0&0&0\\ 0&0&0&1&0&0&0&0\\ 0&0&0&0&1&0&0&0\\ 0&0&0&0&0&0&1&0\\ 0&0&0&0&0&1&0&0\\ 0&0&0&0&0&0&0&1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\0\\0\\0\\0\\1\\0\\0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0\\0\\0\\0\\0\\0\\1\\0\end{bmatrix} = |110\rangle$$

Thank You