4.2 单量子比特运算——习题与解答

DanX, Yuchen He*

练习 4.1. *练习 2.11 计算了 Pauli 矩阵的特征向量（若未做请先做）。在 Bloch 球面上求出不同 Pauli 矩阵的归一化特征向量对应的点。*

解答. **目标：** 求 X, Y, Z 的本征向量并把这些归一化态定位到 Bloch 球上。

Bloch 球回顾： 任意单比特纯态可写为

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle,$$

其 Bloch 向量为

$$\vec{r} = (\sin\theta\cos\phi,\ \sin\theta\sin\phi,\ \cos\theta) \in \mathbb{R}^3, \quad \|\vec{r}\| = 1.$$

(1) Z 的本征向量：

$$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad Z|0\rangle = +|0\rangle, \quad Z|1\rangle = -|1\rangle.$$

故 $+1$ 本征态为 $|0\rangle$（北极，$\vec{r} = +\hat{z}$），-1 本征态为 $|1\rangle$（南极，$\vec{r} = -\hat{z}$）。

(2) X 的本征向量：

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad |\pm_x\rangle = \frac{|0\rangle \pm |1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad X|\pm_x\rangle = \pm|\pm_x\rangle.$$

将 $|+_x\rangle$ 与通式对比得 $\theta = \frac{\pi}{2}, \phi = 0 \Rightarrow \vec{r} = +\hat{x}$；$|-_x\rangle$ 得 $\theta = \frac{\pi}{2}, \phi = \pi \Rightarrow \vec{r} = -\hat{x}$。

(3) Y 的本征向量：

$$Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad |\pm_y\rangle = \frac{|0\rangle \pm i|1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad Y|\pm_y\rangle = \pm|\pm_y\rangle.$$

$|+_y\rangle$ 对应 $\theta = \frac{\pi}{2}, \phi = \frac{\pi}{2} \Rightarrow \vec{r} = +\hat{y}$；$|-_y\rangle$ 对应 $\theta = \frac{\pi}{2}, \phi = \frac{3\pi}{2} \Rightarrow \vec{r} = -\hat{y}$。

结论： 三个 Pauli 矩阵的 ±1 本征态分别位于 Bloch 球的六个极点

$$\{\pm\hat{x},\ \pm\hat{y},\ \pm\hat{z}\},$$

即

$$|\pm_x\rangle \leftrightarrow \pm\hat{x}, \quad |\pm_y\rangle \leftrightarrow \pm\hat{y}, \quad |0\rangle, |1\rangle \leftrightarrow \pm\hat{z}.$$

（本征向量相差全局相位表示同一 Bloch 球点。） □

*heyuchen@tgqs.net

练习 4.2. 令 $x \in \mathbb{R}$，A 为矩阵且满足 $A^2 = I$。证明

$$\exp(iAx) = \cos(x)I + i\sin(x)A.$$

并用此验证

$$R_x(\theta) \equiv e^{i\theta X/2} = \cos\frac{\theta}{2}I - i\sin\frac{\theta}{2}X,$$
$$R_y(\theta) \equiv e^{i\theta Y/2} = \cos\frac{\theta}{2}I - i\sin\frac{\theta}{2}Y,$$
$$R_z(\theta) \equiv e^{i\theta Z/2} = \cos\frac{\theta}{2}I - i\sin\frac{\theta}{2}Z.$$

解答. 幂级数分组法：

$$e^{iAx} = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(iAx)^k}{k!} = \sum_{m=0}^{\infty}\frac{(iAx)^{2m}}{(2m)!} + \sum_{m=0}^{\infty}\frac{(iAx)^{2m+1}}{(2m+1)!}.$$

因 $A^2 = I$ 有 $A^{2m} = I$，$A^{2m+1} = A$，于是

$$\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(iAx)^{2m}}{(2m)!} = \sum_{m=0}^{\infty}\frac{(i^2)^m x^{2m}}{(2m)!}\,I = \cos x\,I,$$

$$\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(iAx)^{2m+1}}{(2m+1)!} = \sum_{m=0}^{\infty}\frac{(i^2)^m\,i\,x^{2m+1}}{(2m+1)!}\,A = i\sin x\,A.$$

两式相加得

$$e^{iAx} = \cos x\,I + i\sin x\,A\,.$$

旋转门闭式（取 $x = \theta/2$）：

$$e^{i\frac{\theta}{2}X} = \cos\frac{\theta}{2}\,I + i\sin\frac{\theta}{2}\,X, \quad e^{i\frac{\theta}{2}Y} = \cos\frac{\theta}{2}\,I + i\sin\frac{\theta}{2}\,Y, \quad e^{i\frac{\theta}{2}Z} = \cos\frac{\theta}{2}\,I + i\sin\frac{\theta}{2}\,Z.$$

（若采用量子计算常用定义 $R_{\hat n}(\theta) := e^{-i\frac{\theta}{2}\hat n\cdot\vec\sigma}$，则右端的 $+i$ 全变为 $-i$。） □

练习 4.3. 证明除一个全局相位外，$\pi/8$ 门满足 $T = R_z(\pi/4)$。

解答. 目标：证明 T 门与 $R_z(\pi/4)$ 仅差一个全局相位，即

$$T \;=\; e^{i\pi/8}\,R_z\!\left(\frac{\pi}{4}\right).$$

两种常见定义（先约定符号）：量子计算里最常用的 z 轴旋转定义为

$$R_z(\theta) \;:=\; e^{-i\,\frac{\theta}{2}\,Z} \;=\; \mathrm{diag}\big(e^{-i\theta/2},\, e^{i\theta/2}\big)\,.$$

步骤 1：写出 T 与 $R_z(\pi/4)$ 的矩阵。
按定义

$$T = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & e^{i\pi/4}\end{pmatrix}, \qquad R_z\!\left(\frac{\pi}{4}\right) = \mathrm{diag}\big(e^{-i\pi/8},\, e^{i\pi/8}\big)\,.$$

步骤 2：提取全局相位。
把 $R_z(\pi/4)$ 右乘上一个全局相位 $e^{i\pi/8}$：

$$e^{i\pi/8}R_z\!\left(\frac{\pi}{4}\right) = \mathrm{diag}\big(e^{i\pi/8}e^{-i\pi/8},\; e^{i\pi/8}e^{i\pi/8}\big) = \mathrm{diag}\big(1,\; e^{i\pi/4}\big) = T.$$

因此 $T = e^{i\pi/8} R_z(\pi/4)$，两者仅差一个全局相位 $e^{i\pi/8}$。

结论：在标准约定 $R_z(\theta) = e^{-i\theta Z/2}$ 下，

$$T = e^{i\pi/8}\, R_z(\pi/4)$$

两者物理等价（仅差全局相位）。 □

练习 4.4. 对某个 φ，将 *Hadamard* 门表示为旋转算符 R_x, R_z 以及 $e^{i\varphi}$ 的乘积。给出正确的 φ 值。

解答. **思路：**利用单比特酉的 ZXZ 分解。任意单量子比特酉算符都可写成

$$U = e^{i\varphi} R_z(\beta) R_x(\gamma) R_z(\delta),$$

其中 $R_z(\theta) = e^{-i\theta Z/2}$、$R_x(\theta) = e^{-i\theta X/2}$。对 Hadamard 门 H，我们先写出一般的 $R_z(\beta)R_x(\gamma)R_z(\delta)$ 的矩阵形式，再与 H 逐项比较求出 $\varphi, \beta, \gamma, \delta$，从而得到题目中给出的那种分解，并确定 φ。

步骤 1：写出一般 $R_z(\beta)R_x(\gamma)R_z(\delta)$ 矩阵。

在约定 $R_z(\theta) = e^{-i\theta Z/2}$、$R_x(\theta) = e^{-i\theta X/2}$ 下，

$$R_z(\beta) = \begin{pmatrix} e^{-i\beta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\beta/2} \end{pmatrix}, \qquad R_z(\delta) = \begin{pmatrix} e^{-i\delta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\delta/2} \end{pmatrix},$$

$$R_x(\gamma) = \cos\frac{\gamma}{2}\, I - i\sin\frac{\gamma}{2}\, X = \begin{pmatrix} \cos\frac{\gamma}{2} & -i\sin\frac{\gamma}{2} \\ -i\sin\frac{\gamma}{2} & \cos\frac{\gamma}{2} \end{pmatrix}.$$

直接相乘得到

$$R_z(\beta)R_x(\gamma)R_z(\delta) = \begin{pmatrix} e^{-i(\beta+\delta)/2}\cos\frac{\gamma}{2} & -i\, e^{-i(\beta-\delta)/2}\sin\frac{\gamma}{2} \\ -i\, e^{i(\beta-\delta)/2}\sin\frac{\gamma}{2} & e^{i(\beta+\delta)/2}\cos\frac{\gamma}{2} \end{pmatrix}.$$

于是

$$U(\beta,\gamma,\delta) := e^{i\varphi} R_z(\beta)R_x(\gamma)R_z(\delta) = e^{i\varphi} \begin{pmatrix} e^{-i(\beta+\delta)/2}\cos\frac{\gamma}{2} & -i\, e^{-i(\beta-\delta)/2}\sin\frac{\gamma}{2} \\ -i\, e^{i(\beta-\delta)/2}\sin\frac{\gamma}{2} & e^{i(\beta+\delta)/2}\cos\frac{\gamma}{2} \end{pmatrix}.$$

步骤 2：与 Hadamard 门比较模长，确定 γ。

Hadamard 门为

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix},$$

四个矩阵元的模长都为 $1/\sqrt{2}$。相比之下，

$$|U_{11}| = |U_{22}| = \left|\cos\frac{\gamma}{2}\right|, \qquad |U_{12}| = |U_{21}| = \left|\sin\frac{\gamma}{2}\right|.$$

要与 H 匹配，必须有

$$\left|\cos\frac{\gamma}{2}\right| = \left|\sin\frac{\gamma}{2}\right| = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

因此可以取

$$\gamma = \frac{\pi}{2} \quad (\text{模}2\pi).$$

代入 $\gamma = \pi/2$，有

$$R_z(\beta)R_x\Big(\frac{\pi}{2}\Big)R_z(\delta) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{-i(\beta+\delta)/2} & -i\,e^{-i(\beta-\delta)/2} \\ -i\,e^{i(\beta-\delta)/2} & e^{i(\beta+\delta)/2} \end{pmatrix}.$$

步骤 3：比对相位，解出 β, δ, φ。

设

$$H = e^{i\varphi} R_z(\beta)R_x\Big(\frac{\pi}{2}\Big)R_z(\delta),$$

逐个比较矩阵元：

从 $(1,1)$ 元素得到

$$\frac{1}{\sqrt{2}} = e^{i\varphi}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i(\beta+\delta)/2} \quad\Rightarrow\quad 1 = e^{i\varphi}e^{-i(\beta+\delta)/2}. \tag{1}$$

从 $(1,2)$ 元素得到

$$\frac{1}{\sqrt{2}} = e^{i\varphi}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\big(-i\,e^{-i(\beta-\delta)/2}\big) \quad\Rightarrow\quad 1 = e^{i\varphi}\big(-i\,e^{-i(\beta-\delta)/2}\big). \tag{2}$$

用 (2) 式除以 (1) 式，消去 $e^{i\varphi}$：

$$\frac{1}{1} = \frac{-i\,e^{-i(\beta-\delta)/2}}{e^{-i(\beta+\delta)/2}} = -i\,e^{i\delta} \quad\Rightarrow\quad -i\,e^{i\delta} = 1 \quad\Rightarrow\quad e^{i\delta} = i \quad\Rightarrow\quad \delta = \frac{\pi}{2}\ (\text{模}2\pi).$$

类似地，可以用 $(2,2)$ 与 $(1,1)$ 的比值求出

$$\beta = \frac{\pi}{2}\ (\text{模}2\pi).$$

最后，将 $\beta = \delta = \pi/2$ 代回 (1) 式：

$$1 = e^{i\varphi}e^{-i(\beta+\delta)/2} = e^{i\varphi}e^{-i(\pi/2+\pi/2)/2} = e^{i\varphi}e^{-i\pi/2},$$

从而

$$e^{i\varphi} = e^{i\pi/2} \quad\Rightarrow\quad \varphi = \frac{\pi}{2}\ (\text{模}2\pi).$$

步骤 4：整理结果。

综上，可取

$$\beta = \gamma = \delta = \frac{\pi}{2}, \qquad \varphi = \frac{\pi}{2},$$

于是

$$H = e^{i\pi/2}\,R_z\Big(\frac{\pi}{2}\Big)\,R_x\Big(\frac{\pi}{2}\Big)\,R_z\Big(\frac{\pi}{2}\Big).$$

题目所问的 φ 即为

$$\varphi = \frac{\pi}{2}.$$

□

练习 4.5. 证明 $(\hat{n}\cdot\vec{\sigma})^2 = I$，并以此验证式 *(4.8)*：

$$R_{\hat{n}}(\theta) = \cos\frac{\theta}{2}I - i\sin\frac{\theta}{2}(n_xX + n_yY + n_zZ),$$

其中 $\hat{n} = (n_x, n_y, n_z)$ 为单位向量，$\vec{\sigma} = (X, Y, Z)$。

解答. 利用 Pauli 代数 $X^2 = Y^2 = Z^2 = I$、$XY = -YX = iZ$ 等得

$$(\hat{n}\cdot\vec{\sigma})^2 = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)I = I.$$

于是

$$e^{-i\frac{\theta}{2}\hat{n}\cdot\vec{\sigma}} = \sum_{m\geq 0}\frac{(-i\theta/2)^{2m}}{(2m)!}I + \sum_{m\geq 0}\frac{(-i\theta/2)^{2m+1}}{(2m+1)!}(\hat{n}\cdot\vec{\sigma}) = \cos\frac{\theta}{2}I - i\sin\frac{\theta}{2}\,\hat{n}\cdot\vec{\sigma}.$$

□

练习 4.6 (旋转 Bloch 球面的解释). *设单比特态的 Bloch 向量为 $\vec{\lambda}$。证明 $R_{\hat{n}}(\theta)$ 的作用等价于将 $\vec{\lambda}$ 绕 $\hat{n}$ 轴旋转角 θ，并证明分解*

$$R_{\hat{n}}(\theta) = R_z(\varphi_{\hat{n}})R_y(\theta_{\hat{n}})R_z(\theta)R_y(-\theta_{\hat{n}})R_z(-\varphi_{\hat{n}}),$$

其中 $(\theta_{\hat{n}},\varphi_{\hat{n}})$ 为 $\hat{n}$ 的球坐标。

解答. **思路：**先把任意单比特态写成 Bloch 向量形式

$$\rho = \frac{1}{2}\big(I + \vec{\lambda}\cdot\vec{\sigma}\big),$$

直接用 Pauli 乘法公式计算 $R_{\hat{n}}(\theta)(\vec{\lambda}\cdot\vec{\sigma})R_{\hat{n}}(\theta)^\dagger$ 得到新的向量 $\vec{\lambda}'$，再检查它是否就是三维空间中绕 $\hat{n}$ 轴旋转 θ 的罗德里格公式。第二步用“先把 z 轴对齐到 $\hat{n}$，绕 z 转，再旋回去”的几何图像给出分解式。

(1) $R_{\hat{n}}(\theta)$ 在 Bloch 球上就是绕 $\hat{n}$ 的旋转。

由前一题可写

$$R_{\hat{n}}(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}\hat{n}\cdot\vec{\sigma}} = \cos\frac{\theta}{2}I - i\sin\frac{\theta}{2}\,\hat{n}\cdot\vec{\sigma},$$

记

$$c := \cos\frac{\theta}{2}, \qquad s := \sin\frac{\theta}{2},$$

则

$$R_{\hat{n}}(\theta) = cI - is\,\hat{n}\cdot\vec{\sigma}, \qquad R_{\hat{n}}(\theta)^\dagger = cI + is\,\hat{n}\cdot\vec{\sigma}.$$

任意单比特态写成

$$\rho = \frac{1}{2}\big(I + \vec{\lambda}\cdot\vec{\sigma}\big), \qquad \vec{\lambda} = (\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z).$$

作用酉变换

$$\rho' = R_{\hat{n}}(\theta)\,\rho\,R_{\hat{n}}(\theta)^\dagger = \frac{1}{2}\Big(I + \vec{\lambda}'\cdot\vec{\sigma}\Big),$$

其中

$$\vec{\lambda}'\cdot\vec{\sigma} = R_{\hat{n}}(\theta)(\vec{\lambda}\cdot\vec{\sigma})R_{\hat{n}}(\theta)^\dagger.$$

直接展开：

$$\begin{aligned}
R_{\hat{n}}(\theta)(\vec{\lambda}\cdot\vec{\sigma})R_{\hat{n}}(\theta)^\dagger &= (cI - is\,\hat{n}\cdot\vec{\sigma})(\vec{\lambda}\cdot\vec{\sigma})(cI + is\,\hat{n}\cdot\vec{\sigma}) \\
&= c^2(\vec{\lambda}\cdot\vec{\sigma}) + ics\big[(\vec{\lambda}\cdot\vec{\sigma})(\hat{n}\cdot\vec{\sigma}) - (\hat{n}\cdot\vec{\sigma})(\vec{\lambda}\cdot\vec{\sigma})\big] \\
&\quad + s^2(\hat{n}\cdot\vec{\sigma})(\vec{\lambda}\cdot\vec{\sigma})(\hat{n}\cdot\vec{\sigma}).
\end{aligned}$$

利用 Pauli 乘法公式

$$(\hat{a}\cdot\vec{\sigma})(\hat{b}\cdot\vec{\sigma}) = (\hat{a}\cdot\hat{b})\,I + i(\hat{a}\times\hat{b})\cdot\vec{\sigma},$$

可得
$$(\vec{\lambda}\cdot\vec{\sigma})(\hat{n}\cdot\vec{\sigma})-(\hat{n}\cdot\vec{\sigma})(\vec{\lambda}\cdot\vec{\sigma})=2i(\vec{\lambda}\times\hat{n})\cdot\vec{\sigma},$$
以及标准恒等式
$$(\hat{n}\cdot\vec{\sigma})(\vec{\lambda}\cdot\vec{\sigma})(\hat{n}\cdot\vec{\sigma})=\big(2(\hat{n}\cdot\vec{\lambda})\hat{n}-\vec{\lambda}\big)\cdot\vec{\sigma}.$$

代回上式并整理，得到
$$R_{\hat{n}}(\theta)(\vec{\lambda}\cdot\vec{\sigma})R_{\hat{n}}(\theta)^{\dagger}=\Big[\vec{\lambda}(c^2-s^2)-2cs(\vec{\lambda}\times\hat{n})+2s^2(\hat{n}\cdot\vec{\lambda})\hat{n}\Big]\cdot\vec{\sigma}.$$

又有
$$c^2-s^2=\cos\theta,\qquad 2cs=\sin\theta,\qquad 2s^2=1-\cos\theta,$$
于是
$$\vec{\lambda}'=\vec{\lambda}\cos\theta+(\hat{n}\times\vec{\lambda})\sin\theta+\hat{n}(\hat{n}\cdot\vec{\lambda})(1-\cos\theta).$$

这正是三维空间中绕轴 $\hat{n}$ 旋转角 θ 的罗德里格（Rodrigues）公式。因此 $R_{\hat{n}}(\theta)$ 在 Bloch 球上的作用，恰好就是把 Bloch 向量 $\vec{\lambda}$ 绕 $\hat{n}$ 轴旋转角 θ。

(2) 分解式 $R_{\hat{n}}(\theta)=R_z(\varphi_{\hat{n}})R_y(\theta_{\hat{n}})R_z(\theta)R_y(-\theta_{\hat{n}})R_z(-\varphi_{\hat{n}})$。

把单位向量 $\hat{n}$ 写成球坐标
$$\hat{n}=(\sin\theta_{\hat{n}}\cos\varphi_{\hat{n}},\,\sin\theta_{\hat{n}}\sin\varphi_{\hat{n}},\,\cos\theta_{\hat{n}}).$$

在 Bloch 球上，先绕 z 轴旋转 $\varphi_{\hat{n}}$，再绕 y 轴旋转 $\theta_{\hat{n}}$，可以把“北极” $\hat{z}$ 旋到 $\hat{n}$：
$$\mathrm{Rot}_y(\theta_{\hat{n}})\,\mathrm{Rot}_z(\varphi_{\hat{n}})\,\hat{z}=\hat{n}.$$
对应到量子门就是
$$U:=R_z(\varphi_{\hat{n}})R_y(\theta_{\hat{n}}).$$

几何上，绕 $\hat{n}$ 轴的旋转可以“搬到 z 轴—绕 z 转—再搬回来”：
$$\mathrm{Rot}_{\hat{n}}(\theta)=U\,\mathrm{Rot}_z(\theta)\,U^{-1}.$$

利用上面第 (1) 问的结果：对任意向量 $\vec{a}$ 都有
$$U(\vec{a}\cdot\vec{\sigma})U^{\dagger}=(\mathrm{Rot}_U\,\vec{a})\cdot\vec{\sigma},$$
从而
$$e^{-i\frac{\theta}{2}\hat{n}\cdot\vec{\sigma}}=U\,e^{-i\frac{\theta}{2}Z}\,U^{\dagger}=R_z(\varphi_{\hat{n}})R_y(\theta_{\hat{n}})R_z(\theta)R_y(-\theta_{\hat{n}})R_z(-\varphi_{\hat{n}}).$$

在本节中我们记 $R_{\hat{n}}(\theta):=e^{-i\frac{\theta}{2}\hat{n}\cdot\vec{\sigma}}$，于是就得到所需的分解式
$$R_{\hat{n}}(\theta)=R_z(\varphi_{\hat{n}})R_y(\theta_{\hat{n}})R_z(\theta)R_y(-\theta_{\hat{n}})R_z(-\varphi_{\hat{n}}).$$

□

练习 4.7. *证明* $XYX=-Y$，*并以此证明* $XR_y(\theta)X=R_y(-\theta)$。

解答. 第一步：证明 $XYX=-Y$。

利用 Pauli 矩阵的显式形式：
$$X=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad Y=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\quad Z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}.$$

首先计算 XY：

$$XY = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = iZ.$$

接下来计算 $XYX = (XY)X = i(ZX)$。我们需要先算出 ZX：

$$ZX = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

注意到 iY 的值为：

$$iY = i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

可以看出 $ZX = iY$。将此结果代回前式：

$$XYX = i(ZX) = i(iY) = i^2 Y = -Y.$$

（注：也可利用反对易关系 $\{X, Y\} = 0$ 直接得到 $XYX = -YXX = -Y$）。

第二步：证明 $XR_y(\theta)X = R_y(-\theta)$。

根据定义 $R_y(\theta) = e^{-i\theta Y/2}$，利用 Euler 公式展开：

$$R_y(\theta) = \cos\frac{\theta}{2} I - i \sin\frac{\theta}{2} Y.$$

在等式两边同时作用 X（即计算共轭）：

$$\begin{aligned} XR_y(\theta)X &= X \left(\cos\frac{\theta}{2} I - i\sin\frac{\theta}{2} Y \right) X \\ &= \cos\frac{\theta}{2}(XIX) - i\sin\frac{\theta}{2}(XYX) \\ &= \cos\frac{\theta}{2} I - i\sin\frac{\theta}{2}(-Y) \quad (\text{利用第一步结论} XYX = -Y) \\ &= \cos\frac{\theta}{2} I + i\sin\frac{\theta}{2} Y. \end{aligned}$$

另一方面，对于 $R_y(-\theta)$：

$$\begin{aligned} R_y(-\theta) &= \cos\left(-\frac{\theta}{2}\right) I - i\sin\left(-\frac{\theta}{2}\right) Y \\ &= \cos\frac{\theta}{2} I + i\sin\frac{\theta}{2} Y. \end{aligned}$$

对比上述两式，得证：

$$XR_y(\theta)X = R_y(-\theta).$$

□

练习 4.8. *任意单量子比特上的酉算符可以表示为 $U = \exp(i\alpha)R_{\hat{n}}(\theta)$。(1) 证明该事实；(2) 求 $\alpha, \theta, \hat{n}$ 使其成为 H；(3) 求使其成为 S。*

解答. (1) 任意单比特酉 U 的轴角分解。

令 $U \in U(2)$。因为 $\det U$ 为模长 1 的复数，可写成

$$\det U = e^{i\phi}.$$

取 $\alpha = \phi/2$，定义

$$V := e^{-i\alpha} U,$$

则

$$\det V = e^{-i2\alpha}\det U = 1,$$

即 $V \in SU(2)$，从而

$$U = e^{i\alpha}V.$$

对 $V \in SU(2)$，其本征值为模长为 1 且乘积为 1 的两数，只能形如

$$\lambda_1 = e^{-i\theta/2}, \quad \lambda_2 = e^{i\theta/2}$$

（某个实数 θ）。由于 V 可酉对角化，存在酉矩阵 W 使得

$$V = W\begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2}\end{pmatrix}W^\dagger = We^{-i\frac{\theta}{2}Z}W^\dagger.$$

记 $\hat{n}\cdot\vec{\sigma} := WZW^\dagger$，则 $(\hat{n}\cdot\vec{\sigma})^2 = I$，可写成

$$\hat{n}\cdot\vec{\sigma} = n_xX + n_yY + n_zZ,$$

其中 $\hat{n} = (n_x, n_y, n_z)$ 为单位向量。于是

$$V = e^{-i\frac{\theta}{2}\hat{n}\cdot\vec{\sigma}} =: R_{\hat{n}}(\theta),$$

从而

$$U = e^{i\alpha}V = e^{i\alpha}R_{\hat{n}}(\theta).$$

这就证明了任意单量子比特酉算符都可以写成 $U = e^{i\alpha}R_{\hat{n}}(\theta)$。

(2) 取出 H 的 $\alpha, \theta, \hat{n}$。

Hadamard 门为

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1\end{pmatrix}, \qquad \det H = -1 = e^{i\pi}.$$

对 $U = e^{i\alpha}R_{\hat{n}}(\theta)$，有 $\det U = e^{i2\alpha}$，要满足 $\det U = \det H$，取

$$2\alpha = \pi \ (\text{模}2\pi) \quad \Rightarrow \quad \alpha = \frac{\pi}{2}.$$

令 $V := e^{-i\alpha}H = -iH$，则 $V \in SU(2)$。又由于

$$\mathrm{Tr}(R_{\hat{n}}(\theta)) = 2\cos(\theta/2), \quad \mathrm{Tr}(V) = \mathrm{Tr}(-iH) = 0,$$

可知

$$\cos\frac{\theta}{2} = 0 \quad \Rightarrow \quad \theta = \pi \ (\text{模}2\pi).$$

此时

$$R_{\hat{n}}(\pi) = \cos\frac{\pi}{2}I - i\sin\frac{\pi}{2}\,\hat{n}\cdot\vec{\sigma} = -i\,\hat{n}\cdot\vec{\sigma}.$$

由 $V = R_{\hat{n}}(\pi)$ 得

$$-i\,\hat{n}\cdot\vec{\sigma} = -iH \quad \Rightarrow \quad \hat{n}\cdot\vec{\sigma} = H.$$

另一方面

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0\end{pmatrix}, \quad Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1\end{pmatrix}, \quad X + Z = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1\end{pmatrix},$$

故
$$H = \frac{1}{\sqrt{2}}(X+Z) = \frac{1}{\sqrt{2}}X + \frac{1}{\sqrt{2}}Z.$$
于是可以取
$$\hat{n} = \Big(\frac{1}{\sqrt{2}},\, 0,\, \frac{1}{\sqrt{2}}\Big),$$
从而
$$H = e^{i\pi/2} R_{\hat{n}}(\pi).$$

(3) 取出 S 的 $\alpha, \theta, \hat{n}$。

相移门
$$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}, \qquad \det S = i = e^{i\pi/2}.$$
同理令 $2\alpha = \pi/2$，可取 $\alpha = \pi/4$。记 $V := e^{-i\alpha}S$，则 $V \in SU(2)$。另一方面
$$R_z(\theta) = e^{-i\theta Z/2} = \mathrm{diag}\big(e^{-i\theta/2}, e^{i\theta/2}\big),$$
取 $\theta = \pi/2$ 得
$$R_z\Big(\frac{\pi}{2}\Big) = \mathrm{diag}\big(e^{-i\pi/4}, e^{i\pi/4}\big),$$
并有
$$e^{i\pi/4} R_z\Big(\frac{\pi}{2}\Big) = \mathrm{diag}(1, e^{i\pi/2}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = S.$$
因此
$$S = e^{i\pi/4} R_z(\pi/2),$$
即
$$\alpha = \frac{\pi}{4}, \quad \theta = \frac{\pi}{2}, \quad \hat{n} = \hat{z} = (0,0,1).$$

□

练习 4.9. 解释为什么任意单量子比特酉算符可以写成
$$U = e^{i\alpha} R_z(\beta) R_y(\gamma) R_z(\delta).$$

解答. 思路： 利用前面两条结论：

(1) 4.8 已知任意单量子比特酉算符 U 都可以写成
$$U = e^{i\alpha} R_{\hat{n}}(\theta),$$
其中 $R_{\hat{n}}(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}\hat{n}\cdot\vec{\sigma}}$ 是绕 Bloch 球上某个单位向量 $\hat{n}$ 的旋转；

(2) 4.6 已知 $R_{\hat{n}}(\theta)$ 在 Bloch 球上的作用，正好就是三维空间里绕轴 $\hat{n}$ 旋转角 θ。

因此，去掉全局相位后，任意单比特酉算符与三维空间的某个刚体旋转一一对应（SU(2) 与 SO(3) 的对应）。

欧拉角（ZYZ）分解：

三维几何中的欧拉定理告诉我们：任意三维旋转都可以分解成
$$\mathrm{Rot} = \mathrm{Rot}_z(\beta)\,\mathrm{Rot}_y(\gamma)\,\mathrm{Rot}_z(\delta)$$

的形式（ZYZ 欧拉角分解），其中 $\mathrm{Rot}_z, \mathrm{Rot}_y$ 分别是绕 z, y 轴的旋转。

在单量子比特上，$\mathrm{Rot}_z(\cdot)$、$\mathrm{Rot}_y(\cdot)$ 分别对应门

$$R_z(\cdot) = e^{-i(\cdot)Z/2}, \qquad R_y(\cdot) = e^{-i(\cdot)Y/2},$$

两者在 Bloch 球上产生的旋转正是对应的 $\mathrm{Rot}_z, \mathrm{Rot}_y$。因此，对某个态的 Bloch 向量先作用 $R_z(\beta)$ 再 $R_y(\gamma)$ 再 $R_z(\delta)$，得到的三维旋转就是上式中的 $\mathrm{Rot}_z(\beta)\mathrm{Rot}_y(\gamma)\mathrm{Rot}_z(\delta)$。

于是，对任意无全局相位的单比特酉 V，存在实数 β, γ, δ 使得

$$V \sim R_z(\beta)R_y(\gamma)R_z(\delta),$$

两者至多相差一个全局相位 $e^{i\alpha}$（这种相位对物理态无影响）。

再把这部分相位写出来，就得到

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

从而说明任意单量子比特酉都可以写成题目给出的 ZYZ 分解形式。 □

练习 4.10 (x-y **分解**). *用 R_x 代替 R_z，给出相应于定理 4.1 的分解（并说明理由）。*

解答. 定理 4.1 已说明：任意单量子比特酉算符 U 可写为

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

这对应 Bloch 球上任意三维旋转都可以写成 ZYZ 的欧拉角分解。

在三维空间中，x, y, z 三个坐标轴是对称的：如果把整个坐标系绕 y 轴旋转 $-\pi/2$，则原来的 z 轴被转到 x 轴方向。于是，在新的坐标系中，"绕 z 轴旋转" 的分解

$$\mathrm{Rot}_z(\beta)\,\mathrm{Rot}_y(\gamma)\,\mathrm{Rot}_z(\delta)$$

就变成了 "绕 x 轴、再绕 y 轴、再绕 x 轴" 的分解，即

$$\mathrm{Rot}_x(\beta')\,\mathrm{Rot}_y(\gamma')\,\mathrm{Rot}_x(\delta')$$

（参数作适当重命名即可）。

对应到单量子比特门上，就得到另一种等价的欧拉角分解：

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

这就是所谓的 x-y-x 分解。它与 ZYZ 分解同理，只是选择了不同的 "特殊轴"，属于不同的欧拉角约定之间的等价变换。 □

练习 4.11. *设 $\hat{m}, \hat{n}$ 为三维空间中不平行的实单位向量。证明对适当的 $\alpha, \{\beta_k\}, \{\gamma_k\}$，任意单量子比特酉算符可写为*

$$U = e^{i\alpha}R_{\hat{n}}(\beta_1)R_{\hat{m}}(\gamma_1)R_{\hat{n}}(\beta_2)R_{\hat{m}}(\gamma_2)\cdots.$$

解答. 思路： 前面 4.8 已知任意单量子比特酉都可写为

$$U = e^{i\alpha}R_{\hat{a}}(\theta),$$

其中 $R_{\hat{a}}(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}\hat{a}\cdot\vec{\sigma}}$ 为绕某单位向量 $\hat{a}$ 的旋转。因此只需说明：只用两根不平行的轴 $\hat{n}, \hat{m}$ 的旋转 $R_{\hat{n}}(\cdot), R_{\hat{m}}(\cdot)$ 的交替乘积，就能产生任意绕任意轴 $\hat{a}$ 的旋转 $R_{\hat{a}}(\theta)$（或任意逼近之）。

(1) Bloch 球上的几何图像。

在 Bloch 球上，$R_{\hat{n}}(\theta)$ 对 Bloch 向量是绕 $\hat{n}$ 旋转 θ。利用共轭变换

$$R_{\hat{n}}(\phi)\, R_{\hat{m}}(\theta)\, R_{\hat{n}}(-\phi),$$

在 Bloch 球上等价于"先绕 $\hat{n}$ 旋转 ϕ，再绕 $\hat{m}$ 旋转 θ，再转回来"，因此其效果是绕向量 $\hat{m}' = \mathrm{Rot}_{\hat{n}}(\phi)\hat{m}$ 旋转 θ。这说明：从一根轴 $\hat{m}$ 出发，通过被 $R_{\hat{n}}(\phi)$ 共轭，我们可以得到绕一整圈

$$\{\mathrm{Rot}_{\hat{n}}(\phi)\hat{m}:\ \phi \in \mathbb{R}\}$$

上的所有轴的旋转。因为 $\hat{m}, \hat{n}$ 不平行，通过进一步组合 $R_{\hat{n}}$ 与这些新轴的旋转，可以得到越来越多方向的旋转轴，在极限意义下可以生成 Bloch 球上任意方向的旋转。于是，任意 $R_{\hat{a}}(\theta)$ 都可由若干个 $R_{\hat{n}}$ 和 $R_{\hat{m}}$ 的交替乘积逼近，从而写成题干所示的形式。

(2) Lie 代数的简要说明（可选）。

也可以用 Pauli 代数更代数化地说明。记

$$N := \hat{n} \cdot \vec{\sigma}, \qquad M := \hat{m} \cdot \vec{\sigma}.$$

由 $(\hat{a} \cdot \vec{\sigma})(\hat{b} \cdot \vec{\sigma}) = (\hat{a} \cdot \hat{b})I + i(\hat{a} \times \hat{b}) \cdot \vec{\sigma}$ 可得

$$[N, M] = NM - MN = 2i(\hat{n} \times \hat{m}) \cdot \vec{\sigma}.$$

由于 $\hat{n}, \hat{m}$ 不平行，$\hat{n} \times \hat{m} \neq 0$，因此

$$N,\ M,\ [N, M] \propto (\hat{n} \times \hat{m}) \cdot \vec{\sigma}$$

三者的实线性组合生成了整个 su(2) 李代数。按李群与李代数的对应关系，由 N 与 M 的指数 $e^{-i\beta N/2} = R_{\hat{n}}(\beta)$、$e^{-i\gamma M/2} = R_{\hat{m}}(\gamma)$ 所生成的连通李群就是 SU(2)，也就是说，任意 $R_{\hat{a}}(\theta)$ 都可以写成（可能较长的）$R_{\hat{n}}$ 与 $R_{\hat{m}}$ 的乘积，即题干所示形式（点点表示可以有一串因子）。

综合以上，任意单量子比特酉算符 U 都可以写成

$$U = e^{i\alpha} R_{\hat{n}}(\beta_1) R_{\hat{m}}(\gamma_1) R_{\hat{n}}(\beta_2) R_{\hat{m}}(\gamma_2) \cdots,$$

其中全局相位 $e^{i\alpha}$ 可由 4.8 的结论吸收。这就证明了题目所述的分解。 □

练习 4.12. *给出 Hadamard 门的 A, B, C 和 α。其中 A, B, C 为酉算符，满足 $ABC = I$，且*

$$H = e^{i\alpha} AXBXC.$$

解答. 根据定理 4.1，任意单比特酉都可以写成

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

对 Hadamard 门

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix},$$

与上式比较可得到一组参数

$$\alpha = \frac{\pi}{2}, \qquad \beta = 0, \qquad \gamma = \frac{\pi}{2}, \qquad \delta = \pi.$$

在推论 4.2 中，已给出从 (β,γ,δ) 构造 $H=e^{i\alpha}AXBXC$ 的一种方式，这里只写出具体结果。取

$$A=R_z(0)\,R_y\Big(\frac{\pi}{4}\Big),\qquad B=R_y\Big(-\frac{\pi}{4}\Big)\,R_z\Big(-\frac{\pi}{2}\Big),\qquad C=R_z\Big(\frac{\pi}{2}\Big),$$

并记住

$$R_z(\theta)=\begin{pmatrix}e^{-i\theta/2}&0\\0&e^{i\theta/2}\end{pmatrix},\qquad R_y(\theta)=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}&-\sin\frac{\theta}{2}\\\sin\frac{\theta}{2}&\cos\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}.$$

于是有

$$A=\begin{pmatrix}\cos\frac{\pi}{8}&-\sin\frac{\pi}{8}\\\sin\frac{\pi}{8}&\cos\frac{\pi}{8}\end{pmatrix},$$

$$B=\begin{pmatrix}e^{i\pi/4}\cos\frac{\pi}{8}&e^{-i\pi/4}\sin\frac{\pi}{8}\\-e^{i\pi/4}\sin\frac{\pi}{8}&e^{-i\pi/4}\cos\frac{\pi}{8}\end{pmatrix},$$

$$C=\begin{pmatrix}e^{-i\pi/4}&0\\0&e^{i\pi/4}\end{pmatrix}.$$

首先检查

$$ABC=R_z(0)R_y\big(\tfrac{\pi}{4}\big)\,R_y\big(-\tfrac{\pi}{4}\big)\,R_z\big(-\tfrac{\pi}{2}\big)\,R_z\big(\tfrac{\pi}{2}\big)=I,$$

因为同一轴的旋转角度可相加：$R_y(\pi/4)R_y(-\pi/4)=R_y(0)=I$，$R_z(-\pi/2)R_z(\pi/2)=R_z(0)=I$。

再把 A,B,C 与 X 一起代入 $e^{i\alpha}AXBXC$，做直接的矩阵乘法即可验证

$$e^{i\alpha}AXBXC=e^{i\pi/2}AXBXC=H.$$

因此，一组满足要求的答案是

$$\boxed{\alpha=\frac{\pi}{2},\quad A=R_z(0)R_y\Big(\frac{\pi}{4}\Big),\quad B=R_y\Big(-\frac{\pi}{4}\Big)R_z\Big(-\frac{\pi}{2}\Big),\quad C=R_z\Big(\frac{\pi}{2}\Big).}$$

□

练习 4.13 (线路恒等式). 证明并熟练应用以下三条线路恒等式：$HXH=Z$, $HYH=-Y$, $HZH=X$。

解答. 准备：写出 H,X,Y,Z 的矩阵形式。

$$H=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\end{pmatrix},\quad X=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad Y=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\quad Z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}.$$

注意 H 厄米且幺正，有

$$H^\dagger=H,\qquad H^2=I.$$

(1) 验证 $HXH=Z$。

先计算右乘 H：

$$XH=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1&-1\\1&1\end{pmatrix}.$$

再左乘一个 H：

$$\begin{aligned}HXH &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & -1\\ 1 & 1\end{pmatrix}\\ &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\cdot 1+1\cdot 1 & 1\cdot(-1)+1\cdot 1\\ 1\cdot 1+(-1)\cdot 1 & 1\cdot(-1)+(-1)\cdot 1\end{pmatrix}\\ &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix}2 & 0\\ 0 & -2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}=Z.\end{aligned}$$

故 $HXH=Z$。

(2) 验证 $HYH=-Y$。

同理先算 YH：

$$YH=\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\cdot 1+(-i)\cdot 1 & 0\cdot 1+(-i)\cdot(-1)\\ i\cdot 1+0\cdot 1 & i\cdot 1+0\cdot(-1)\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-i & i\\ i & i\end{pmatrix}.$$

再左乘 H：

$$\begin{aligned}HYH &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-i & i\\ i & i\end{pmatrix}\\ &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\cdot(-i)+1\cdot i & 1\cdot i+1\cdot i\\ 1\cdot(-i)+(-1)\cdot i & 1\cdot i+(-1)\cdot i\end{pmatrix}\\ &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & 2i\\ -2i & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & i\\ -i & 0\end{pmatrix}.\end{aligned}$$

而

$$Y=\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\quad\Rightarrow\quad -Y=\begin{pmatrix}0 & i\\ -i & 0\end{pmatrix}.$$

故 $HYH=-Y$。

(3) 验证 $HZH=X$。

一种做法是直接相乘，另一种更快：利用 $H^2=I$。由第 (1) 步已知

$$HXH=Z.$$

两边左、右各乘一 H：

$$H(HXH)H=HZH.$$

左边因为 $H^2=I$，有

$$H(HXH)H=(H^2)X(H^2)=IXI=X,$$

于是

$$HZH=X.$$

综上，三条线路恒等式

$$HXH=Z,\qquad HYH=-Y,\qquad HZH=X$$

均已严格验证。 □

练习 4.14. 利用前面的练习，证明：除了一个全局相位有差别，$HTH = R_x(\pi/4)$。

解答. 步骤 1：将 T 写成绕 z 轴的旋转。

相移门 T 的矩阵为

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{pmatrix}.$$

另一方面

$$R_z(\theta) = e^{-i\theta Z/2} = \begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2} \end{pmatrix},$$

取 $\theta = \pi/4$ 得

$$R_z\Big(\frac{\pi}{4}\Big) = \begin{pmatrix} e^{-i\pi/8} & 0 \\ 0 & e^{i\pi/8} \end{pmatrix}.$$

在其前面乘上一个全局相位 $e^{i\pi/8}$：

$$e^{i\pi/8} R_z\Big(\frac{\pi}{4}\Big) = \begin{pmatrix} e^{i\pi/8} e^{-i\pi/8} & 0 \\ 0 & e^{i\pi/8} e^{i\pi/8} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{pmatrix} = T.$$

因此

$$T = e^{i\pi/8} R_z\Big(\frac{\pi}{4}\Big).$$

步骤 2：由 $HXH = Z$ 推出 $HR_z(\theta)H = R_x(\theta)$。

由前面练习知道

$$HXH = Z, \qquad H^2 = I.$$

$R_z(\theta)$ 的闭式为

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

于是

$$\begin{aligned} HR_z(\theta)H &= H\Big(\cos\tfrac{\theta}{2} I - i\sin\tfrac{\theta}{2} Z\Big)H \\ &= \cos\tfrac{\theta}{2}\, HIH - i\sin\tfrac{\theta}{2}\, HZH. \end{aligned}$$

因为 H 幺正且 $H^2 = I$，有 $HIH = I$。又由 $HXH = Z$ 可得 $HZH = X$（在 $HXH = Z$ 两边左、右各乘一 H 即可）。于是

$$HR_z(\theta)H = \cos\frac{\theta}{2} I - i\sin\frac{\theta}{2} X.$$

而绕 x 轴的旋转门定义为

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

故对任意实数 θ，都有

$$HR_z(\theta)H = R_x(\theta).$$

步骤 3：代入 $\theta = \pi/4$，得到 HTH 的形式。

由步骤 1 有 $T = e^{i\pi/8} R_z(\pi/4)$，于是

$$HTH = H\big(e^{i\pi/8} R_z(\tfrac{\pi}{4})\big)H = e^{i\pi/8}\, HR_z(\tfrac{\pi}{4})H.$$

用步骤 2 的结论（取 $\theta = \pi/4$）：

$$HR_z(\tfrac{\pi}{4})H = R_x(\tfrac{\pi}{4}),$$

得到

$$HTH = e^{i\pi/8} R_x\left(\frac{\pi}{4}\right).$$

因此 HTH 与 $R_x(\pi/4)$ 仅相差一个全局相位 $e^{i\pi/8}$，在物理上等价，即

$$HTH \sim R_x(\pi/4).$$

□

练习 4.15 (单量子比特运算的组合). *(1)* 若先绕 $\hat{n}_1$ 旋转角 β_1，再绕 $\hat{n}_2$ 旋转角 β_2，证明合成等于绕 $\hat{n}_{12}$ 旋转角 β_{12}，满足

$$\begin{aligned} c_{12} &= c_1 c_2 - s_1 s_2\, \hat{n}_1 \cdot \hat{n}_2, \\ s_{12}\hat{n}_{12} &= s_1 c_2\, \hat{n}_1 + c_1 s_2\, \hat{n}_2 + s_1 s_2\, \hat{n}_2 \times \hat{n}_1, \end{aligned}$$

其中 $c_i = \cos(\beta_i/2)$，$s_i = \sin(\beta_i/2)$（$i = 1, 2, 12$）。
(2) 当 $\beta_1 = \beta_2$ 且 $\hat{n}_1 = \hat{z}$，推出

$$c_{12} = c^2 - s^2\, \hat{z} \cdot \hat{n}_2, \qquad s_{12}\hat{n}_{12} = sc(\hat{z} + \hat{n}_2) + s^2\, \hat{n}_2 \times \hat{z}.$$

解答. (1) 合成两次绕不同轴的旋转。

我们使用前面题中得到的闭式：

$$R_{\hat{n}}(\beta) = e^{-i\frac{\beta}{2}\hat{n}\cdot\vec{\sigma}} = \cos\frac{\beta}{2}\, I - i\sin\frac{\beta}{2}\, \hat{n} \cdot \vec{\sigma}.$$

记

$$c_i := \cos\frac{\beta_i}{2}, \quad s_i := \sin\frac{\beta_i}{2}, \quad R_{\hat{n}_i}(\beta_i) = c_i I - i s_i\, \hat{n}_i \cdot \vec{\sigma} \quad (i = 1, 2).$$

先写出合成算符

$$R_{\hat{n}_2}(\beta_2) R_{\hat{n}_1}(\beta_1).$$

将其代入上式展开：

$$\begin{aligned} R_{\hat{n}_2}(\beta_2) R_{\hat{n}_1}(\beta_1) &= \big(c_2 I - i s_2\, \hat{n}_2 \cdot \vec{\sigma}\big)\big(c_1 I - i s_1\, \hat{n}_1 \cdot \vec{\sigma}\big) \\ &= c_2 c_1 I - i c_2 s_1\, \hat{n}_1 \cdot \vec{\sigma} - i s_2 c_1\, \hat{n}_2 \cdot \vec{\sigma} - s_2 s_1\, (\hat{n}_2 \cdot \vec{\sigma})(\hat{n}_1 \cdot \vec{\sigma}). \end{aligned}$$

整理得

$$R_{\hat{n}_2}(\beta_2) R_{\hat{n}_1}(\beta_1) = c_1 c_2 I - i\big(c_2 s_1 \hat{n}_1 + c_1 s_2 \hat{n}_2\big) \cdot \vec{\sigma} - s_1 s_2 (\hat{n}_2 \cdot \vec{\sigma})(\hat{n}_1 \cdot \vec{\sigma}).$$

接下来用 Pauli 向量恒等式

$$(\hat{a} \cdot \vec{\sigma})(\hat{b} \cdot \vec{\sigma}) = (\hat{a} \cdot \hat{b})\, I + i(\hat{a} \times \hat{b}) \cdot \vec{\sigma}.$$

取 $\hat{a} = \hat{n}_2$，$\hat{b} = \hat{n}_1$，得到

$$(\hat{n}_2 \cdot \vec{\sigma})(\hat{n}_1 \cdot \vec{\sigma}) = (\hat{n}_2 \cdot \hat{n}_1)\, I + i(\hat{n}_2 \times \hat{n}_1) \cdot \vec{\sigma}.$$

代回上式：

$$\begin{aligned} R_{\hat{n}_2}(\beta_2) R_{\hat{n}_1}(\beta_1) &= c_1 c_2 I - i\big(c_2 s_1 \hat{n}_1 + c_1 s_2 \hat{n}_2\big) \cdot \vec{\sigma} \\ &\qquad - s_1 s_2 \Big[(\hat{n}_2 \cdot \hat{n}_1)\, I + i(\hat{n}_2 \times \hat{n}_1) \cdot \vec{\sigma}\Big] \\ &= \Big(c_1 c_2 - s_1 s_2\, \hat{n}_1 \cdot \hat{n}_2\Big) I \\ &\qquad - i\Big(c_2 s_1 \hat{n}_1 + c_1 s_2 \hat{n}_2 + s_1 s_2\, \hat{n}_2 \times \hat{n}_1\Big) \cdot \vec{\sigma}. \end{aligned}$$

(注意：这里提出 $-i$ 因子后，最后一项 $s_1 s_2 \hat{n}_2 \times \hat{n}_1$ 的符号为正，因为原式中该项带有 $-i$)。

另一方面，若合成的结果是绕某轴 $\hat{n}_{12}$ 旋转角 β_{12}，则必可写成

$$R_{\hat{n}_{12}}(\beta_{12}) = c_{12} I - i s_{12}\, \hat{n}_{12} \cdot \vec{\sigma}, \quad c_{12} := \cos\frac{\beta_{12}}{2},\ s_{12} := \sin\frac{\beta_{12}}{2}.$$

将二者对比可知：

- I 前的系数必须相等：

$$c_{12} = c_1 c_2 - s_1 s_2\, \hat{n}_1 \cdot \hat{n}_2;$$

- $\vec{\sigma}$ 前的向量系数也必须相等：

$$s_{12}\hat{n}_{12} = s_1 c_2\, \hat{n}_1 + c_1 s_2\, \hat{n}_2 + s_1 s_2\, \hat{n}_2 \times \hat{n}_1.$$

这正是题中所给的合成公式（修正符号后）。

(2) 特例： $\beta_1 = \beta_2,\ \hat{n}_1 = \hat{z}$。

令

$$\beta_1 = \beta_2 = \beta, \quad c := \cos\frac{\beta}{2},\ s := \sin\frac{\beta}{2}, \quad \hat{n}_1 = \hat{z},\ \hat{n}_2 \text{ 任意单位向量},$$

则 $c_1 = c_2 = c,\ s_1 = s_2 = s$，代入上面一般公式：

$$c_{12} = c_1 c_2 - s_1 s_2\, \hat{n}_1 \cdot \hat{n}_2 = c^2 - s^2\, \hat{z} \cdot \hat{n}_2,$$

这给出了第一式。

再看向量部分：

$$\begin{aligned} s_{12}\hat{n}_{12} &= s_1 c_2\, \hat{n}_1 + c_1 s_2\, \hat{n}_2 + s_1 s_2\, \hat{n}_2 \times \hat{n}_1 \\ &= sc\, \hat{z} + sc\, \hat{n}_2 + s^2\, \hat{n}_2 \times \hat{z} \\ &= sc(\hat{z} + \hat{n}_2) + s^2\, \hat{n}_2 \times \hat{z}. \end{aligned}$$

这给出了修正符号后的第二式。

因此，当两次旋转角度相同且第一次绕 $\hat{z}$ 轴时，合成旋转的参数满足

$$c_{12} = c^2 - s^2\, \hat{z} \cdot \hat{n}_2, \qquad s_{12}\hat{n}_{12} = sc(\hat{z} + \hat{n}_2) + s^2\, \hat{n}_2 \times \hat{z}.$$

□