第3章

单量子比特门

本章核心知识点：

- □ 单量子比特门 OpenQASM 语句
- □ Pauli 门
- □ Hadamard 门
- □ 相位门：S 门、T 门、$S^{\dagger}$ 门、$T^{\dagger}$ 门和 P 门
- □ 旋转门：RX 门、RY 门和 RZ 门
- □ 任意轴旋转门 $R_{\hat{n}}(\theta)$

3.1 单量子比特门 OpenQASM 语句

量子门是量子线路的基础。量子门在数学上可以表示为酉矩阵。酉矩阵从数学上保证了所有量子门都是可逆的。量子门的输入和输出要求有相同数量的量子比特，因此酉矩阵肯定是方阵。一个作用在 n 量子比特的量子门可以写成一个 $2^n \times 2^n$ 的酉矩阵。

表 3.1 给出了常用单量子比特门的 OpenQASM 语句格式及其功能简要说明。OpenQASM(Open Quantum Assembly language)是一种用于描述量子线路的量子汇编语言，作为高级编译器与量子硬件通信的中间表示，它被众多量子程序开发平台或模拟器支持。表 3.1 中的线路符号采用 Quantum Composer 中的标准图标。

本书推荐的量子程序开发平台为 IBM 公司的量子计算云平台集成的 Quantum Composer(量子线路开发工具)与 Quantum Lab(基于高级语言的 Qiskit 量子程序开发工具)。当前的 Quantum Composer 支持量子汇编语言 OpenQASM 2.0。

本章将介绍表 3.1 中的单量子比特门。

表 3.1　单量子比特门的 OpenQASM 基本语句

线路符号	名称	语句格式	说明
⊕	Pauli-X	x q[i];	X 门(非门),沿 x 轴轴对称翻转
Y	Pauli-Y	y q[i];	Y 门,沿 y 轴轴对称翻转
Z	Pauli-Z	z q[i];	Z 门,沿 z 轴轴对称翻转
H	H	h q[i];	Hadamard 门
S	S	s q[i];	相位门,绕 z 轴逆时针旋转 $\pi/2$
T	T	t q[i];	相位门,绕 z 轴逆时针旋转 $\pi/4$
$S^\dagger$	$S^\dagger$	sdg q[i];	相位门,绕 z 轴顺时针旋转 $\pi/2$
$T^\dagger$	$T^\dagger$	tdg q[i];	相位门,绕 z 轴顺时针旋转 $\pi/4$
P	P	p(λ) q[i];	相位门,作用一个相位 $e^{i\lambda}$ 到基态 $\|1\rangle,\lambda\in[0,\pi]$
RX	RX	rx(θ) q[i];	绕 x 轴逆时针旋转 θ 角度
RY	RY	ry(θ) q[i];	绕 y 轴逆时针旋转 θ 角度
RZ	RZ	rz(θ) q[i];	绕 z 轴逆时针旋转 θ 角度

3.2　Pauli 门

Pauli 矩阵作为一组酉矩阵,其对应的量子门是非常重要的基础单量子比特门。

3.2.1　Pauli-X 门

Pauli-X 门的矩阵形式为

$$\sigma_1 \equiv \sigma_x \equiv X \equiv \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{3.1}$$

Pauli-X 门简称 X 门,作用效果为绕布洛赫球 x 轴旋转角度 π,实现该量子比特的两个基向量的振幅的交换,也可理解为沿 x 轴做轴对称翻转。

对于任意的量子态 $|\psi\rangle=\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle$,$\alpha,\beta\in\mathbb{C}$,有

$$X|\psi\rangle=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\beta\\ \alpha\end{bmatrix} \tag{3.2}$$

X 门的行为类似于经典电路中的“非门”，有如下性质：

$$X|0\rangle=|1\rangle, X|1\rangle=|0\rangle, X|+\rangle=|+\rangle, X|-\rangle=-|-\rangle \tag{3.3}$$

X 门的线路符号如图 3.1 所示。

【例 3.1】 证明 $X|+\rangle=|+\rangle, X|-\rangle=-|-\rangle$。

证：

$$X|+\rangle=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}=|+\rangle$$

$$X|-\rangle=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}-\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}=-|-\rangle \tag{3.4}$$

3.2.2 Pauli-Y 门

Pauli-Y 门的矩阵形式为

$$\sigma_2\equiv\sigma_y\equiv Y\equiv\begin{bmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{bmatrix} \tag{3.5}$$

Pauli-Y 门简称 Y 门，作用效果为绕布洛赫球 y 轴旋转角度 π，也可理解为沿 y 轴做轴对称翻转。

对于任意量子态 $|\psi\rangle=\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle, \alpha, \beta\in\mathbb{C}$，有

$$Y|\psi\rangle=\begin{bmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-\mathrm{i}\beta\\ \mathrm{i}\alpha\end{bmatrix}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}3\pi/2}\beta|0\rangle+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi/2}\alpha|1\rangle \tag{3.6}$$

Y 门的线路符号如图 3.2 所示。

图 3.1 X 门

图 3.2 Y 门

【例 3.2】 求 Y 门对 $|\psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$ 作用后的末态。

解：

$$Y|\psi\rangle=\begin{bmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\\ \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}3\pi/2}\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi/2}\frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \tag{3.7}$$

3.2.3　Pauli-Z 门

Pauli-Z 门的矩阵形式为

$$\sigma_3 \equiv \sigma_z \equiv Z \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{3.8}$$

Pauli-Z 门的作用效果是绕布洛赫球 z 轴旋转角度 π，简称 Z 门。对于任意量子态 $|\psi\rangle=\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle$，$\alpha,\beta\in\mathbb{C}$，有

$$Z|\psi\rangle=\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \alpha \\ -\beta \end{bmatrix}=\alpha|0\rangle+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi}\beta|1\rangle \tag{3.9}$$

Z 门具有以下性质：

$$Z|0\rangle=|0\rangle,Z|1\rangle=-|1\rangle,Z|+\rangle=|-\rangle,Z|-\rangle=|+\rangle \tag{3.10}$$

Z 门的线路符号如图 3.3 所示。

图 3.3　Z 门

【例 3.3】　求 Z 门对 $|\psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$ 作用后的末态。

解：

$$Z|\psi\rangle=\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi}\frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \tag{3.11}$$

3.3　Hadamard 门

Hadamard 门的矩阵形式为

$$H=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \tag{3.12}$$

Hadamard 门简称 H 门。H 门作用在单量子比特上，将基态 $|0\rangle$ 变成 $(|0\rangle+|1\rangle)/\sqrt{2}$，将 $|1\rangle$ 变成 $(|0\rangle-|1\rangle)/\sqrt{2}$，即

$$\begin{cases} H(|0\rangle)=\dfrac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle+|1\rangle)=|+\rangle \\ H(|1\rangle)=\dfrac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle-|1\rangle)=|-\rangle \end{cases} \tag{3.13}$$

对于任意的量子态 $|\psi\rangle=\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle$，$\alpha,\beta\in\mathbb{C}$，有

$$\begin{aligned} H|\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\end{bmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}\alpha+\beta\\ \alpha-\beta\end{bmatrix} \\ &= \frac{\alpha+\beta}{\sqrt{2}}|0\rangle+\frac{\alpha-\beta}{\sqrt{2}}|1\rangle \end{aligned} \tag{3.14}$$

H 门的线路符号如图 3.4 所示。

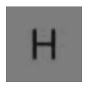

图 3.4 H 门

【例 3.4】 证明对任一量子态连续使用两次 H 门，其状态保持不变。

证：

$$HH=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{bmatrix}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}2 & 0\\ 0 & 2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}=I \tag{3.15}$$

【例 3.5】 证明 H 门的共轭转置和逆矩阵都等于其自身。

证：

$$H^{\dagger}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{bmatrix}=H, HH=I, H=H^{-1} \tag{3.16}$$

H 门通常用作以下用途。

(1) 基变换

H 门的效果可视为对一个量子比特的状态做基底变换，以实现计算基 $\{|0\rangle,|1\rangle\}$ 到基 $\{|+\rangle,|-\rangle\}$ 之间的相互转换。其中，$\{|0\rangle,|1\rangle\}$ 为泡利 Z 矩阵的本征向量；$\{|+\rangle,|-\rangle\}$ 为泡利 X 矩阵的本征向量。

假设有一个基 $\{|+\rangle,|-\rangle\}$ 上的量子态，对 X 方向进行测量不如对 Z 方向进行测量更方便，这时可先用 H 门进行基变换，再通过计算基 $\{|0\rangle,|1\rangle\}$ 进行测量。

(2) 将多个量子比特的初态制备为等权叠加态

$H^{\otimes n}$ 作用在零态 $|0\rangle^{\otimes n}$ 上能够产生等权叠加态 $\dfrac{1}{\sqrt{2^n}}\sum\limits_{x\in\{0,1\}^n}|x\rangle$，即从零态

得到 2^n 个态的叠加态。

H 门作用在 $|0\rangle$ 上得到 $H(|0\rangle)=\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle+|1\rangle)$。

作用在 $|00\rangle$ 上得到：

$$
\begin{aligned}
H^{\otimes 2}|00\rangle &= H|0\rangle \otimes H|0\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle+|1\rangle)\otimes\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle+|1\rangle) \\
&= \frac{1}{2}(|00\rangle+|01\rangle+|10\rangle+|11\rangle)
\end{aligned}
\tag{3.17}
$$

作用在 n 个 $|0\rangle$，即 $|0\rangle^{\otimes n}$ 上得到：

$$
\begin{aligned}
H^{\otimes n}|0\rangle^{\otimes n} &= \frac{1}{\sqrt{2}^{\,n}}\sum_{x=0}^{2^n-1}|x\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}^{\,n}}(|00\cdots00\rangle+|00\cdots01\rangle+|00\cdots10\rangle+\cdots+|11\cdots11\rangle)
\end{aligned}
\tag{3.18}
$$

3.4 相　位　门

3.4.1 S 门

S 门的矩阵形式为

$$
S=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & \mathrm{i}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\pi/2)}\end{bmatrix}
\tag{3.19}
$$

S 门相当于绕布洛赫球 z 轴逆时针旋转 $\pi/2$ 角度。布洛赫球上任一量子态 $|\psi\rangle=\cos\frac{\theta}{2}|0\rangle+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle$，其中 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}$ 是相对相位，φ 是相位角。S 门作用后，相位角由 φ 变为 $\varphi+\pi/2$。

对于任意量子态 $|\psi\rangle=\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle$，S 门作用后 $|1\rangle$ 的振幅由 β 变为 $\mathrm{i}\beta$，即

$$
S|\psi\rangle=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & \mathrm{i}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\alpha\\ \mathrm{i}\beta\end{bmatrix}=\alpha|0\rangle+\mathrm{i}\beta|1\rangle
\tag{3.20}
$$

S 门又常被称为 $\pi/4$ 门，即

$$
S=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\pi/2)}\end{bmatrix}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\pi/4)}\begin{bmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\pi/4)} & 0\\ 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\pi/4)}\end{bmatrix}
\tag{3.21}
$$

上式方括号外的 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\pi/4)}$ 不影响 S 门作用后的观测结果。

S 门的线路符号如图 3.5 所示。

【例 3.6】 求 S 门对 $|\psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$ 作用后的末态。

解：

$$S|\psi\rangle=\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & \mathrm{i}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\\frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\pi/2)}\frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \tag{3.22}$$

【例 3.7】 证明连续两个 S 门等同于一个 Pauli-Z 门，即 $Z=SS$。

证：

$$SS=\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & \mathrm{i}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & \mathrm{i}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{bmatrix}=Z$$

3.4.2 T 门

T 门的矩阵形式为

$$T=\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\pi/4)}\end{bmatrix} \tag{3.23}$$

T 门相当于绕布洛赫球 z 轴逆时针旋转 $\pi/4$ 角度，有时也称之为 $\pi/8$ 门。

$$T=\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\pi/4)}\end{bmatrix}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\pi/8)}\begin{bmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\pi/8)} & 0\\0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\pi/8)}\end{bmatrix} \tag{3.24}$$

上式方括号外的 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\pi/8)}$ 对 T 门作用后的结果观测不起作用。

将 T 门作用两次等于作用一次 S 门，即 $S=TT$。

T 门作用在任意量子态 $|\psi\rangle=\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle$，$\alpha,\beta\in\mathbb{C}$ 上，得到的新的量子态为

$$T|\psi\rangle=\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\pi/4)}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\\beta\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\alpha\\\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\pi/4)}\beta\end{bmatrix}=\alpha|0\rangle+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\pi/4)}\beta|1\rangle \tag{3.25}$$

T 门的线路符号如图 3.6 所示。

图 3.5 S 门

图 3.6 T 门

【例 3.8】 求 T 门对 $|\psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$ 作用后的末态。

解：

$$T|\psi\rangle=\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\pi/4)}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\dfrac{1}{\sqrt{2}}\\\dfrac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle+\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\pi/4)}\frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \tag{3.26}$$

3.4.3　S† 门

S† 门又称 Sdg 门或 S-dagger 门，可视为 S 门的逆操作。S† 门相当于绕布洛赫球 z 轴顺时针旋转 $\pi/2$ 角度，矩阵形式为

$$\mathrm{Sdg}=\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & -\mathrm{i}\end{bmatrix} \tag{3.27}$$

S† 门作用在任意量子态 $|\psi\rangle=\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle$，$\alpha,\beta\in\mathbb{C}$ 上，得到的新的量子态为

$$\mathrm{Sdg}|\psi\rangle=\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & -\mathrm{i}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\\beta\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\alpha\\-\mathrm{i}\beta\end{bmatrix}=\alpha|0\rangle-\mathrm{i}\beta|1\rangle \tag{3.28}$$

S† 门的线路符号如图 3.7 所示。

3.4.4　T† 门

T† 门又称 Tdg 门或 T-dagger 门，可视为 T 门的逆操作。T† 门相当于绕布洛赫球 z 轴顺时针旋转 $\pi/4$ 角度，矩阵形式为

$$\mathrm{Tdg}=\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}\end{bmatrix} \tag{3.29}$$

T† 门作用在任意量子态 $|\psi\rangle=\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle$，有

$$T|\psi\rangle=\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\\beta\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\alpha\\\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}\beta\end{bmatrix}=\alpha|0\rangle+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}\beta|1\rangle \tag{3.30}$$

T† 门的线路符号如图 3.8 所示。

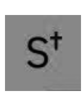

图 3.7　S† 门

图 3.8　T† 门

3.4.5 P 门

P 门的矩阵表示为

$$P(\lambda)=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda}\end{bmatrix} \tag{3.31}$$

P 门作用一个相位 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda}$ 到基态 $|1\rangle$ 上。λ 可取 $[0,\pi]$ 的任意值。λ 为 π、$\pi/2$ 或 $\pi/4$ 时分别等价于 Z 门、S 门和 T 门，即

$$P(\lambda=\pi)=Z \tag{3.32}$$

$$P(\lambda=\pi/2)=S \tag{3.33}$$

$$P(\lambda=\pi/4)=T \tag{3.34}$$

P 门的线路符号如图 3.9 所示。

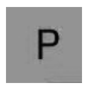

图 3.9 P 门

3.5 旋 转 门

Pauli 门分别实现了单量子比特绕布洛赫球对应轴旋转固定的 π 角度的操作。RX 门、RY 门和 RZ 门称为旋转门，它们可以让一个量子比特的状态绕布洛赫球对应轴旋转一个合理的任意角度。本节将介绍这组旋转门，相应算子定义如下。

$$\begin{cases}R_x(\theta)\equiv \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\theta X}{2}}\\ R_y(\theta)\equiv \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\theta Y}{2}}\\ R_z(\theta)\equiv \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\theta Z}{2}}\end{cases} \tag{3.35}$$

令 $A=\sum\limits_a a|a\rangle\langle a|$ 是正规算子 $A(A^{\dagger}A=AA^{\dagger})$ 的谱分解，定义

$$f(A)\equiv\sum_a f(a)|a\rangle\langle a| \tag{3.36}$$

若 $f(x)$ 有幂级数展开 $f(x)=\sum\limits_{i=0}^{\infty}c_i x^i$，则有

$$f(A)\equiv c_0 I+c_1 A+c_2 A^2+c_3 A^3+\cdots \tag{3.37}$$

指数函数的泰勒展开式为

$$e^x = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{x^i}{i!} \tag{3.38}$$

即

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \cdots \tag{3.39}$$

据此式推广可有

$$e^A = I + A + \frac{A^2}{2!} + \frac{A^3}{3!} + \frac{A^4}{4!} + \frac{A^5}{5!} + \cdots \tag{3.40}$$

考虑 $e^{i\theta A}$，即

$$e^{i\theta A} = I + i\theta A - \frac{(\theta A)^2}{2!} - i\frac{(\theta A)^3}{3!} + \frac{(\theta A)^4}{4!} + i\frac{(\theta A)^5}{5!} + \cdots \tag{3.41}$$

由于 A 是正规算子，有 $A^2 = I$，从而有

$$\begin{aligned} e^{i\theta A} &= I + i\theta A - \frac{\theta^2 I}{2!} - i\frac{\theta^3 A}{3!} + \frac{\theta^4 I}{4!} + i\frac{\theta^5 A}{5!} + \cdots \\ &= \left(1 - \frac{\theta^2}{2!} + \frac{\theta^4}{4!} + \cdots\right) I + \\ &\quad i\left(\theta - \frac{\theta^3}{3!} + \frac{\theta^5}{5!} + \cdots\right) A \end{aligned} \tag{3.42}$$

最终得到

$$e^{i\theta A} = \cos(\theta) I + i\sin(\theta) A \tag{3.43}$$

该式是推导 RX、RY 和 RZ 等门的矩阵形式的重要依据。

因为 Pauli 矩阵具有 $X^2 = Y^2 = Z^2 = I$ 的性质，所以分别用不同的 Pauli 矩阵作为生成元，根据该式可方便地给出 RX、RY 和 RZ 门的矩阵表示。

3.5.1 RX 门

RX 门由 Pauli-X 矩阵作为生成元生成，其矩阵表示为

$$\begin{aligned} \mathrm{RX}(\theta) &\equiv e^{-\frac{i\theta X}{2}} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) I - i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) X \\ &= \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) & -i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ -i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{3.44}$$

RX 门的功能为绕布洛赫球 x 轴逆时针旋转 θ 角度，其线路符号如图 3.10 所示。

图 3.10 RX 门

【例 3.9】 RX(π/2)门的功能。

解：

RX(π/2)门作用在任意量子态 $|\psi\rangle=\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle$ 上，得到的新的量子态为

$$\mathrm{RX}\left(\frac{\pi}{2}\right)|\psi\rangle=\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{bmatrix}1 & -\mathrm{i}\\ -\mathrm{i} & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\end{bmatrix}=\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{bmatrix}\alpha-\mathrm{i}\beta\\ \beta-\mathrm{i}\alpha\end{bmatrix}$$

$$=\frac{\sqrt{2}(\alpha-\mathrm{i}\beta)}{2}|0\rangle+\frac{\sqrt{2}(\beta-\mathrm{i}\alpha)}{2}|1\rangle \tag{3.45}$$

【例 3.10】 求 RX(π)门的矩阵表示。

解：

$$\mathrm{RX}(\pi)=\begin{bmatrix}\cos\frac{\pi}{2} & -\mathrm{i}\sin\frac{\pi}{2}\\ -\mathrm{i}\sin\frac{\pi}{2} & \cos\frac{\pi}{2}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ -\mathrm{i} & 0\end{bmatrix}=-\mathrm{i}X \tag{3.46}$$

其等于 Pauli-X 矩阵与全局相位 $-\mathrm{i}$ 的乘积。

3.5.2 RY 门

RY 门由 Pauli-Y 矩阵作为生成元生成，其矩阵表示为

$$\begin{aligned}\mathrm{RY}(\theta) &\equiv \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\theta Y}{2}}\\ &=\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)I-\mathrm{i}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)Y\\ &=\begin{bmatrix}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) & -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\\ \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{3.47}$$

RY 门的功能为绕布洛赫球 y 轴逆时针旋转 θ 角度，其线路符号如图 3.11

所示。

图 3.11　RY 门

【例 3.11】　RY(π/2)门的功能。

解：

RY(π/2)算子作用在任意量子态$|\psi\rangle=\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle$上，得到的新的量子态为

$$\begin{aligned}\mathrm{RY}\left(\frac{\pi}{2}\right)|\psi\rangle&=\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{bmatrix}1 & -1\\ 1 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\end{bmatrix}\\ &=\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{bmatrix}\alpha-\beta\\ \alpha+\beta\end{bmatrix}=\frac{\sqrt{2}(\alpha-\beta)}{2}|0\rangle+\frac{\sqrt{2}(\alpha+\beta)}{2}|1\rangle\end{aligned}\tag{3.48}$$

3.5.3　RZ 门

RZ 门由 Pauli-Z 矩阵作为生成元生成，其矩阵表示为

$$\mathrm{RZ}(\theta)\equiv \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\theta Z}{2}}=\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)I-\mathrm{i}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)Z=\begin{bmatrix}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\theta}{2}} & 0\\ 0 & \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\theta}{2}}\end{bmatrix}\tag{3.49}$$

上式还可写成如下形式

$$\mathrm{RZ}(\theta)=\begin{bmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta/2} & 0\\ 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta/2}\end{bmatrix}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta/2}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\end{bmatrix}\tag{3.50}$$

两种形式只相差一个全局相位$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta/2}$，如果只考虑单门，则两个矩阵表示的量子逻辑门是等价的。因此，有时 RZ 门的矩阵表示也写作

$$\mathrm{RZ}(\theta)=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\end{bmatrix}\tag{3.51}$$

RZ 门的功能为绕布洛赫球z轴逆时针旋转θ角度，其线路符号如图 3.12 所示。

图 3.12　RZ 门

【例 3.12】 求 RZ 门作用在单量子比特计算基上的结果。

解：

$$\mathrm{RZ}|0\rangle=\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=|0\rangle \tag{3.52}$$

$$\mathrm{RZ}|1\rangle=\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\end{bmatrix}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}|1\rangle \tag{3.53}$$

【例 3.13】 RZ(π/2)门的功能。

解：RZ(π/2)作用在任意量子态$|\psi\rangle=\alpha|0\rangle+\beta|1\rangle$上，得到新的量子态为

$$\begin{aligned}\mathrm{RZ}\left(\frac{\pi}{2}\right)|\psi\rangle&=\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & \dfrac{\sqrt{2}(1+\mathrm{i})}{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\\beta\end{bmatrix}\\&=\begin{bmatrix}\alpha\\\dfrac{\sqrt{2}(1+\mathrm{i})}{2}\beta\end{bmatrix}=\alpha|0\rangle+\frac{\sqrt{2}(1+\mathrm{i})}{2}\beta|1\rangle\end{aligned} \tag{3.54}$$

【例 3.14】 求 RZ(α)作用于任意量子态后的相对相位角。

解：考虑

$$\mathrm{RZ}(\alpha)|\psi\rangle=\begin{bmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha/2} & 0\\0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha/2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\\\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\sin\dfrac{\theta}{2}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha/2}\cos\dfrac{\theta}{2}\\\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha/2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\sin\dfrac{\theta}{2}\end{bmatrix} \tag{3.55}$$

为了使$|0\rangle$的系数为实数，必须将当前状态再乘以一个 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha/2}$，即

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha/2}\begin{bmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha/2}\cos\dfrac{\theta}{2}\\\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha/2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\sin\dfrac{\theta}{2}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\\\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\sin\dfrac{\theta}{2}\end{bmatrix} \tag{3.56}$$

经过上一步，末态的相对相位角才是 $\phi+\alpha$（$|\psi\rangle$的原始相对相位角为 ϕ）。可见，RZ(α)算子的功能为绕布洛赫球 z 轴旋转 α 角度。

【例 3.15】 在布洛赫球的三维空间中，RZ 门需要旋转多少角度才能使一个量子态的相位恢复为初始值？2π 还是 4π？

解：考虑以下式子

$$\mathrm{RZ}(0)=I \tag{3.57}$$

$$\mathrm{RZ}(2\pi)=-I \tag{3.58}$$

$$\mathrm{RZ}(4\pi)=I \tag{3.59}$$

可以看出，2π 的旋转不能将相位恢复到初始值，需要旋转 4π。

3.6 任意轴旋转门$R_{\hat{n}}(\theta)$

如果 $\hat{n}=(n_x,n_y,n_z)$是三维坐标系中的实数单位向量,那么以 $\hat{n}$ 为轴将布洛赫矢量旋转θ 角度的算符 $R_{\hat{n}}(\theta)$为

$$R_{\hat{n}}(\theta) \equiv \exp\left(-\mathrm{i}\theta\hat{n}\cdot\frac{\sigma}{2}\right) \tag{3.60}$$

其中,σ 表示 3 个泡利矩阵构成的向量(X,Y,Z)。可以证明$(\hat{n}\cdot\sigma)^2=I$,进而可以得到

$$\begin{aligned} R_{\hat{n}}(\theta) &= \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)I - \mathrm{i}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\hat{n}\cdot\sigma \\ &= \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)I - \mathrm{i}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)(n_xX+n_yY+n_zZ) \end{aligned} \tag{3.61}$$

可以看出,任意一个单量子比特的酉算符都可以写成以下形式:

$$U=\exp(\mathrm{i}\alpha)R_{\hat{n}}(\theta) \tag{3.62}$$

其中,α 和θ 应为实数。

【例 3.16】 请给出 Hadamard 门的一种 $R_{\hat{n}}(\theta)$实现。

解:

当 $\alpha=\pi/2,\theta=\pi,\ \hat{n}=\left(\frac{1}{\sqrt{2}},0,\frac{1}{\sqrt{2}}\right)$时,

$$\begin{aligned} U &= \exp(\mathrm{i}\pi/2)\left[\cos\left(\frac{\pi}{2}\right)I - \mathrm{i}\sin\left(\frac{\pi}{2}\right)\frac{1}{\sqrt{2}}(X+Z)\right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{bmatrix} \end{aligned} \tag{3.63}$$

该酉算符就是 Hadamard 门。上式表明,Hadamard 门可被理解为绕 $\hat{n}=(1/\sqrt{2},0,1/\sqrt{2})$逆时针旋转 π 角度,且具有一个全局相位 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\pi/2)}$。

小　　结

本章结合量子比特布洛赫球表示阐述了常用的单量子比特门的功能、矩阵表示和线路符号等内容,并介绍了绕任意轴旋转门 $R_{\hat{n}}(\theta)$。

基于量子门矩阵表示的量子态演化推导是设计和分析量子线路的必备技能，希望读者在后续学习中不断加强和提高。

习　题

1. 分别给出 X 门对 $|\mathrm{i}\rangle$ 和 $|-\mathrm{i}\rangle$ 的操作结果。
2. 推导 σ_x、σ_y 和 σ_z 的本征向量和本征值。
3. 验证 $XY=-YX$、$XZ=-ZX$ 和 $ZY=-YZ$。
4. 用矩阵形式验证：$H|+\rangle=|0\rangle$，$H|-\rangle=|1\rangle$。
5. 验证推导 T 门与 Pauli-Z 门、S 门与 Pauli-Z 门的关系。
6. 用 Hadamard 门以外的其他单量子比特门实现 Hadamard 门的功能，并验证在 $H|0\rangle$、$HH|0\rangle$、$H|1\rangle$ 和 $HH|1\rangle$ 等情况下结果的正确性。
7. 一个量子比特的初态为 $|0\rangle$，请用单量子比特门分别实现 $|+\rangle$、$|-\rangle$、$|\mathrm{i}\rangle$ 和 $|-\mathrm{i}\rangle$ 等目标态。
8. 假设一个量子态可以通过同样的方式大量制备，若只有计算基态上的测量门，设计并给出测量该量子态的直角坐标 x、y 和 z 的方案。