Κβαντικοί Υπολογιστές και Αλγόριθμοι

Διάλεξη 2η

Θωμάς Καμαλάκης

Χαροκόπειο Πανεπιστήμιο Αθηνών

2026

Περιεχόμενα

1 Βασικές πύλες ενός qubit

2 Μέτρηση ενός qubit

3 Κβαντικοί τελεστές

Συζυγής ανάστροφος

- Ο *συζυγής ανάστροφος* $\mathbf{A}^{\mathrm{T}}$ ενός πίνακα $\mathbf{A}$ προκύπτει αν: α) αντιμεταθέσουμε γραμμές και στήλες και β) πάρουμε το μιγαδικό συζυγές κάθε στοιχείου:

$$(\mathbf{A}^{\mathrm{T}})_{mn} = a^*_{nm}$$

- Για πίνακα 2×2:

$$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{bmatrix}$$

- Για παράδειγμα:

$$\begin{bmatrix} 1 & j \\ 2j & 3 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 1 & -2j \\ -j & 3 \end{bmatrix}$$

- Για ένα ket είναι το bra: $|\psi\rangle^{\mathrm{T}} = \langle\psi|$.
- Ισχύει $(\mathbf{AB})^{\mathrm{T}} = \mathbf{B}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}$.

Η πύλη ως μοναδιαίος πίνακας

- Μια κβαντική πύλη περιγράφεται από έναν πίνακα $\mathbf{U}$ (2×2) που συνδέει τα αρχικά και τα τελικά πλάτη:

$$\begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} = \mathbf{U} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$$

- Ο $\mathbf{U}$ είναι πάντα μοναδιαίος: αντιστρέφεται από τον συζυγή ανάστροφό του,

$$\mathbf{U}^{\mathrm{T}}\mathbf{U} = \mathbf{U}\mathbf{U}^{\mathrm{T}} = \mathbf{I}$$

Παράδειγμα: πύλη από πεδίο κατά x

Για $\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \cos\phi_x & j\sin\phi_x \\ j\sin\phi_x & \cos\phi_x \end{bmatrix}$ ο συζυγής ανάστροφος είναι

$$\mathbf{U}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} \cos\phi_x & (j\sin\phi_x)^* \\ (j\sin\phi_x)^* & \cos\phi_x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\phi_x & -j\sin\phi_x \\ -j\sin\phi_x & \cos\phi_x \end{bmatrix}$$

και το γινόμενο:

$$\mathbf{U}^{\mathrm{T}}\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \cos\phi_x & -j\sin\phi_x \\ -j\sin\phi_x & \cos\phi_x \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\phi_x & j\sin\phi_x \\ j\sin\phi_x & \cos\phi_x \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \cos^2\phi_x - j^2\sin^2\phi_x & j\cos\phi_x\sin\phi_x - j\sin\phi_x\cos\phi_x \\ -j\sin\phi_x\cos\phi_x + j\cos\phi_x\sin\phi_x & -j^2\sin^2\phi_x + \cos^2\phi_x \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \cos^2\phi_x + \sin^2\phi_x & 0 \\ 0 & \cos^2\phi_x + \sin^2\phi_x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \mathbf{I}$$

Αντιστρεψιμότητα

- Κάθε κβαντικό κύκλωμα χωρίς μέτρηση έχει μοναδιαίο πίνακα $\mathbf{U}$.
- Άρα υπάρχει πάντα κύκλωμα με πίνακα $\mathbf{U}^{\mathrm{T}}$ που επαναφέρει την αρχική κατάσταση:

$$\mathbf{U}^{\mathrm{T}}\left(\mathbf{U}\left|\psi\right\rangle\right) = \left(\mathbf{U}^{\mathrm{T}}\mathbf{U}\right)\left|\psi\right\rangle = \mathbf{I}\left|\psi\right\rangle = \left|\psi\right\rangle$$

Αντιστρεψιμότητα

Κάθε κβαντικό κύκλωμα στο οποίο δεν κάνουμε μέτρηση είναι αντιστρέψιμο.

Το $\langle\psi|\psi\rangle$ ως συνολική πιθανότητα

- Για $|\psi\rangle = a\,|0\rangle + b\,|1\rangle$ η πιθανότητα μέτρησης του $|0\rangle$ είναι $|a|^2$ και του $|1\rangle$ είναι $|b|^2$.
- Το εσωτερικό γινόμενο του $|\psi\rangle$ με τον εαυτό του είναι:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \begin{bmatrix} a^* & b^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = |a|^2 + |b|^2$$

- Δηλαδή το $\langle\psi|\psi\rangle$ είναι το *άθροισμα των πιθανοτήτων* όλων των αποτελεσμάτων.
- Για μια έγκυρη κβαντική κατάσταση πρέπει πάντα να ισούται με 1. Το ίδιο ισχύει για περισσότερα qubit.

Διατήρηση της συνολικής πιθανότητας

- Αν $|\psi\rangle = a\,|0\rangle + b\,|1\rangle$ με $|a|^2 + |b|^2 = 1$ και $|\phi\rangle = \mathbf{U}\,|\psi\rangle = c\,|0\rangle + d\,|1\rangle$, τότε:

$$|c|^2 + |d|^2 = |a|^2 + |b|^2 = 1$$

- Απόδειξη: $\langle\phi| = \langle\psi|\,\mathbf{U}^{\mathrm{T}}$, άρα

$$\langle\phi|\phi\rangle = \langle\psi|\,\mathbf{U}^{\mathrm{T}}\mathbf{U}\,|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$$

Διατήρηση πιθανότητας

Επειδή ο $\mathbf{U}$ είναι μοναδιαίος, το άθροισμα των πιθανοτήτων παραμένει 1. Ισχύει και για περισσότερα qubit.

Τι συμβαίνει όταν μετράμε ένα qubit;

- Σε κάθε μετρήσιμο μέγεθος αντιστοιχούμε έναν πίνακα:
  - οι *ιδιοτιμές* του είναι τα πιθανά αποτελέσματα της μέτρησης,
  - τα *ιδιοδιανύσματά* του είναι οι καταστάσεις μετά τη μέτρηση.
- Το $\mathbf{v}$ είναι ιδιοδιάνυσμα του $\mathbf{A}$ με ιδιοτιμή λ αν:

$$\mathbf{A}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}, \qquad \det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}) = 0$$

- Για τη μέτρηση του spin κατά z χρησιμοποιούμε τον πίνακα $\mathbf{Z}$:

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

και το spin είναι $s = \frac{\hbar}{2}\lambda$, όπου λ η ιδιοτιμή που βρήκαμε.

Ιδιοτιμές και ιδιοδιανύσματα του Z

$$\det(\mathbf{Z} - \lambda\mathbf{I}) = \det\begin{bmatrix} 1-\lambda & 0 \\ 0 & -1-\lambda \end{bmatrix} = -(1-\lambda)(1+\lambda) = 0$$

άρα $\lambda_1 = +1$ και $\lambda_2 = -1$. Για τα ιδιοδιανύσματα $\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$:

$$\mathbf{Z}\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ -y \end{bmatrix} = \lambda\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

- $\lambda_1 = +1$: $x = x, -y = y$ άρα $y = 0$ και $|v_1\rangle = |0\rangle$.
- $\lambda_2 = -1$: $x = -x, -y = -y$ άρα $x = 0$ και $|v_2\rangle = |1\rangle$.

Μέτρηση κατά z

Αποτέλεσμα $+1$ ($s = +\hbar/2$) αφήνει το qubit στο $|0\rangle$ και αποτέλεσμα -1 ($s = -\hbar/2$) στο $|1\rangle$.

Μέτρηση στον άξονα x

Για το spin κατά x αντικαθιστούμε το $\mathbf{Z}$ με το $\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$:

$$\det(\mathbf{X} - \lambda \mathbf{I}) = \det \begin{bmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{bmatrix} = \lambda^2 - 1 = 0$$

Πάλι $\lambda = \pm 1$, δηλαδή $s = \pm \hbar/2$ όπως και για το z. Τα ιδιοδιανύσματα:

- $\lambda = +1$: $x = y$, άρα $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle$
- $\lambda = -1$: $x = -y$, άρα $|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle$

Μετά από μέτρηση κατά x το qubit βρίσκεται σε υπέρθεση των $|0\rangle$, $|1\rangle$: αν το μετρήσουμε ξανά κατά z βρίσκουμε $|0\rangle$ ή $|1\rangle$ με πιθανότητα 50%.

Τα $|+\rangle, |-\rangle$ ως ορθοκανονική βάση

- Είναι ορθογώνια και κανονικοποιημένα:

$$\langle -|+\rangle = \tfrac{1}{2}\left(1 \cdot 1 + (-1) \cdot 1\right) = 0, \qquad \langle +|+\rangle = \langle -|-\rangle = 1$$

- Κάθε κατάσταση γράφεται ως γραμμικός συνδυασμός τους:

$$|0\rangle = \frac{|+\rangle + |-\rangle}{\sqrt{2}}, \qquad |1\rangle = \frac{|+\rangle - |-\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$a\,|0\rangle + b\,|1\rangle = \frac{a+b}{\sqrt{2}}\,|+\rangle + \frac{a-b}{\sqrt{2}}\,|-\rangle$$

- Τα $|+\rangle, |-\rangle$ παίζουν τον ρόλο των $|0\rangle, |1\rangle$ όταν αλλάξουμε τον ρόλο των αξόνων x και z.

Ιδιότητες των πινάκων μέτρησης

- Οι *πίνακες μέτρησης* $\mathbf{H}$ είναι *Ερμιτιανοί*:

$$h_{pq} = h_{qp}^*, \qquad \text{ή ισοδύναμα} \qquad \mathbf{H}^{\mathrm{T}} = \mathbf{H}$$

- Παραδείγματα: οι *πίνακες* Pauli

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{Y} = \begin{bmatrix} 0 & -j \\ j & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{Z} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

- Οι ιδιοτιμές ενός Ερμιτιανού *πίνακα* είναι *πάντα πραγματικές*: *τα μεγέθη που μετράμε είναι πραγματικοί αριθμοί.*
- Συνοπτικά:
  - μοναδιαίοι *πίνακες* $\mathbf{U}$ ($\mathbf{U}^{\mathrm{T}}\mathbf{U} = \mathbf{I}$): *περιγράφουν την εξέλιξη*,
  - Ερμιτιανοί *πίνακες* $\mathbf{H}$ ($\mathbf{H}^{\mathrm{T}} = \mathbf{H}$): *περιγράφουν τις μετρήσεις*.

Κανονικοί πίνακες

- Ένας $N \times N$ πίνακας $\mathbf{A}$ λέγεται *κανονικός* αν

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^{\mathrm{T}} = \mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}$$

- Οι δύο βασικές κατηγορίες που συναντήσαμε είναι κανονικοί:
  - μοναδιαίοι: $\mathbf{U}^{\mathrm{T}}\mathbf{U} = \mathbf{U}\mathbf{U}^{\mathrm{T}} = \mathbf{I}$,
  - Ερμιτιανοί: $\mathbf{H}^{\mathrm{T}} = \mathbf{H}$.
- Άρα κληρονομούν όλες τις ιδιότητες των κανονικών πινάκων.
- Βασική ιδιότητα: κάθε κανονικός πίνακας *διαγωνιοποιείται*:

$$\mathbf{A} = \mathbf{V}\Lambda\mathbf{V}^{\mathrm{T}}$$

όπου ο Λ είναι διαγώνιος και ο $\mathbf{V}$ μοναδιαίος.

Διαγωνιοποίηση

- Βρίσκουμε τις ιδιοτιμές λ_i και τα ιδιοδιανύσματα $|\psi_i\rangle$, επιλεγμένα ως ορθοκανονική βάση: $\langle\psi_p|\psi_q\rangle = \delta_{pq}$.
- Ο Λ έχει στη διαγώνιο τα λ_i, και ο $\mathbf{V}$ έχει ως i-οστή στήλη το $|\psi_i\rangle$.
- Παράδειγμα: για $\mathbf{X}$ έχουμε $\lambda = +1, -1$ με ιδιοδιανύσματα $|+\rangle, |-\rangle$:

$$\mathbf{X} = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{bmatrix}}_{\mathbf{V}} \underbrace{\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}}_{\Lambda} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{bmatrix}}_{\mathbf{V}^{\mathrm{T}}}$$

Ο πίνακας $|\psi\rangle\langle\psi|$

- Εκτός από το $\langle\psi|\psi\rangle$ (αριθμός), χρήσιμο είναι και το $|\psi\rangle\langle\psi|$ (πίνακας).
- Είναι γινόμενο ενός πίνακα 2×1 με έναν πίνακα 1×2:

$$|\psi\rangle\langle\psi| = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a^* & b^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} |a|^2 & ab^* \\ ba^* & |b|^2 \end{bmatrix}$$

- Παράδειγμα: για $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$,

$$|+\rangle\langle+| = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Γιατί "πίνακας προβολής";

- Εφαρμόζοντάς τον σε μια κατάσταση $|\phi\rangle$:

$$(|\psi\rangle\langle\psi|)|\phi\rangle = |\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle|\psi\rangle$$

- Στο επίπεδο, για μοναδιαίο $\vec{n}$, το $(\vec{a}\cdot\vec{n})\,\vec{n}$ είναι η προβολή του $\vec{a}$ πάνω στο $\vec{n}$.
- Αντίστοιχα το $\langle\psi|\phi\rangle|\psi\rangle$ είναι η προβολή του $|\phi\rangle$ πάνω στο $|\psi\rangle$.
- Γι' αυτό ο $|\psi\rangle\langle\psi|$ λέγεται *πίνακας προβολής*.

Μέτρηση με πίνακες προβολής

- Έστω ότι μετράμε ένα μέγεθος με Ερμιτιανό πίνακα $\mathbf{H}$, ιδιοτιμές λ_i και ορθοκανονικά ιδιοδιανύσματα $|\psi_i\rangle$. Ορίζουμε $\mathbf{P}_i = |\psi_i\rangle \langle\psi_i|$, με $\sum_i \mathbf{P}_i = \mathbf{I}$.

Μέτρηση σε κατάσταση $|\psi\rangle$

- Πιθανότητα του αποτελέσματος λ_i:

$$p_i = \langle\psi| \mathbf{P}_i |\psi\rangle = |\langle\psi_i|\psi\rangle|^2$$

- Κατάσταση μετά τη μέτρηση:

$$\frac{\mathbf{P}_i |\psi\rangle}{\sqrt{p_i}} = |\psi_i\rangle \text{ (ως προς μια φάση)}$$

Παράδειγμα: μέτρηση του X

Για $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ και $\mathbf{P}_\pm = |\pm\rangle\langle\pm| = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & \pm 1 \\ \pm 1 & 1 \end{bmatrix}$:

$$\mathbf{P}_+ |\psi\rangle = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \frac{a+b}{2}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{a+b}{\sqrt{2}}|+\rangle$$

$$\mathbf{P}_- |\psi\rangle = \frac{a-b}{\sqrt{2}}|-\rangle$$

Άρα $p_+ = \frac{|a+b|^2}{2}$ και $p_- = \frac{|a-b|^2}{2}$, με $p_+ + p_- = |a|^2 + |b|^2 = 1$, και η κατάσταση μετά τη μέτρηση είναι $|+\rangle$ ή $|-\rangle$.

- Για $|\psi\rangle = |0\rangle$: $p_+ = p_- = 50\%$.
- Για το $\mathbf{Z}$ (με $\mathbf{P}_0 = |0\rangle\langle 0|$, $\mathbf{P}_1 = |1\rangle\langle 1|$) βρίσκουμε $p_0 = |a|^2$ και $p_1 = |b|^2$, όπως ξέραμε.

Τελεστές και πίνακες

- Τα στοιχεία ενός πίνακα εξαρτώνται από τη *βάση* $|\psi_i\rangle$ που χρησιμοποιούμε για τις κυματοσυναρτήσεις. Άρα ο πίνακας είναι απλά ένας *τρόπος περιγραφής* μιας δράσης.
- Η δράση αυτή λέγεται *τελεστής* $(\hat{U}, \hat{H})$: μετασχηματίζει μια κυματοσυνάρτηση σε άλλη. Η εξέλιξη ενός συστήματος γράφεται:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}\,|\psi(0)\rangle$$

- Στη βάση $|\psi_i\rangle$ ο τελεστής περιγράφεται από πίνακα με στοιχεία

$$U_{pq} = \langle\psi_p|\,\hat{U}\,|\psi_q\rangle$$

- Αν αλλάξουμε βάση, ο πίνακας γίνεται $\bar{\mathbf{U}} = \mathbf{R}\mathbf{U}\mathbf{R}^{\mathrm{T}}$, όπου ο $\mathbf{R}$ είναι μοναδιαίος.

Παράδειγμα και τελεστές μέτρησης

Η πύλη NOT

Ο $\hat{U}$ ανταλλάσσει τα πλάτη: $\hat{U}|\psi\rangle = b|0\rangle + a|1\rangle$. Στη βάση $|0\rangle, |1\rangle$:

$$u_{12} = \langle 0|\hat{U}|1\rangle = \langle 0|0\rangle = 1,\ u_{21} = \langle 1|\hat{U}|0\rangle = 1,\ u_{11} = u_{22} = 0$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

- Ομοίως, κάθε μετρήσιμο μέγεθος έχει τελεστή $\hat{H}$ με πίνακα $h_{pq} = \langle \psi_p|\hat{H}|\psi_q\rangle$ και $\bar{\mathbf{H}} = \mathbf{RHR}^{\mathrm{T}}$ σε νέα βάση.
- Οι $\mathbf{H}$ και $\bar{\mathbf{H}}$ έχουν τις *ίδιες ιδιοτιμές*: το αποτέλεσμα μιας μέτρησης δεν εξαρτάται από τη βάση.

Ιδιότητες τελεστών

Οι ιδιότητες των πινάκων ορίζονται αντίστοιχα και για τους τελεστές:

- *Ανάστροφος*: $\langle\psi_p|\,\hat{A}^{\mathrm{T}}\,|\psi_q\rangle = \langle\psi_q|\,\hat{A}\,|\psi_p\rangle^*$. Γενικότερα για οποιεσδήποτε καταστάσεις: $\langle\phi|\,\hat{A}\,|\chi\rangle = \left\langle\hat{A}^{\mathrm{T}}\phi\middle|\chi\right\rangle$.
- *Γραμμικότητα*: $\hat{A}\,(a\,|\psi_a\rangle + b\,|\psi_b\rangle) = a\hat{A}\,|\psi_a\rangle + b\hat{A}\,|\psi_b\rangle$ (πάντα για τους τελεστές μας).
- *Αντίστροφος*: $\hat{A}^{-1}\hat{A}\,|\psi\rangle = |\psi\rangle$.
- *Μοναδιαίος* (εξέλιξη): $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^{\mathrm{T}}$.
- *Ερμιτιανός* (μέτρηση): $\hat{H}^{\mathrm{T}} = \hat{H}$, και τότε $\langle\phi|\,\hat{H}\,|\chi\rangle = \left\langle\hat{H}\phi\middle|\chi\right\rangle$.
- *Κανονικός*: $\hat{A}^{\mathrm{T}}\hat{A} = \hat{A}\hat{A}^{\mathrm{T}}$. Τα ιδιοδιανύσματά του $\hat{A}\,|\psi_\lambda\rangle = \lambda\,|\psi_\lambda\rangle$ αποτελούν ορθοκανονική βάση.

Τελεστές αντί για πίνακες

- Οι τελεστές είναι πιο θεμελιώδεις: δεν χρειάζονται συγκεκριμένη βάση. Ο πίνακάς τους σε μια βάση $|\psi_i\rangle$ είναι

$$A_{pq} = \langle\psi_p| \hat{A} |\psi_q\rangle$$

και σε νέα βάση $|\phi_i\rangle$ γίνεται $\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{R}\mathbf{A}\mathbf{R}^{\mathrm{T}}$, με $r_{pq} = \langle\phi_p|\psi_q\rangle$.

Ιδιοτιμές της NOT χωρίς πίνακες

Από $\hat{U}|\psi\rangle = b|0\rangle + a|1\rangle = \lambda(a|0\rangle + b|1\rangle)$ προκύπτουν $b = \lambda a$ και $a = \lambda b$, άρα $\lambda^2 = 1$ και $\lambda = \pm 1$. Με $a = \frac{1}{\sqrt{2}}$ τα ιδιοδιανύσματα είναι:

$$|\psi_{+1}\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}, \qquad |\psi_{-1}\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

Τελεστές προβολής

- Ο $\hat{P}_{\psi} = |\psi\rangle \langle\psi|$ είναι ο *τελεστής προβολής* στο $|\psi\rangle$:

$$\hat{P}_{\psi} |\phi\rangle = |\psi\rangle \langle\psi|\phi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle |\psi\rangle$$

- Για ορθοκανονική βάση $|\psi_i\rangle$ οι τελεστές προβολής αθροίζουν στον ταυτοτικό τελεστή:

$$\sum_{i=1}^{N} \hat{P}_{\psi_i} = \sum_{i=1}^{N} |\psi_i\rangle \langle\psi_i| = \hat{I}$$

- Γενικότερα ο $|\phi\rangle \langle\psi|$ προβάλλει το $|\omega\rangle$ στη διεύθυνση του $|\psi\rangle$ και του δίνει τη διεύθυνση του $|\phi\rangle$:

$$(|\phi\rangle \langle\psi|) |\omega\rangle = \langle\psi|\omega\rangle |\phi\rangle$$

- Κάθε τελεστής γράφεται με τα στοιχεία A_{qp} του πίνακά του:

$$\hat{A} = \sum_{q=1}^{N} \sum_{p=1}^{N} A_{qp} |\psi_q\rangle \langle\psi_p|$$

Παράδειγμα: προβολές της NOT

Για τα ιδιοδιανύσματα $|\psi_{\pm 1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \pm |1\rangle)$ της NOT:

$$\hat{P}_{\psi_{+1}} = \frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle)(\langle 0| + \langle 1|) = \frac{1}{2}\left(\hat{I} + |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|\right)$$

$$\hat{P}_{\psi_{-1}} = \frac{1}{2}(|0\rangle - |1\rangle)(\langle 0| - \langle 1|) = \frac{1}{2}\left(\hat{I} - |0\rangle\langle 1| - |1\rangle\langle 0|\right)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε $|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| = \hat{I}$. Πράγματι:

$$\hat{P}_{\psi_{+1}} + \hat{P}_{\psi_{-1}} = \hat{I}$$

Διαγωνιοποίηση τελεστών

- Ένας κανονικός τελεστής $\hat{A}$ έχει ορθοκανονική βάση από ιδιοδιανύσματα $|\phi_i\rangle$ με ιδιοτιμές λ_i.
- Σε αυτή τη βάση ο πίνακάς του είναι ο διαγώνιος Λ, με $\Lambda_{qq} = \lambda_q$ και $\Lambda_{qp} = 0$ για $q \neq p$.
- Άρα από τη γενική έκφραση $\hat{A} = \sum_{q,p} \Lambda_{qp} |\phi_q\rangle \langle\phi_p|$ μένουν μόνο οι διαγώνιοι όροι:

Διαγωνιοποιημένη μορφή

$$\hat{A} = \sum_{q=1}^{N} \lambda_q |\phi_q\rangle \langle\phi_q|$$

Ο τελεστής είναι άθροισμα προβολών στα ιδιοδιανύσματά του, με βάρη τις ιδιοτιμές.

Παράδειγμα: η πύλη NOT

Στη βάση $|0\rangle, |1\rangle$ ο πίνακας του $\hat{X}$ είναι $\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$, άρα

$$\hat{X} = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|$$

Οι ιδιοτιμές προκύπτουν από $\det(\mathbf{X} - \lambda\mathbf{I}) = 1 - \lambda^2 = 0$: $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = -1$, με ιδιοδιανύσματα

$$|\phi_1\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}, \qquad |\phi_2\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

Η διαγωνιοποιημένη μορφή είναι $\hat{X} = |\phi_1\rangle\langle\phi_1| - |\phi_2\rangle\langle\phi_2|$. Έλεγχος:

$$|\phi_1\rangle\langle\phi_1| = \tfrac{1}{2}\left(|0\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|\right)$$

$$|\phi_2\rangle\langle\phi_2| = \tfrac{1}{2}\left(|0\rangle\langle 0| - |0\rangle\langle 1| - |1\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|\right)$$

και η διαφορά τους είναι $|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|$, δηλαδή οι δύο μορφές ταυτίζονται.

Συναρτήσεις τελεστών

- Για συνάρτηση f με ανάπτυγμα Taylor ορίζουμε

$$f(\hat{A}) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{f^{(i)}(0)}{i!} \hat{A}^i, \qquad \text{π.χ. } \mathrm{e}^{\hat{A}} = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^i}{i!}$$

- Αν $\hat{A} = \sum_q \lambda_q |\psi_q\rangle \langle\psi_q|$, τότε λόγω ορθοκανονικότητας $\hat{A}^n = \sum_q \lambda_q^n |\psi_q\rangle \langle\psi_q|$.
- Αντικαθιστώντας στη σειρά Taylor προκύπτει:

Συνάρτηση τελεστή μέσω διαγωνιοποίησης

$$f(\hat{A}) = \sum_{q=1}^{N} f(\lambda_q) |\psi_q\rangle \langle\psi_q|$$

Εφαρμόζουμε την f στις ιδιοτιμές και κρατάμε τα ίδια ιδιοδιανύσματα.

Παράδειγμα: ο τελεστής $\mathrm{e}^{j\alpha\hat{X}}$

Για τον $\hat{X}$: $\hat{X} = |\phi_1\rangle\langle\phi_1| - |\phi_2\rangle\langle\phi_2|$ με $\lambda = \pm 1$ και $|\phi_{1,2}\rangle = \frac{|0\rangle \pm |1\rangle}{\sqrt{2}}$. Με $f(x) = \mathrm{e}^{j\alpha x}$:

$$\mathrm{e}^{j\alpha\hat{X}} = \mathrm{e}^{j\alpha}|\phi_1\rangle\langle\phi_1| + \mathrm{e}^{-j\alpha}|\phi_2\rangle\langle\phi_2|$$

Εφαρμογή για $\alpha = \pi/4$ στο $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{j}{\sqrt{2}}|1\rangle$:

$$\langle\phi_1|\psi\rangle = \frac{1-j}{2}, \qquad \langle\phi_2|\psi\rangle = \frac{1+j}{2}$$

$$\mathrm{e}^{j\frac{\pi}{4}} = \frac{1+j}{\sqrt{2}} \Rightarrow \mathrm{e}^{j\frac{\pi}{4}\hat{X}}|\psi\rangle = \frac{1+j}{\sqrt{2}}\frac{1-j}{2}|\phi_1\rangle + \frac{1-j}{\sqrt{2}}\frac{1+j}{2}|\phi_2\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}|\phi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\phi_2\rangle = |0\rangle$$

Μέσες τιμές μεγεθών

- Το αποτέλεσμα H μιας μέτρησης είναι τυχαία μεταβλητή: παίρνει την τιμή λ_i με πιθανότητα $P_i = \langle\psi|\psi_i\rangle \langle\psi_i|\psi\rangle$.
- Με $\hat{H} = \sum_i \lambda_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i|$ έχουμε

$$\langle\psi| \hat{H} |\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \langle\psi|\psi_i\rangle \langle\psi_i|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i P_i$$

Μέση τιμή

$$\mathbb{E}\{H\} = \langle\psi| \hat{H} |\psi\rangle = \langle\psi| \mathbf{H} |\psi\rangle$$

$$\mathbb{E}\{f(H)\} = \sum_i f(\lambda_i) P_i = \langle\psi| f(\hat{H}) |\psi\rangle$$

- Π.χ. $\mathbb{E}\{H^2\} = \langle\psi| \hat{H}^2 |\psi\rangle$.

Παράδειγμα: μέση τιμή μέτρησης

Για $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ μετράμε με τον $\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} 0 & -j \\ j & 0 \end{bmatrix}$ (που είναι Ερμιτιανός):

$$\mathbf{Y}|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} -j \\ j \end{bmatrix}$$

$$\mathbb{E}\{Y\} = \langle\psi|\mathbf{Y}|\psi\rangle = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -j \\ j \end{bmatrix} = \frac{-j+j}{2} = 0$$

Άρα η μέση τιμή του spin κατά y είναι $\bar{s}_y = \frac{\hbar}{2}\mathbb{E}\{Y\} = 0$: τα αποτελέσματα ± 1 είναι ισοπίθανα.

- Για το $\mathbf{Z}$ και τυχαίο $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$: $\mathbb{E}\{Z\} = |a|^2 - |b|^2$.