

1 Εισαγωγή

1.1 Qubit εναντίον bit

Στην πληροφορική είμαστε όλοι αρκετά εξοικειωμένοι με το *bit*. Πρόκειται για την βασική μονάδα της πληροφορίας στην οποία μετράμε για παράδειγμα την μνήμη του υπολογιστή μας ή τον σκληρό του δίσκο. Κάθε bit που χρησιμοποιούμε μπορεί να είναι μηδέν 0 ή 1 και όποιος έχει παρακολουθήσει το μάθημα της Λογικής Σχεδίασης θα θυμάται ότι οι δύο αυτές καταστάσεις μπορεί να αντιστοιχηθούν για παράδειγμα σε τιμές της τάσης: το 0 μπορεί να είναι μία χαμηλή τάση για παράδειγμα 0 V και το 1 μία υψηλή τάση, π.χ. 5 V. Βέβαια οι τιμές των τάσεων εξαρτάται από τις τεχνολογίες υλοποίησης και πολλές φορές το 0 και το 1 αντιστοιχούν σε κάποια διαστήματα τιμών. Για παράδειγμα για την τεχνολογία CMOS όπως αυτή εφαρμόζεται στους μικροεπεξεργαστές, μπορεί το 0 να αντιστοιχεί σε ένα διάστημα τιμών τάσης 0 – 0.3 V και το 1 στο 0.7 – 1 V. Ο λόγος για τον οποίο χρησιμοποιούνται χαμηλές τιμές είναι για να μειωθεί η κατανάλωση ισχύος, εφόσον η ισχύς είναι ανάλογη του τετραγώνου της τάσης.

Όταν κανείς αρχίσει να ασχολείται με τους κβαντικούς υπολογιστές, ίσως το πρώτο πράγμα που θα ακούσει είναι το *qubit*. Όπως και το bit έτσι και το qubit αποτυπώνει την πληροφορία στον *κβαντικό* κόσμο, δηλαδή στον κόσμο των μικρών διαστάσεων. Θα περίμενε κανείς ότι δεν υπάρχει κάποια ουσιώδης διαφορά μεταξύ ενός bit και ενός qubit και πως ότι γνωρίζουμε για το bit θα εφαρμόζονται απευθείας στον κόσμο των qubit. Θα δούμε όμως ότι οι νόμοι που διέπουν τον κβαντικό κόσμο είναι πολύ διαφορετικοί από τους νόμους που έχουμε συνηθίσει και επομένως τα qubit έχουν μερικές πολύ ενδιαφέρουσες ιδιότητες.

Το πρώτο ερώτημα είναι τι μπορεί να είναι ένα qubit. Σε ποιο φυσικό σύστημα αντιστοιχεί; Πως μπορούμε να το αποθηκεύσουμε και να το επεξεργαστούμε; Ας θεωρήσουμε ένα ηλεκτρόνιο, που όπως μάθαμε στη φυσική του Λυκείου (ελπίζω) είναι ένα σωματίδιο το οποίο περιστρέφεται γύρω από τον πυρήνα των ατόμων. Μαζί με τα πρωτόνια και τα νετρόνια που βρίσκονται στον πυρήνα των ατόμων, τα ηλεκτρόνια συνθέτουν την ύλη όπως την βλέπουμε γύρω μας. Τα ηλεκτρόνια (όπως και άλλα σωματίδια) έχουν τρεις βασικές ιδιότητες. Με τις δύο πρώτες είμαστε αρκετά εξοικειωμένοι. Πρόκειται για την μάζα τους m που είναι πολύ μικρή 9.1×10^{-31} Kg και το φορτίο τους που επίσης είναι πολύ μικρό, $q = -1.602 \times 10^{-19}$ Cb. Οπότε σύμφωνα με την φυσική που γνωρίζουμε ως τώρα, σκεφτόμαστε τα ηλεκτρόνια ως μικροσκοπικές μπάλες του μπιλιάρδου και εφαρμόζουμε τους τρεις νόμους του Νεύτωνα και τον νόμο του Coulomb για να περιγράψουμε την κίνηση του ηλεκτρονίου γύρω από τον πυρήνα. Ωστόσο, αυτό οδηγεί σε ασταθή συμπεριφορά: ένα ηλεκτρόνιο που γυρίζει συνεχώς γύρω από τον πυρήνα του ατόμου στην ουσία αλλάζει συνέχεια την κατεύθυνση της ταχύτητας του και επομένως αντιστοιχεί σε χρονικά μεταβαλλόμενο ρεύμα που πρέπει να εκπέμπει ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία όπως για παράδειγμα οι κεραίες εκπομπής της κινητής τηλεφωνίας. Επομένως, αφού το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο έχει κάποια ενέργεια, το ηλεκτρόνιο θα έχανε σταδιακά την ενέργεια του και θα έπεφτε στον πυρήνα. Άρα η ύλη θα ήταν ασταθής (και φυσικά δεν θα υπήρχαμε εμείς για θέσουμε αυτά τα ερωτήματα!). Επομένως κάτι διαφορετικό θα πρέπει να συμβαίνει στο μικρόκοσμο ώστε το ηλεκτρόνιο να μην χάνει την ενέργεια του και αυτό το διαφορετικό το περιγράφει η *κβαντική μηχανική*. Η κβαντική μηχανική αντικαθιστά τους νόμους του Νεύτωνα και περιγράφει τη συμπεριφορά όλων των πραγμάτων στο μικρόκοσμο.

Υπάρχει και μία τρίτη ιδιότητα η οποία χαρακτηρίζει ένα ηλεκτρόνιο: Το *spin* είναι μια από τις θεμελιώδεις ιδιότητες των στοιχειωδών σωματιδίων. Παρόλο που συχνά περιγράφεται διαισθητικά ως ιδιοστροφορμή εντούτοις δεν αντιστοιχεί σε μία περιστροφή του ηλεκτρονίου γύρω από τον εαυτό του αν και μερικές φορές έχει επικρατήσει να το σκεφτόμαστε έτσι. Το spin καθορίζει, μεταξύ άλλων, τον τρόπο με τον οποίο το ηλεκτρόνιο αλληλεπιδρά με μαγνητικά πεδία. Μπορούμε να φανταστούμε ότι το ηλεκτρόνιο συμπεριφέρεται σαν ένας πολύ μικρός μαγνήτης με έναν βόρειο και έναν νότιο πόλο. Το spin μπορούμε να το μετρήσουμε κατά μήκος ενός άξονα, π.χ. τον άξονα των z . Σύμφωνα με την κβαντική μηχανική το αποτέλεσμα της μέτρησης του spin s μπορεί να έχει δύο διαφορετικά αποτελέσματα:

$$s = \frac{\hbar}{2}, \quad s = -\frac{\hbar}{2} \quad (1.1)$$

όπου το $\hbar$ ονομάζεται ανηγμένη σταθερά του Planck και ισούται με $\hbar \approx 1.055 \times 10^{-34}$ Js.

1.2 Πως μετράμε το spin;

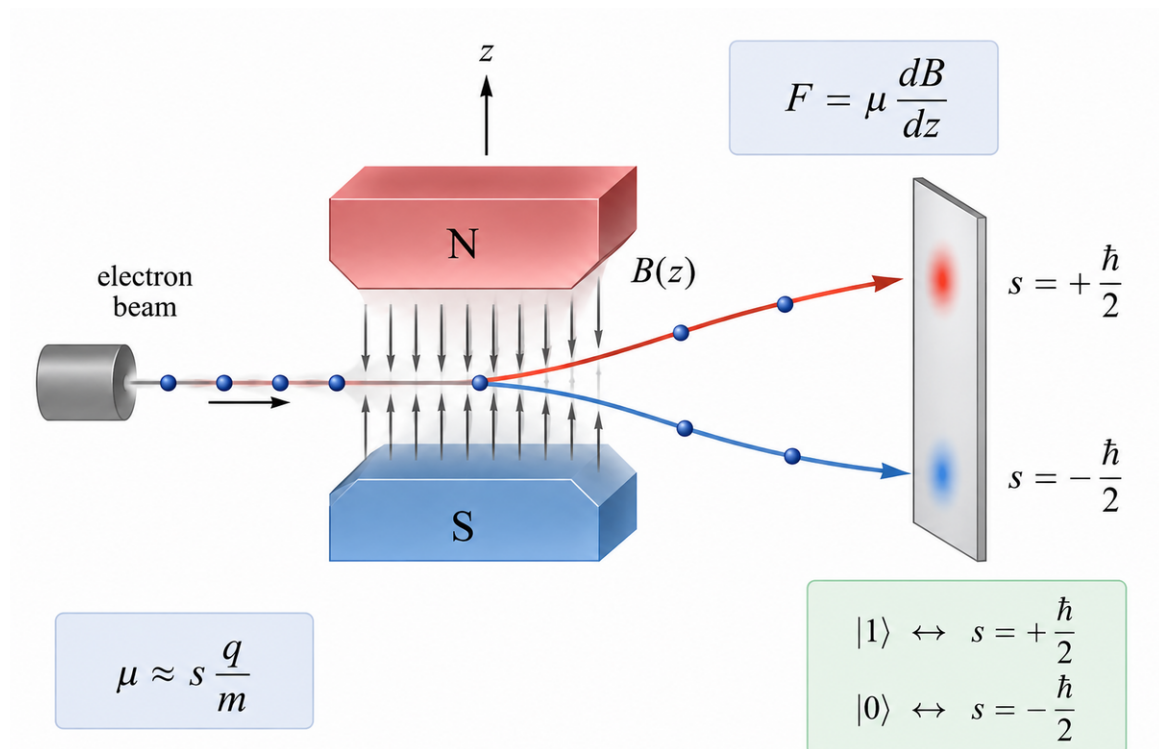
Οπότε ας δούμε πως μπορούμε να μετρήσουμε το spin ενός ηλεκτρονίου. Αν θεωρήσουμε ένα μαγνητικό πεδίο B που μεταβάλλεται ως προς τον άξονα z τότε η δύναμη που ασκείται σε ένα ηλεκτρόνιο δίνεται από τον τύπο:

$$F = \mu \frac{dB}{dz} \quad (1.2)$$

όπου ο παράγοντας μ είναι αυτό που ονομάζουμε η ιδιοστροφορμή του σωματιδίου και το οποίο δίνεται από την σχέση

$$\mu \approx s \frac{q}{m} \quad (1.3)$$

Οπότε για θετικό spin s , η δύναμη θα είναι θετική ενώ για αρνητικό s θα είναι αρνητική. Επομένως ανάλογα με το προς τα που θα κινηθεί το σωματίδιο καταλαβαίνουμε αν το spin είναι θετικό ($s = \frac{\hbar}{2} > 0$) ή αρνητικό ($s = -\frac{\hbar}{2} < 0$).

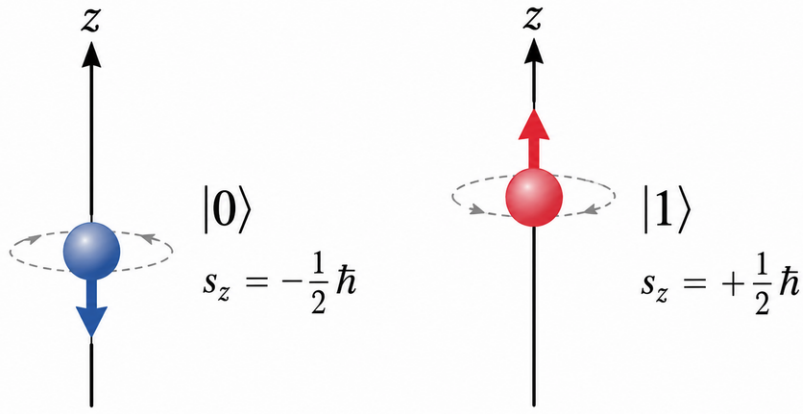


Σχήμα 1.1: Μέτρηση του spin ενός ηλεκτρονίου με ένα ανομοιόμορφο μαγνητικό πεδίο (πείραμα Stern-Gerlach): η δέσμη διαχωρίζεται σε δύο, ανάλογα με το πρόσημο του spin.

Τι θα γινόταν τώρα αν αποφασίζαμε με κάποιο τρόπο να κωδικοποιήσουμε την κατάσταση 1 στο θετικό spin του ηλεκτρονίου $s = \frac{\hbar}{2}$ και το $s = -\frac{\hbar}{2}$ στην κατάσταση 0; Έτσι θα είχαμε πολύ αποδοτική αποθήκευση των bit, καθώς ένα bit θα χρειαζόνταν μόνο ένα ηλεκτρόνιο για την αναπαράσταση του. Ωστόσο το bit τώρα θα αποθηκευόταν σε ένα σύστημα που υπακούει τους νόμους της κβαντικής μηχανικής, δηλαδή σε ένα **κβαντικό σύστημα**. Τι συνέπειες θα είχε αυτό για την συμπεριφορά του;

1.3 Η κυματοσυνάρτηση

Είναι καιρός να χρησιμοποιήσουμε την κβαντική μηχανική για να καταλάβουμε λίγο καλύτερα πως περιγράφεται το bit που αποθηκεύεται στο spin ενός ηλεκτρονίου. Η εξίσωση του Schrödinger αποτελεί τη θεμελιώδη εξίσωση της Κβαντικής Μηχανικής και περιγράφει τον τρόπο με τον οποίο εξελίσσεται η κβαντική κατάσταση ενός φυσικού συστήματος στον χρόνο. Αντίστοιχα με τον δεύτερο νόμο του Νεύτωνα, η εξίσωση του Schrödinger καθορίζει την εξέλιξη των κβαντικών συστημάτων, επιτρέποντας τον υπολογισμό της κυματοσυνάρτησης του σωματιδίου. Η **κυματοσυνάρτηση** περιέχει όλη την πληροφορία που μπορεί να



Σχήμα 1.2: Οι δύο καταστάσεις υπολογιστικής βάσης ως αρνητικό και θετικό spin του ηλεκτρονίου ως προς τον άξονα z : $|0\rangle \leftrightarrow s_z = -\hbar/2$ και $|1\rangle \leftrightarrow s_z = +\hbar/2$.

είναι γνωστή για το σύστημα και μέσω αυτής μπορούν να υπολογιστούν οι πιθανότητες των αποτελεσμάτων κάθε δυνατής μέτρησης. Η εξίσωση αυτή συνδέει την ενέργεια του συστήματος με τον τελεστή Hamilton (Χαμιλτονιανή), ο οποίος περιγράφει τη συνολική κινητική και δυναμική ενέργεια του συστήματος. Η σημασία της είναι καθοριστική, καθώς αποτελεί το σημείο εκκίνησης για τη μελέτη ατόμων, μορίων, στερεών και, γενικότερα, κάθε κβαντικού συστήματος, ενώ παράλληλα παρέχει το θεωρητικό υπόβαθρο για την κατανόηση των κβαντικών υπολογιστών και της επεξεργασίας κβαντικής πληροφορίας.

Πριν αρχίσουμε να γράφουμε εξισώσεις πρέπει πρώτα να ξεκαθαρίσουμε τι είναι η κυματοσυνάρτηση. Στην περίπτωση του spin του ηλεκτρονίου είδαμε ότι μετά την μέτρηση το ηλεκτρόνιο μπορεί να βρεθεί στην κατάσταση που αντιστοιχεί στο λογικό 1, δηλαδή $s = \frac{\hbar}{2} > 0$ ή στο λογικό 0 δηλαδή $s = -\frac{\hbar}{2} < 0$. Στη φυσική που μάθαμε στο Λύκειο, είναι προφανές ότι το σύστημα προϋπήρχε σε αυτή την κατάσταση και πριν τη μέτρηση. Λογικό θα πείτε, αφού πως γίνεται η μέτρηση να επηρεάζει το σύστημα; Και όμως, ακόμα και στη καθημερινή μας εμπειρία έχουμε περιπτώσεις όπου ο παρατηρητής ενός συστήματος μπορεί να επηρεάσει την κατάσταση του. Για παράδειγμα εάν παρατηρείτε μία γάτα (πιστεύστε με οι γάτες έχουν ιδιαίτερη σημασία στην ερμηνεία της συμπεριφοράς των qubit) τότε πιθανώς η γάτα να σας αντιληφθεί και να αλλάξει την συμπεριφορά της ανάλογα. Στην κβαντική μηχανική, το αποτέλεσμα της μέτρησης δεν καθορίζει πλήρως και την κατάσταση του συστήματος πριν την μέτρηση.

Ας δούμε λίγο πως έχουν τα πράγματα στην περίπτωση ενός qubit που αποτυπώνεται στο spin του ηλεκτρονίου. Μετά την μέτρηση είπαμε ότι θα βρούμε είτε $s = \frac{\hbar}{2} > 0$ είτε $s = -\frac{\hbar}{2} < 0$ και αντιστοιχούμε τις τιμές αυτές του spin στην κατάσταση 1 και 0. Οι φυσικοί έχουν έναν ειδικό συμβολισμό για κβαντικές καταστάσεις αυτής της μορφής που είναι αρκετά χρήσιμος όπως θα δούμε στη συνέχεια. Τις γράφουν $|1\rangle$ και $|0\rangle$. Οπότε το $|1\rangle$ είναι η κατάσταση στην οποία $s = \frac{\hbar}{2} > 0$ και $|0\rangle$ είναι η κατάσταση στην οποία $s = -\frac{\hbar}{2} < 0$. Το περίεργο όμως είναι ότι η κβαντική μηχανική λέει ότι η κατάσταση $|\psi\rangle$ του συστήματος πριν τη μέτρηση μπορεί να είναι σε μία υπέρθεση καταστάσεων, π.χ.

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle \quad (1.4)$$

Τι ακριβώς σημαίνει η παραπάνω εξίσωση; Καταρχήν να σημειώσουμε ότι οι συντελεστές a και b είναι μιγαδικοί αριθμοί. Σύμφωνα με τους κανόνες της κβαντικής θεωρίας που θα συζητήσουμε και παρακάτω, εάν το σύστημα βρίσκεται στην παραπάνω κατάσταση τότε η πιθανότητα μετά την μέτρηση να βρούμε $|0\rangle$ είναι ίση με $|a|^2$ ενώ η πιθανότητα να βρούμε $|1\rangle$ είναι $|b|^2$. Επομένως πριν τη μέτρηση το σύστημα βρίσκεται σε μία κατάσταση $|\psi\rangle$ που είναι υπέρθεση (δηλαδή περιέχει) και την $|0\rangle$ και την $|1\rangle$. Μετά όμως την μέτρηση το αποτέλεσμα θα είναι είτε $|0\rangle$ είτε $|1\rangle$ και οι συντελεστές a και b σχετίζονται με τις πιθανότητες να πάρουμε ένα από τα δύο αποτελέσματα. Προφανώς θα πρέπει οι πιθανότητες να αθροίζονται στο 1, δηλαδή $|a|^2 + |b|^2 = 1$.

Ποιο όμως είναι το βαθύτερο νόημα του $|\psi\rangle$; Υποψιαζόμαστε ότι περιγράφει την κατάσταση του qubit πριν την μέτρηση αλλά πως μπορεί να επιτρέπει την υπέρθεση δύο καταστάσεων; πως είναι δυνατόν το qubit

να είναι και στην κατάσταση $|0\rangle$ και στην κατάσταση $|1\rangle$ πριν την μέτρηση. Και τι ακριβώς σημαίνει να βρίσκεται σε μία τέτοια κατάσταση; Αυτά είναι βαθύτερα προβλήματα που έχουν να κάνουν με την κατανόηση της κβαντικής μηχανικής και τα οποία όσο και αν φαίνεται περίεργο δεν έχουν απαντηθεί οριστικά εδώ και έναν αιώνα. Θα επανέλθουμε σε μερικές πιθανές ερμηνείες του $|\psi\rangle$ σε επόμενο μάθημα αλλά μην περιμένετε να βρείτε μία πολύ ικανοποιητική απάντηση. Δεν μπορούμε να απαντήσουμε καν στο εάν το $|\psi\rangle$ είναι κάτι πραγματικό ή ένα απλό εργαλείο για να κάνουμε την δουλειά μας ...

Παράδειγμα 1.1: Ισοπίθανη υπέρθεση

Ας θεωρήσουμε την κατάσταση:

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

Τότε εφόσον $a = b = \frac{1}{\sqrt{2}}$ και $|a|^2 = |b|^2 = \frac{1}{2}$ δηλαδή θα έχουμε 50% πιθανότητα να μετρήσουμε το qubit στην κατάσταση $|0\rangle$ και 50% στην κατάσταση $|1\rangle$.

1.4 Ket και Bra

Ανεξάρτητα του τι είναι οι κυματοσυναρτήσεις, επιλέγουμε τον συμβολισμό $|\psi\rangle$ που ονομάζεται “ket του ψ ”. Πρόκειται για τον συμβολισμό του Dirac που είναι αρκετά χρήσιμος και στα παρακάτω. Μάλιστα αντί να γράφουμε:

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle \quad (1.5)$$

μπορούμε να θεωρούμε ότι τα a και b είναι συντεταγμένες ενός διανύσματος (a, b) που αντιπροσωπεύει το $|\psi\rangle$. Συχνά γράφουμε το $|\psi\rangle$ και ως πίνακα στήλη,

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \quad (1.6)$$

Ο παραπάνω πίνακας έχει δύο γραμμές και μία στήλη, είναι δηλαδή 2×1 .

Γενικότερα για ένα πίνακα A που είναι $M \times N$ και έχει στοιχεία a_{ij} , δηλαδή:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1M} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{N1} & \cdots & a_{NM} \end{bmatrix} \quad (1.7)$$

μπορούμε να ορίσουμε τον *ανάστροφο* πίνακα A^T που προκύπτει αν κάνουμε τις στήλες γραμμές και πάρουμε τα μιγαδικά συζυγή, δηλαδή:

$$A^T = \begin{bmatrix} a_{11}^* & \cdots & a_{N1}^* \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{1M}^* & \cdots & a_{NM}^* \end{bmatrix} \quad (1.8)$$

Ο ανάστροφος του $|\psi\rangle$ είναι ο:

$$|\psi\rangle^T = [a^* \quad b^*] \quad (1.9)$$

ή όπως θα το έγραφε ο Dirac:

$$\langle\psi| = [a^* \quad b^*] \quad (1.10)$$

Επομένως επιλέγουμε να συμβολίσουμε τον ανάστροφο του $|\psi\rangle$ ως $\langle\psi|$ το οποίο το διαβάζουμε ως “bra του ψ ”

Παράδειγμα 1.2: Ket και bra με μιγαδικό συντελεστή

Για την κατάσταση:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{j}{\sqrt{2}}|1\rangle$$

(προσέξτε έχουμε προσθέσει ένα επιπλέον j στον συντελεστή του $|1\rangle$) μπορούμε να δούμε ότι:

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

και

$$\langle\psi| = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & -j \end{bmatrix}$$

1.5 Εσωτερικό Γινόμενο

Ας θεωρήσουμε δύο κυματοσυναρτήσεις $|\phi\rangle$ και $|\psi\rangle$ οι οποίες καθορίζονται ως εξής:

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$$

$$|\phi\rangle = c|0\rangle + d|1\rangle = \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix}$$

Εφόσον το $\langle\phi|$ είναι ένας πίνακας 1×2 και το $|\psi\rangle$ είναι ένας πίνακας 2×1 τότε προκύπτει ότι μπορούμε να υπολογίσουμε το γινόμενο τους $\langle\phi||\psi\rangle$. Θυμηθείτε ότι στη γενικότερη περίπτωση εάν έχουμε έναν πίνακα A με στοιχεία a_{mn} ο οποίος είναι $M \times N$ και ένας πίνακα B ο οποίος είναι $N \times Q$ με στοιχεία β_{nq} , τότε το γινόμενο $\Gamma = AB$ είναι ένας πίνακας με διαστάσεις $M \times Q$ που έχει στοιχεία γ_{mq} που καθορίζονται ως εξής:

$$\gamma_{mq} = \sum_{n=1}^N a_{mn} \beta_{nq} \quad (1.11)$$

Οπότε στην περίπτωση όπου πολλαπλασιάσουμε $\langle\phi|$ που είναι 1×2 και το $|\psi\rangle$ που είναι 2×1 , το τελικό αποτέλεσμα θα είναι 1×1 δηλαδή ένας απλός αριθμός:

$$\langle\phi||\psi\rangle = \begin{bmatrix} c^* & d^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = ac^* + bd^* \quad (1.12)$$

Το $\langle\phi||\psi\rangle$ το συμβολίζουμε ακόμα πιο απλά ως $\langle\phi|\psi\rangle$ και το αποκαλούμε το “braket του ϕ με το ψ ”. Οπότε γράφουμε:

$$\langle\phi|\psi\rangle = ac^* + bd^* \quad (1.13)$$

Παράδειγμα 1.3: Υπολογισμός ενός braket

Έστω ότι $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{j}{\sqrt{2}}|1\rangle$ και $|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$. Τότε θα έχουμε

$$\langle\phi|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{j}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{1+j}{2}$$

Υπάρχουν μερικές πολύ χρήσιμες ιδιότητες για το braket που θα χρησιμοποιήσουμε και παρακάτω. Η πρώτη είναι η συζυγής συμμετρία, δηλαδή:

$$\langle\psi|\phi\rangle = a^*c + b^*d = (ac^* + bd^*)^* = \langle\phi|\psi\rangle^* \quad (1.14)$$

Η παραπάνω ιδιότητα σημαίνει ότι εάν αντιμεταθέσουμε τη σειρά των ψ και ϕ τότε παίρνουμε το μιγαδικό συζυγές. Μία δεύτερη χρήσιμη ιδιότητα είναι η γραμμική ιδιότητα, δηλαδή

$$\langle\phi|(\psi + \omega)\rangle = \langle\phi|\psi\rangle + \langle\phi|\omega\rangle \quad (1.15)$$

Αυτή η ιδιότητα είναι εύκολο να δειχθεί και το αφήνουμε σαν άσκηση. Επίσης έχουμε και:

$$\langle\phi|(\lambda\psi)\rangle = \lambda \langle\phi|\psi\rangle \quad (1.16)$$

όπου το λ είναι μία μιγαδική σταθερά. Δηλαδή στην ουσία το λ “βγαίνει” έξω από το εσωτερικό γινόμενο. Επίσης μπορούμε να δείξουμε ότι

$$\langle \psi | \psi \rangle = aa^* + bb^* = |a|^2 + |b|^2 \quad (1.17)$$

Επομένως για κάθε $|\psi\rangle$ το $\langle \psi | \psi \rangle$ θα είναι θετικός αριθμός ή μηδέν εφόσον πάντα για τους μιγαδικούς αριθμούς έχουμε $|a|^2 \geq 0$ και $|b|^2 \geq 0$. Επίσης βλέπουμε ότι εάν $\langle \psi | \psi \rangle = 0$ τότε θα έχουμε $a = b = 0$ και επομένως $|\psi\rangle = 0$. Βάσει των ιδιοτήτων αυτών ονομάζουμε συχνά το bracket εσωτερικό γινόμενο των $|\phi\rangle$ και $|\psi\rangle$ καθώς οποιαδήποτε σχέση που απεικονίζει τις κυματοσυναρτήσεις $|\phi\rangle$ και $|\psi\rangle$ σε έναν μιγαδικό αριθμό και η οποία πληρεί τις ιδιότητες αυτές καλείται εσωτερικό γινόμενο.

Παράδειγμα 1.4: Ορθοκανονικότητα των $|0\rangle, |1\rangle$

Εφόσον:

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

είναι εύκολο να δείξουμε ότι:

$$\langle 0 | 0 \rangle = 1 \times 1 + 0 \times 0 = 1$$

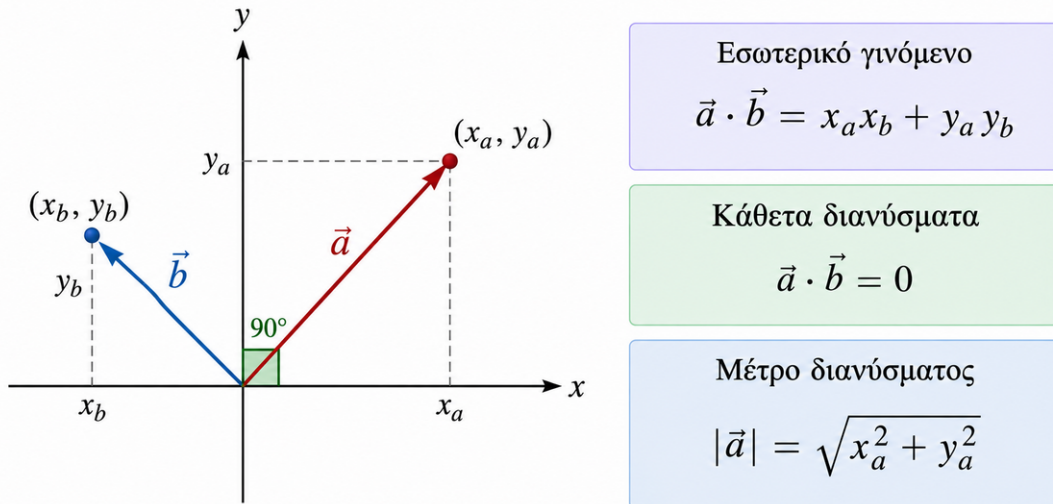
$$\langle 1 | 1 \rangle = 0 \times 0 + 1 \times 1 = 1$$

$$\langle 0 | 1 \rangle = 1 \times 0 + 0 \times 1 = 0$$

$$\langle 1 | 0 \rangle = 0 \times 1 + 1 \times 0 = 0$$

1.6 Ορθοκανονική Βάση

Αν θυμάστε, δύο κανονικά διανύσματα $\vec{a} = (x_a, y_a)$ και $\vec{b} = (x_b, y_b)$ στο επίπεδο είναι μεταξύ τους κάθετα όταν το εσωτερικό γινόμενο τους $\vec{a} \cdot \vec{b} = x_a x_b + y_a y_b$ είναι ίσο με μηδέν. Επίσης το μήκος ή μέτρο $|\vec{a}|$ ενός διανύσματος είναι $|\vec{a}| = \sqrt{x_a^2 + y_a^2}$. Οπότε είναι εύκολο να δούμε ότι το μέτρο ενός διανύσματος είναι $|\vec{a}|^2 = \vec{a} \cdot \vec{a}$.



Σχήμα 1.3: Το εσωτερικό γινόμενο, η καθετότητα και η νόρμα δύο διανυσμάτων $\vec{a}, \vec{b}$ στο επίπεδο.

Για τα διανύσματα $\hat{x} = (1, 0)$ και $\hat{y} = (0, 1)$ βλέπουμε ότι $\hat{x} \cdot \hat{y} = 0$ και $\hat{x} \cdot \hat{x} = \hat{y} \cdot \hat{y} = 1$. Επίσης κάθε διάνυσμα του επιπέδου παράγεται από τα $\hat{x}$ και $\hat{y}$ ως γραμμικός συνδυασμός τους, για παράδειγμα:

$$\vec{a} = (x_a, y_a) = (x_a, 0) + (0, y_a) = x_a(1, 0) + y_a(0, 1) = x_a \hat{x} + y_a \hat{y}$$

Τα $\hat{x}$ και $\hat{y}$ επομένως είναι κάθετα μεταξύ τους, έχουν μέτρο ίσο με ένα και κάθε άλλο διάνυσμα του επιπέδου είναι γραμμικός συνδυασμός τους οπότε ονομάζονται *ορθοκανονική βάση*. Το προηγούμενο παράδειγμα μας

λέει ότι τα $|0\rangle$ και $|1\rangle$ παίζουν τον ίδιο ρόλο με τα $\hat{x}$ και $\hat{y}$. Επομένως και τα $|0\rangle$ και $|1\rangle$ είναι μία ορθοκανονική βάση που παράγει όλα τα $|\psi\rangle$.

Ωστόσο πρέπει να κάνουμε μία μικρή παρατήρηση: τα $|\psi\rangle$ που μας ενδιαφέρουν εμάς είναι αυτά που αντιστοιχούν σε qubit. Όπως είδαμε και προηγουμένως, η πιθανότητα να έχουμε $|0\rangle$ μετά την μέτρηση είναι $|a|^2$ ενώ η πιθανότητα να έχουμε $|1\rangle$ είναι $|b|^2$ και $|a|^2 + |b|^2 = 1$. Οπότε οι κυματοσυναρτήσεις που μας ενδιαφέρουν εμάς έχουν το χαρακτηριστικό:

$$\langle\psi|\psi\rangle = |a|^2 + |b|^2 = 1$$

Αν δεν ισχύει η παραπάνω σχέση, τότε το $|\psi\rangle$ δεν μπορεί να είναι κυματοσυνάρτηση ενός πραγματικού συστήματος.

1.7 Κυματοσυνάρτηση σε μεγαλύτερες διαστάσεις

Θα δούμε παρακάτω ότι μπορεί να έχουμε κυματοσυναρτήσεις που περιγράφουν περισσότερα του ενός qubit. Επομένως το $|\psi\rangle$ δεν περιορίζεται απαραίτητα στις δύο διαστάσεις αλλά μπορούμε να έχουμε κυματοσυναρτήσεις σε περισσότερες διαστάσεις, π.χ.

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{bmatrix}$$

Στην περίπτωση αυτή πάλι θα πρέπει το άθροισμα των τετραγώνων των πλατών να ισούται με την μονάδα,

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

και επίσης πάλι ορίζουμε το $\langle\psi|$ να είναι το ανάστροφο του $|\psi\rangle$, δηλαδή:

$$\langle\psi| = [a^* \quad b^* \quad c^* \quad d^*]$$

Με παρόμοιο τρόπο γενικεύουμε και τον ορισμό του εσωτερικού γινομένου. Αν

$$|\phi\rangle = \begin{bmatrix} e \\ f \\ g \\ h \end{bmatrix}$$

τότε:

$$\langle\psi|\phi\rangle = e^*a + f^*b + g^*c + h^*d$$

Δεδομένου ότι το άθροισμα των τετραγώνων των πλατών να ισούται με την μονάδα, είναι εύκολο να δούμε ότι όπως και στην περίπτωση των δύο διαστάσεων,

$$\langle\phi|\phi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1$$

1.8 Πως επηρεάζουμε ένα qubit;

Πως μπορούμε να επεμβούμε σε ένα qubit; Είδαμε ότι μία πρώτη ενέργεια που μπορούμε να κάνουμε είναι να το μετρήσουμε. Τότε στην περίπτωση αυτή η κυματοσυνάρτηση από $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ μετατρέπεται σε $|0\rangle$ με πιθανότητα $|a|^2$ και $|1\rangle$ με πιθανότητα $|b|^2$. Στη κβαντική μηχανική κάνουμε λόγο για την *κατάρρευση* της κυματοσυνάρτησης: από μία υπέρθεση του $|0\rangle$ και του $|1\rangle$ πάμε σε κάτι που είναι καθαρά $|0\rangle$ ή καθαρά $|1\rangle$.

Πέρα από την μέτρηση του qubit μπορούμε να το επηρεάσουμε και με άλλους τρόπους. Στην περίπτωση όπου το qubit αποτυπώνεται στο spin ενός ηλεκτρονίου τότε εφαρμόζοντας κάποιο μαγνητικό πεδίο. Το πως

ακριβώς αλλάζει η κατάσταση του qubit παρουσία ενός μαγνητικού πεδίου περιγράφεται από την εξίσωση του Schrödinger:

$$j \frac{d}{dt} |\psi\rangle = -\frac{q}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} |\psi\rangle \quad (1.18)$$

Η παραπάνω εξίσωση περιγράφει πως εξελίσσεται η κυματοσυνάρτηση $|\psi\rangle$ όσο περνάει ο χρόνος t . Το $\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z)$ είναι το διάνυσμα του μαγνητικού πεδίου ενώ το $\boldsymbol{\sigma}$ είναι ένα (κάπως περίεργο διάνυσμα) που έχει ως στοιχεία πίνακες (!),

$$\boldsymbol{\sigma} = (\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z})$$

όπου οι πίνακες $\mathbf{X}$, $\mathbf{Y}$ και $\mathbf{Z}$ ονομάζονται πίνακες Pauli και δίνονται από την σχέση:

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

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} 0 & -j \\ j & 0 \end{bmatrix}$$

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

Επομένως όταν γράφουμε $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$ εννοούμε:

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{X}B_x + \mathbf{Y}B_y + \mathbf{Z}B_z$$

Ας πάρουμε τώρα την απλή περίπτωση όπου έχουμε μόνο μαγνητικό πεδίο στην διεύθυνση του z . Τότε θα ισχύει $B_x = B_y = 0$ και επομένως

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{Z}B_z = \begin{bmatrix} B_z & 0 \\ 0 & -B_z \end{bmatrix}$$

Τότε εάν υποθέσουμε ότι $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$, το πρώτο μέρος της εξίσωσης (1.18) θα γίνει:

$$j \frac{d}{dt} |\psi\rangle = j \begin{bmatrix} \frac{da}{dt} \\ \frac{db}{dt} \end{bmatrix} \quad (1.19)$$

Το δεύτερο μέρος της (1.18) θα είναι:

$$-\frac{q}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} |\psi\rangle = \begin{bmatrix} -\frac{qB_z}{2m}a \\ \frac{qB_z}{2m}b \end{bmatrix} \quad (1.20)$$

Επομένως συνδυάζοντας τις δύο εξισώσεις παίρνουμε ένα σύστημα εξισώσεων που καθορίζει την εξέλιξη των συντελεστών του qubit:

$$j \frac{da}{dt} = -\frac{qB_z}{2m}a \quad (1.21\alpha')$$

$$j \frac{db}{dt} = \frac{qB_z}{2m}b \quad (1.21\beta')$$

Αν θεωρήσουμε ότι το πεδίο δεν μεταβάλλεται με το χρόνο, δηλαδή το B_z είναι σταθερό, τότε η πρώτη εξίσωση γράφεται ως εξής:

$$\frac{1}{a} \frac{da}{dt} = j \frac{qB_z}{2m}$$

Δηλαδή η παράγωγος του a όταν διαιρείται με το a μας κάνει μία σταθερά $\gamma = j \frac{qB_z}{2m}$. Ξέρουμε κάποια συνάρτηση που να έχει αυτή την ιδιότητα; Φυσικά είναι η $f(t) = e^{\gamma t}$ της οποίας η παράγωγος είναι $df/dt = \gamma e^{\gamma t} = \gamma f(t)$. Φυσικά το ίδιο αποτέλεσμα θα παίρναμε εάν θεωρούσαμε $f(t) = Ce^{\gamma t}$ για κάθε σταθερά C . Επομένως καταλήγουμε στο ότι το a καθορίζεται από την σχέση:

$$a(t) = C \exp\left(j \frac{qB_z}{2m} t\right)$$

Για $t = 0$ θα έχουμε $a(0) = C$, οπότε:

$$a(t) = a(0) \exp \left(j \frac{qB_z}{2m} t \right) \quad (1.22)$$

Με τον ίδιο τρόπο προκύπτει ότι:

$$b(t) = b(0) \exp \left(-j \frac{qB_z}{2m} t \right) \quad (1.23)$$

Από τις δύο τελευταίες εξισώσεις προκύπτει ότι το μαγνητικό πεδίο που είναι παράλληλο με το z προσθέτει μία φάση $= \pm \frac{qB_z}{2m} t$ στα μιγαδικά πλάτη. Με την βοήθεια πινάκων και αν ορίσουμε το $\phi_z = \frac{qB_z}{2m} t$ μπορούμε να γράψουμε:

$$\begin{bmatrix} a(t) \\ b(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{j\phi_z} & 0 \\ 0 & e^{-j\phi_z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a(0) \\ b(0) \end{bmatrix} \quad (1.24)$$

Οι πιθανότητες εμφάνισης του $|0\rangle$ και του $|1\rangle$ μετά την μέτρηση δεν αλλάζουν αφού:

$$|a(t)|^2 = \left| a(0) \exp \left(j \frac{qB_z}{2m} t \right) \right|^2 = |a(0)|^2$$

$$|b(t)|^2 = \left| b(0) \exp \left(-j \frac{qB_z}{2m} t \right) \right|^2 = |b(0)|^2$$

1.9 Μία κβαντική πύλη

Ας δούμε τώρα τι γίνεται όταν στρέψουμε το μαγνητικό πεδίο στον άξονα των x , δηλαδή $\mathbf{B} = (B_x, 0, 0)$. Σε αυτή την περίπτωση:

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{X} B_x = \begin{bmatrix} 0 & B_x \\ B_x & 0 \end{bmatrix}$$

Το δεύτερο μέλος της (1.18) τώρα θα είναι:

$$-\frac{q}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} = \begin{bmatrix} -\frac{qB_x}{2m} b \\ -\frac{qB_x}{2m} a \end{bmatrix}$$

Οπότε η (1.18) γράφεται ως εξής:

$$j \frac{da}{dt} = -\frac{qB_x}{2m} b \quad (1.25\alpha')$$

$$j \frac{db}{dt} = -\frac{qB_x}{2m} a \quad (1.25\beta')$$

Αν θέσουμε $\theta_x = -\frac{qB_x}{2m}$ τότε το σύστημα γράφεται και ως εξής:

$$\frac{da}{dt} = j\theta_x b \quad (1.26\alpha')$$

$$\frac{db}{dt} = j\theta_x a \quad (1.26\beta')$$

Αν συνδυάσουμε τις δύο εξισώσεις καταλήγουμε σε μία εξίσωση για το a ,

$$\frac{d^2 a}{dt^2} = -\theta_x^2 a \quad (1.27)$$

Είναι εύκολο να επαληθεύσουμε ότι το $\cos(\theta_x t)$ είναι λύση της παραπάνω εξίσωσης αφού $\frac{d}{dt} \cos(\theta_x t) = -\theta_x \sin(\theta_x t)$. Επομένως:

$$\frac{d^2}{dt^2} \cos(\theta_x t) = -\theta_x \frac{d}{dt} \sin(\theta_x t) = -\theta_x^2 \cos(\theta_x t)$$

Με τον ίδιο τρόπο μπορούμε να δείξουμε ότι και το $\sin(\theta_x t)$ είναι πάλι λύση της εξίσωσης. Μάλιστα, κάθε συνάρτηση της μορφής:

$$a(t) = C \cos(\theta_x t) + D \sin(\theta_x t) \quad (1.28)$$

είναι λύση της εξίσωσης (1.27). Η σχέση για το $b(t)$ είναι:

$$b(t) = \frac{1}{j} (-C \sin(\theta_x t) + D \cos(\theta_x t)) \quad (1.29)$$

Από τις παραπάνω σχέσεις βλέπουμε ότι:

$$a(0) = C$$

$$b(0) = D/j$$

Οπότε οι εξισώσεις για τα $a(t)$ και $b(t)$ είναι:

$$\begin{aligned} a(t) &= a(0) \cos(\theta_x t) + j b(0) \sin(\theta_x t) \\ b(t) &= b(0) \cos(\theta_x t) + j a(0) \sin(\theta_x t) \end{aligned} \quad (1.30)$$

Σε μορφή πίνακα:

$$\begin{bmatrix} a(t) \\ b(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\theta_x t) & j \sin(\theta_x t) \\ j \sin(\theta_x t) & \cos(\theta_x t) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a(0) \\ b(0) \end{bmatrix} \quad (1.31)$$

Αποτέλεσμα 1.1: Ο πίνακας U ενός κβαντικού κυκλώματος

Θα δούμε και στη συνέχεια ότι κάθε κβαντικό κύκλωμα που δρα σε κάποια αρχικά qubit και τα μετασχηματίζει σε τελικά qubit περιγράφεται από έναν πίνακα U που συνδέει τα αρχικά και τα τελικά πλάτη.

Η παραπάνω σχέση συνδέει τους συντελεστές των $|0\rangle$ και $|1\rangle$ μετά την δράση του μαγνητικού πεδίου για χρόνο t με τους αρχικούς συντελεστές. Αν θεωρήσουμε ότι ο χρόνος δράσης είναι τέτοιος ώστε $\theta_x t = \pi/2$ τότε θα έχουμε:

$$\begin{bmatrix} a(t) \\ b(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & j \\ j & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a(0) \\ b(0) \end{bmatrix}$$

Οπότε σε αυτή την περίπτωση, $a(t) = j b(0)$ και $b(t) = j a(0)$. Οπότε αν ξεκινήσουμε από την κατάσταση:

$$|\psi(0)\rangle = a(0) |0\rangle + b(0) |1\rangle$$

θα καταλήξουμε στην κατάσταση:

$$|\psi(t)\rangle = j (b(0) |0\rangle + a(0) |1\rangle)$$

Οι πιθανότητες εμφάνισης του $|0\rangle$ και του $|1\rangle$ την αρχική μηδενική στιγμή, θα είναι $|a(0)|^2$ και $|b(0)|^2$ αντίστοιχα. Την χρονική στιγμή t θα είναι $|b(0)|^2$ και $|a(0)|^2$ αντίστοιχα, δηλαδή έχουν αντιστραφεί!

Μπορούμε να το δούμε ακόμα καλύτερα τι συμβαίνει αν ξεκινήσουμε από την αρχική κατάσταση $|\psi(0)\rangle = |0\rangle$. Μετά από χρόνο t η κυματοσυνάρτηση θα είναι $|\psi(t)\rangle = j |1\rangle$. Στην αρχική κατάσταση η πιθανότητα να μετρήσουμε $|0\rangle$ είναι ίση με ένα ενώ η πιθανότητα να μετρήσουμε το $|1\rangle$ είναι μηδέν. Στην τελική κατάσταση οι πιθανότητες έχουν αντιστραφεί: η πιθανότητα να μετρήσουμε $|1\rangle$ είναι ίση τώρα ίση με μηδέν ενώ η πιθανότητα να μετρήσουμε το $|0\rangle$ είναι ένα! Επομένως το μαγνητικό πεδίο το οποίο είναι προσανατολισμένο προς το x και δρα για το συγκεκριμένο χρονικό διάστημα πραγματοποιεί *αντιστροφή* της κβαντικής κατάστασης. Είναι λοιπόν ένας κβαντικός αντιστροφέας, το πρώτο παράδειγμα κβαντικού κυκλώματος που συναντάμε στο μάθημα.

1.10 Ιδιότητες της κβαντικής πύλης

Στην προηγούμενη παράγραφο είδαμε ότι μία κβαντική πύλη περιγράφεται από έναν πίνακα U ο οποίος είναι 2×2 και ο οποίος συνδέει τα αρχικά και τα τελικά πλάτη του qubit. Δηλαδή εάν η αρχική κατάσταση είναι:

$$|\psi_{\text{in}}\rangle = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$$

και η τελική κατάσταση είναι:

$$|\psi_{\text{out}}\rangle = \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix}$$

τότε θα έχουμε

$$\begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} = U \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \quad (1.32)$$

Για παράδειγμα στην περίπτωση όπου εφαρμόζουμε το μαγνητικό πεδίο στον άξονα των x , τότε είδαμε από την (1.31) ότι ο πίνακας αυτός έχει μορφή:

$$U = \begin{bmatrix} \cos \phi_x & j \sin \phi_x \\ j \sin \phi_x & \cos \phi_x \end{bmatrix} \quad (1.33)$$

όπου $\phi_x = \theta_x t$. Οι πίνακες που προκύπτουν στην περίπτωση των κβαντικών συστημάτων πάντα θα είναι πάντα μοναδιαίοι δηλαδή θα έχουν την ιδιότητα ότι αντιστρέφονται από τον ανάστροφο τους U^T . Ο ανάστροφος ενός πίνακα προκύπτει όπως δείχνει η εξίσωση (1.8): οι γραμμές γίνονται στήλες και παίρνουμε το μιγαδικό συζυγές. Οπότε:

$$U^T = \begin{bmatrix} \cos \phi_x & -j \sin \phi_x \\ -j \sin \phi_x & \cos \phi_x \end{bmatrix} \quad (1.34)$$

Κάνοντας τις πράξεις θα έχουμε:

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

Ο πίνακας του τρίτου μέρους της παραπάνω σχέσης είναι ο ταυτοτικός πίνακας 2×2 , I_2 . Οπότε θα έχουμε:

$$U^T U = I_2 \quad (1.35)$$

Αυτό σημαίνει ότι ο πίνακας U αντιστρέφεται από τον ανάστροφο του U^T .

Αποτέλεσμα 1.2: Μοναδιαίοι πίνακες κβαντικών κυκλωμάτων

Κάθε κβαντικό κύκλωμα στο οποίο δεν γίνεται κάποια μέτρηση περιγράφεται από έναν μοναδιαίο πίνακα U , δηλαδή από έναν πίνακα που αντιστρέφεται από τον ανάστροφο του U^T :

$$U U^T = U^T U = I$$

Εφόσον όπως θα συζητήσουμε και παρακάτω στο μάθημα, κάθε κβαντικό κύκλωμα αντιστοιχεί σε έναν μοναδιαίο πίνακα U και εφόσον οι μοναδιαίοι πίνακες αντιστρέφονται από τον ανάστροφο τους τότε προκύπτει ότι κάθε κβαντικό κύκλωμα πρέπει να είναι αντιστρέψιμο: Πάντα θα υπάρχει ένα κύκλωμα που θα περιγράφεται από τον ανάστροφο πίνακα U^T το οποίο εάν εφαρμοστεί στην έξοδο του κυκλώματος $U |\psi\rangle$ θα επιστρέφει την κυματοσυνάρτηση στην αρχική της μορφή:

$$U^T (U |\psi\rangle) = (U^T U) |\psi\rangle = I_2 |\psi\rangle = |\psi\rangle$$

Αποτέλεσμα 1.3: Αντιστρεψιμότητα κβαντικών κυκλωμάτων

Κάθε κβαντικό κύκλωμα στο οποίο δεν κάνουμε κάποια μέτρηση αντιστρέφεται!

1.11 Διατήρηση της συνολικής πιθανότητας

Μία ενδιαφέρουσα παρατήρηση είναι ότι το γεγονός πως ο πίνακας U είναι μοναδιαίος εξασφαλίζει ότι το άθροισμα των πιθανοτήτων παραμένει σταθερό και ίσο με 1 όταν επεξεργαζόμαστε ένα qubit. Δηλαδή εάν ξεκινήσουμε από μία κατάσταση $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ για την οποία θα έχουμε $|a|^2 + |b|^2 = 1$ τότε οποιοδήποτε κύκλωμα και να εφαρμόσουμε θα καταλήξουμε σε μία εναλλακτική ενδεχομένως κατάσταση $|\phi\rangle = U|\psi\rangle = c|0\rangle + d|1\rangle$ για την οποία θα ισχύει:

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

Η παραπάνω σχέση λέει ότι η τελική κυματοσυνάρτηση $|\phi\rangle = U|\psi\rangle$ πρέπει να αντιστοιχεί σε ένα qubit και προκύπτει εύκολα από το ότι ο πίνακας U είναι μοναδιαίος. Καταρχήν ας θυμηθούμε ότι:

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

Με τον ίδιο τρόπο:

$$\langle\phi|\phi\rangle = |c|^2 + |d|^2$$

Υπάρχει μία ιδιότητα των πινάκων που λέει ότι ο ανάστροφος του γινομένου δύο πινάκων $(AB)^T$ ισούται με το γινόμενο των ανάστροφων αλλά με την αντίστροφη σειρά:

$$(AB)^T = B^T A^T \quad (1.36)$$

Αν εφαρμόσουμε αυτή την ιδιότητα θα έχουμε:

$$\langle\phi| = \langle\psi|^T = (U|\psi\rangle)^T = |\psi\rangle^T U^T = \langle\psi| U^T$$

Στην παραπάνω σχέση χρησιμοποιήσαμε ότι το bra είναι το ανάστροφο του ket, για παράδειγμα $|\psi\rangle^T = \langle\psi|$. Στη συνέχεια υπολογίζουμε το $\langle\phi|\phi\rangle$ ως εξής:

$$\langle\phi|\phi\rangle = (\langle\psi| U^T)(U|\psi\rangle) = \langle\psi| (U^T U)|\psi\rangle = \langle\psi| I_2 |\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$$

Επομένως θα έχουμε $|a|^2 + |b|^2 = |c|^2 + |d|^2$, δηλαδή το άθροισμα των πιθανοτήτων παραμένει σταθερό και ίσο με 1.

Αποτέλεσμα 1.4: Διατήρηση της συνολικής πιθανότητας

Το γεγονός ότι ο πίνακας που περιγράφει κάθε κβαντικό κύκλωμα είναι μοναδιαίος διασφαλίζει ότι τα αθροίσματα των πιθανοτήτων των διαφορετικών καταστάσεων παραμένουν ίσα με τη μονάδα. Το αποτέλεσμα αυτό ισχύει και για κυκλώματα περισσότερων qubit.

1.12 Μία δεύτερη κβαντική πύλη

Μέχρι τώρα ασχοληθήκαμε με το τι συμβαίνει εάν το μαγνητικό πεδίο είναι προσανατολισμένο στον άξονα των z , δηλαδή $\mathbf{B} = (0, 0, B_z)$ και στον άξονα των x , δηλαδή $\mathbf{B} = (B_x, 0, 0)$. Έχει ένα ενδιαφέρον να δούμε τι συμβαίνει όταν εφαρμόζουμε και ένα μαγνητικό πεδίο παράλληλο με τον y , δηλαδή $\mathbf{B} = (0, B_y, 0)$. Τότε θα έχουμε:

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} = Y B_y = \begin{bmatrix} 0 & -jB_y \\ jB_y & 0 \end{bmatrix}$$

και το δεύτερο μέλος της (1.18) θα είναι:

$$-\frac{q}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} = \begin{bmatrix} j \frac{qB_y}{2m} b \\ -j \frac{qB_y}{2m} a \end{bmatrix}$$

Αν θέσουμε $\theta_y = qB_y/(2m)$ τότε το συνδυάζοντας τα δύο μέλη της (1.18) θα έχουμε:

$$\frac{da}{dt} = \theta_y b \quad (1.37\alpha')$$

$$\frac{db}{dt} = -\theta_y a \quad (1.37\beta')$$

Η ανάλυση δεν διαφέρει πολύ από την περίπτωση όπου το μαγνητικό πεδίο ήταν παράλληλο στον x . Πάλι θα έχουμε:

$$\frac{d^2 a}{dt^2} = -\theta_y^2 a$$

οπότε το $a(t)$ θα δίνεται από μία σχέση της μορφής:

$$a(t) = C \cos(\theta_y t) + D \sin(\theta_y t)$$

Η διαφορά είναι ότι το $b(t)$ δίνεται από την σχέση:

$$b(t) = \frac{1}{\theta_y} \frac{da}{dt} = -C \sin(\theta_y t) + D \cos(\theta_y t)$$

Οπότε για $t = 0$ θα έχουμε $C = a(0)$ και $D = b(0)$ και επομένως:

$$a(t) = a(0) \cos(\theta_y t) + b(0) \sin(\theta_y t)$$

$$b(t) = -a(0) \sin(\theta_y t) + b(0) \cos(\theta_y t)$$

Αν θέσουμε $\phi_y = \theta_y t$ τότε σε μορφή πίνακα θα έχουμε:

$$\begin{bmatrix} a(t) \\ b(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \phi_y & \sin \phi_y \\ -\sin \phi_y & \cos \phi_y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a(0) \\ b(0) \end{bmatrix} \quad (1.38)$$

Οπότε ο μοναδιαίος πίνακας που περιγράφει την πύλη αυτή είναι ο

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \cos \phi_y & \sin \phi_y \\ -\sin \phi_y & \cos \phi_y \end{bmatrix} \quad (1.39)$$

Παράδειγμα 1.5: Μοναδιαιότητα της πύλης περιστροφής γύρω από τον y

Μπορούμε να δείξουμε ότι και ο πίνακας που προκύπτει από την εφαρμογή του μαγνητικού πεδίου παράλληλα με το y είναι όντως μοναδιαίος. Παρατηρούμε ότι αυτή τη φορά τα στοιχεία είναι πραγματικά οπότε δεν χρειάζεται να πάρουμε και μιγαδικά συζυγή όταν υπολογίζουμε τον ανάστροφο:

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

Οπότε εύκολα προκύπτει ότι

$$\mathbf{U}^T \mathbf{U} = \begin{bmatrix} \cos \phi_y & -\sin \phi_y \\ \sin \phi_y & \cos \phi_y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \phi_y & \sin \phi_y \\ -\sin \phi_y & \cos \phi_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos^2 \phi_y + \sin^2 \phi_y & 0 \\ 0 & \cos^2 \phi_y + \sin^2 \phi_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Ας συνοψίσουμε τις πύλες που έχουμε φτιάξει μέχρι τώρα με την βοήθεια του μαγνητικού πεδίου.

Αποτέλεσμα 1.5: Σύνοψη πυλών από ομοιόμορφο μαγνητικό πεδίο

Αν θεωρήσουμε ότι το qubit αποθηκεύεται στο spin ενός ηλεκτρονίου και περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$.

Όταν το μαγνητικό πεδίο είναι προσανατολισμένο στον άξονα των x τότε η δράση του περιγράφεται από έναν πίνακα της μορφής:

$$\mathbf{U}_x(\phi) = \begin{bmatrix} \cos \phi & j \sin \phi \\ j \sin \phi & \cos \phi \end{bmatrix} \quad (1.40)$$

Όταν το μαγνητικό πεδίο είναι προσανατολισμένο στον άξονα των y τότε η δράση του περιγράφεται από έναν πίνακα της μορφής:

$$U_y(\phi) = \begin{bmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ -\sin \phi & \cos \phi \end{bmatrix} \quad (1.41)$$

Όταν το μαγνητικό πεδίο είναι προσανατολισμένο στον άξονα των z τότε πάλι μπορούμε να περιγράψουμε την δράση με τον πίνακα:

$$U_z(\phi) = \begin{bmatrix} e^{j\phi} & 0 \\ 0 & e^{-j\phi} \end{bmatrix} \quad (1.42)$$

1.13 Πως να φτιάξετε μία υπέρθεση

Στην περίπτωση του spin του ηλεκτρονίου είναι σχετικά εύκολο να καταλάβουμε τις καταστάσεις $|0\rangle$ και $|1\rangle$ που αντιστοιχούν σε αρνητικό και θετικό spin αντίστοιχα (χρησιμοποιούμε την λέξη “σχετικά” επειδή δεν μπορούμε με απλό τρόπο να καταλάβουμε τι είναι το spin). Τουλάχιστον στην περίπτωση του $|0\rangle$ και του $|1\rangle$ το spin είναι καθορισμένο με σαφή τρόπο χωρίς να χρειάζονται πιθανότητες: αν έχουμε την $|0\rangle$ τότε όσες φορές και να μετρήσετε το spin παράλληλα με τον άξονα των z θα βρείτε ότι έχει αρνητική τιμή με πιθανότητα 100%. Στον αντίποδα βρίσκεται η κατάσταση υπέρθεσης των $|0\rangle$ και $|1\rangle$:

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

Όπως είδαμε και στα προηγούμενα, εφόσον $a = 1/\sqrt{2}$ και $b = 1/\sqrt{2}$, οι πιθανότητες να πάρουμε $|0\rangle$ και $|1\rangle$ σε αυτή την περίπτωση είναι ίσες με $|a|^2 = |b|^2 = 1/2$ δηλαδή 50%. Αλλά τίθεται ένα ερώτημα του κατά πόσο μπορούμε να φτιάξουμε μία τέτοια κατάσταση; Γιατί αν δεν μπορούμε να την φτιάξουμε στον πραγματικό κόσμο, τι νόημα έχει να προσπαθούμε να την καταλάβουμε;

Η παραπάνω κατάσταση υπέρθεσης μπορεί να υλοποιηθεί ξεκινώντας από την $|0\rangle$ και χρησιμοποιώντας ένα μαγνητικό πεδίο προσανατολισμένο στον άξονα των y όπου έχουμε επιλέξει την διάρκεια δράσης t και το πλάτος του πεδίου B_y έτσι ώστε $\phi = \pi/4$. Τότε ο πίνακας U_y θα είναι:

$$U_y(\pi/4) = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

Η τελική κατάσταση $|\psi\rangle$ θα δίνεται από την σχέση:

$$|\psi\rangle = U_y(\pi/4) |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Η παραπάνω σχέση μας σημαίνει ότι τα πλάτη του $|0\rangle$ και του $|1\rangle$ είναι $1/\sqrt{2}$ οπότε:

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

1.14 Τι συμβαίνει όταν μετράμε ένα qubit;

Στα προηγούμενα είδαμε πως ένα qubit που αποθηκεύεται στο spin ενός ηλεκτρονίου και βρίσκεται στην κατάσταση $|\psi\rangle = a |0\rangle + b |1\rangle$ έχει πιθανότητα $|a|^2$ να βρεθεί στην κατάσταση $|0\rangle$ και $|b|^2$ στην κατάσταση $|1\rangle$ όταν το μετρήσουμε. Είδαμε επίσης πως μετράμε το spin με την βοήθεια ενός μαγνητικού πεδίου που δεν είναι ομοιόμορφο αλλά μεταβάλλεται με το z . Το spin παίρνει δύο διακριτές τιμές, την $s = \frac{\hbar}{2}$ και την $s = -\frac{\hbar}{2}$ που αντιστοιχούν στις καταστάσεις $|1\rangle$ και $|0\rangle$.

Στην κβαντική μηχανική όταν κάνουμε μία μέτρηση ενός μεγέθους πρέπει να αντιστοιχίσουμε σε αυτόν το μέγεθος έναν πίνακα $\mathbf{H}$ του οποίου οι ιδιοτιμές είναι τα πιθανά αποτελέσματα της μέτρησης και τα ιδιοδιάνυσμα τα πιθανές κυματοσυναρτήσεις μετά την μέτρηση. Θυμηθείτε ότι ένα διάνυσμα $\mathbf{v}$ είναι ιδιοδιάνυσμα του πίνακα $\mathbf{A}$ που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή λ εάν ισχύει:

$$\mathbf{A}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$$

Στην περίπτωση όπου μετράμε το spin του ηλεκτρονίου παράλληλα με τον άξονα των z , η κβαντική μηχανική μας λέει ότι ο πίνακας $\mathbf{H}_z$ που αντιστοιχεί στην μέτρηση είναι ο:

$$\mathbf{H}_z = \frac{\hbar}{2} \mathbf{Z} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{bmatrix}$$

Οι ιδιοτιμές λ ενός πίνακα $\mathbf{A}$ προκύπτουν από την εξίσωση $\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}) = 0$ όπου με $\det$ συμβολίζουμε την ορίζουσα. Στην περίπτωση του $\mathbf{H}_z$ θα έχουμε:

$$\det(\mathbf{H}_z - \lambda \mathbf{I}) = \det \left(\begin{bmatrix} \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{bmatrix} \right) = \det \left(\begin{bmatrix} \frac{\hbar}{2} - \lambda & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} - \lambda \end{bmatrix} \right) = -(\frac{\hbar}{2} + \lambda)(\frac{\hbar}{2} - \lambda)$$

Αν θέσουμε $\det(\mathbf{H}_z - \lambda \mathbf{I}) = 0$ προκύπτει $\lambda = \lambda_1 = -\frac{\hbar}{2}$ ή $\lambda = \lambda_2 = \frac{\hbar}{2}$, δηλαδή οι δύο διαφορετικές τιμές του spin που είδαμε στην αρχή της ενότητας. Για να βρούμε και τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα $|v_1\rangle$ και $|v_2\rangle$ που όπως είπαμε αντιστοιχούν στις καταστάσεις μετά την μέτρηση πρέπει να λύσουμε τις εξισώσεις $\mathbf{H}_z |v_1\rangle = \lambda_1 |v_1\rangle$ και $\mathbf{H}_z |v_2\rangle = \lambda_2 |v_2\rangle$. Αν θέσουμε $|v_1\rangle = x_1 |0\rangle + y_1 |1\rangle$ τότε

$$|v_1\rangle = \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix}$$

Ξεκινάμε με την πρώτη σχέση:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_z |v_1\rangle &= \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} x_1 \\ -y_1 \end{bmatrix} \\ \lambda_1 \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix} &= -\frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Οπότε όταν $\mathbf{H}_z |v_1\rangle - \lambda_1 |v_1\rangle = 0$ θα έχουμε:

$$x_1 = x_1$$

$$y_1 = -y_1$$

Η πρώτη σχέση ισχύει για οποιοδήποτε x_1 . Η δεύτερη σχέση ισχύει μόνο για $y_1 = 0$. Οπότε θα έχουμε:

$$v_1 = \begin{bmatrix} x_1 \\ 0 \end{bmatrix} = x_1 |0\rangle$$

Θυμηθείτε όμως ότι για να είναι qubit μία κυματοσυνάρτηση θα πρέπει οι πιθανότητες να αθροίζουν στη μονάδα, οπότε θα πρέπει το x_1 να πληρεί την συνθήκη $|x_1|^2 = 1$. Οποιοδήποτε x_1 μας κάνει αλλά είναι φυσικό να επιλέξουμε $x_1 = 1$. Στην περίπτωση αυτή, $|v_1\rangle = |0\rangle$. Με τον ίδιο τρόπο μπορούμε να δείξουμε ότι η ιδιοτιμή $\lambda = \lambda_2 = \frac{\hbar}{2}$ αντιστοιχεί σε ένα ιδιοδιάνυσμα

$$|v_2\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ y_2 \end{bmatrix}$$

και να επιλέξουμε το $y_2 = 1$, οπότε $|v_2\rangle = |1\rangle$.

Αποτέλεσμα 1.6: Ιδιοτιμές και ιδιοδιανύσματα του $\mathbf{H}_z$

Δείξαμε ότι στην περίπτωση όπου μετρούμε το spin του ηλεκτρονίου παράλληλα με τον άξονα των z τα δύο πιθανά αποτελέσματα $\lambda_1 = -\frac{\hbar}{2}$ και $\lambda_2 = \frac{\hbar}{2}$ είναι οι ιδιοτιμές του πίνακα $\mathbf{H}_z = \frac{\hbar}{2} \mathbf{Z}$ ενώ τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα $|v_1\rangle = |0\rangle$ και $|v_2\rangle = |1\rangle$ του $\mathbf{H}_z$ είναι οι καταστάσεις που προκύπτουν όταν μετράμε τα λ_1 και λ_2 .

Μπορεί το παραπάνω αποτέλεσμα να φαίνεται προφανές με την έννοια ότι ούτως ή άλλως περιμέναμε να λάβουμε τις $|0\rangle$ και $|1\rangle$ όταν μετράγαμε το spin στον άξονα των z . Ωστόσο η λογική αυτή μπορεί να επεκταθεί και σε άλλες μετρήσεις όπως θα δούμε παρακάτω.

1.15 Μέτρηση στον άξονα των x

Αν αποφασίζαμε να μετρήσουμε το spin στον άξονα των x τότε αυτό που αλλάζει είναι ο πίνακας $\mathbf{H}$ που χρησιμοποιούμε για να υπολογίσουμε τα πιθανά αποτελέσματα της μέτρησης. Είναι φυσικό αντί του $\mathbf{H}_z$ να χρησιμοποιήσουμε τον πίνακα $\mathbf{H}_x$ που προκύπτει από την αλλαγή του $\mathbf{Z}$ με το $\mathbf{X}$, οπότε:

$$\mathbf{H}_x = \frac{\hbar}{2} \mathbf{X} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Ας υπολογίσουμε τις ιδιοτιμές του $\mathbf{H}_x$:

$$\det(\mathbf{H}_x - \lambda \mathbf{I}) = \det\left(\frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} - \lambda \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\right) = \det\left(\begin{bmatrix} -\lambda & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & -\lambda \end{bmatrix}\right) = \lambda^2 - \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2$$

Οπότε πάλι οι ιδιοτιμές του πίνακα θα είναι πάλι:

$$\lambda_1 = -\frac{\hbar}{2}, \quad \lambda_2 = \frac{\hbar}{2}$$

Οι παραπάνω τιμές είναι οι πιθανές τιμές του αποτελέσματος της μέτρησης του spin στον άξονα των x . Όπως είναι φυσικό, το spin και σε αυτό τον άξονα έχει δύο πιθανές τιμές, μία αρνητική και μία θετική οι οποίες είναι ίδιες με τις τιμές του spin όταν τις μετράμε στον άξονα των z .

Ας δούμε τώρα τις αντίστοιχες κυματοσυναρτήσεις που αντιστοιχούν σε αυτές τις ιδιοτιμές. Για την ιδιοτιμή λ_1 θα έχουμε:

$$\mathbf{H}_x |u_1\rangle = \lambda_1 |u_1\rangle$$

οπότε:

$$\frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix}$$

Η παραπάνω εξίσωση γράφεται ισοδύναμα:

$$x_1 = -y_1$$

$$y_1 = -x_1$$

που φυσικά είναι ταυτόσημες. Οπότε το ιδιοδιάνυσμα έχει την ιδιότητα $x_1 = -y_1$ και για να είναι qubit θα πρέπει να ισχύει $|x_1|^2 + |y_1|^2 = 1$. Μπορούμε να επιλέξουμε $x_1 = 1/\sqrt{2}$ και $y_1 = -1/\sqrt{2}$ οπότε:

$$|v_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle \quad (1.43)$$

Για την ιδιοτιμή λ_2 θα βρούμε με τον ίδιο τρόπο ότι το ιδιοδιάνυσμα $|v_2\rangle$ θα είναι:

$$|v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle \quad (1.44)$$

Παρατηρούμε κάτι πολύ ενδιαφέρον: όταν κάνουμε μέτρηση προς τον άξονα των x τότε το αποτέλεσμα θα είναι είτε η κατάσταση $|v_1\rangle$ είτε η κατάσταση $|v_2\rangle$ που είναι υπερθέσεις των $|0\rangle$ και $|1\rangle$. Μάλιστα και στις δύο περιπτώσεις εάν μετρήσουμε εκ νέου το spin αυτή τη φορά ως προς τον άξονα των z θα πάρουμε $|0\rangle$ ή $|1\rangle$ με πιθανότητα 50%.

Παράδειγμα 1.6: Ορθογωνιότητα των ιδιοδιανυσμάτων $|v_1\rangle, |v_2\rangle$

Μπορούμε να δείξουμε ότι οι καταστάσεις:

$$|v_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle$$

$$|v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$$

είναι μεταξύ τους ορθογώνιες. Πράγματι:

$$\langle v_1|v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle v_1|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\langle v_1|1\rangle$$

Επίσης:

$$\langle v_1|0\rangle$$

Παράδειγμα 1.7: Τα $|v_1\rangle, |v_2\rangle$ ως ορθοκανονική βάση

Μπορούμε επίσης να δείξουμε ότι τα $|v_1\rangle$ και $|v_2\rangle$ είναι ορθοκανονική βάση.

Είναι εύκολο αρχικά να δούμε ότι

$$\langle v_1|v_1\rangle = \langle v_2|v_2\rangle = 1$$

Από τις σχέσεις που τα καθορίζουν εύκολα γράφουμε:

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|v_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|v_2\rangle$$

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|v_2\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|v_1\rangle$$

Επομένως οποιαδήποτε κατάσταση $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ γράφεται και ως:

$$|\psi\rangle = \frac{a+b}{\sqrt{2}}|v_2\rangle + \frac{a-b}{\sqrt{2}}|v_1\rangle$$

Από την παραπάνω σχέση, προκύπτει ότι κάθε $|\psi\rangle$ είναι επίσης γραμμικός συνδυασμός των $|v_2\rangle$ και $|v_1\rangle$ οπότε αποτελούν ορθοκανονική βάση.

Τα δύο προηγούμενα παραδείγματα δείχνουν ότι τα $|v_1\rangle$ και $|v_2\rangle$ έχουν μεταξύ τους τις ίδιες ιδιότητες όπως τα $|0\rangle$ και $|1\rangle$. Θα μπορούσαμε επομένως να χρησιμοποιούμε το $|v_1\rangle$ να αναπαριστά την κατάσταση “0” και το $|v_2\rangle$ την κατάσταση “1”. Στην ουσία αυτό σημαίνει ότι αλλάζουμε τον ρόλο των αξόνων x και z όταν μετράμε και επεξεργαζόμαστε τα qubit.

1.16 Μέτρηση στον άξονα των y

Ας δούμε τώρα τους αντίστοιχους υπολογισμούς για την περίπτωση όπου μετράμε το spin κατά μήκος του άξονα του y . Χρησιμοποιούμε τώρα τον πίνακα:

$$\mathbf{H}_y = \frac{\hbar}{2}\mathbf{Y} = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & -j \\ j & 0 \end{bmatrix}$$

Οι ιδιοτιμές υπολογίζονται όπως και στις προηγούμενες περιπτώσεις:

$$\det(\mathbf{H}_y - \lambda\mathbf{I}) = \det\left(\begin{bmatrix} -\lambda & -j\frac{\hbar}{2} \\ j\frac{\hbar}{2} & -\lambda \end{bmatrix}\right) = \lambda^2 - \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2$$

Θέτοντας την ορίζουσα ίση με μηδέν, προκύπτει ότι οι ιδιοτιμές είναι πάλι $\lambda_1 = -\frac{\hbar}{2}$ και $\lambda_2 = \frac{\hbar}{2}$. Αυτό είναι λογικό καθώς οι πιθανές τιμές του spin σε οποιοδήποτε άξονα θα είναι πάντα $\pm\frac{\hbar}{2}$. Για την ιδιοτιμή $\lambda_1 = -\frac{\hbar}{2}$ τα ιδιοδιανύσματα προκύπτουν από την σχέση $\mathbf{H}_y|u_1\rangle = \lambda_1|u_1\rangle$, οπότε:

$$j\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix} = -\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix}$$

Από την παραπάνω σχέση:

$$jb_1 = a_1$$

$$-ja_1 = b_1$$

Είναι προφανές ότι οι δύο αυτές εξισώσεις είναι ισοδύναμες και εφόσον χρειάζεται $|a_1|^2 + |b_1|^2 = 1$ μπορούμε να επιλέξουμε $a_1/\sqrt{2}$ και $b_1 = -j/\sqrt{2}$ οπότε:

$$|u_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{j}{\sqrt{2}}|1\rangle$$

Για την ιδιοτιμή $\lambda_2 = \frac{\hbar}{2}$ θα έχουμε:

$$jb_1 = -a_1$$

$$ja_1 = b_1$$

οπότε προκύπτει ότι το αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα είναι:

$$|u_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{j}{\sqrt{2}}|1\rangle$$

Αποτέλεσμα 1.7: Ιδιοκαταστάσεις spin στους άξονες x, y, z

Δείξαμε πως όταν μετράμε το spin ενός ηλεκτρονίου κατά μήκος των αξόνων x, y και z πάντα θα παίρνουμε τιμές $\lambda_1 = -\frac{\hbar}{2}$ και $\lambda_2 = +\frac{\hbar}{2}$. Αν συμβολίσουμε με $|-k\rangle$ και $|+k\rangle$ τα ιδιοδιανύσματα που αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές $\lambda_1 = -\frac{\hbar}{2}$ και $\lambda_2 = +\frac{\hbar}{2}$ αντίστοιχα κατά τον άξονα των $k = x, y, z$ τότε δείξαμε ότι:

$$|-x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$$

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

$$|-y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{j}{\sqrt{2}}|1\rangle$$

$$|+y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{j}{\sqrt{2}}|1\rangle$$

$$|-z\rangle = |0\rangle$$

$$|+z\rangle = |1\rangle$$

Κάθε ζευγάρι ιδιοδιανυσμάτων είναι μία ορθοκανονική βάση από την οποία παράγονται όλες οι πιθανές κυματοσυναρτήσεις του qubit $|\psi\rangle$.

1.17 Μπορείτε να μετρήσετε δύο πράγματα ταυτόχρονα;

Στους υπολογισμούς που κάναμε στα προηγούμενα, υπάρχει κρυμμένη μία αξιοπερίεργη ιδιότητα. Έστω ότι ξεκινάτε από μία κατάσταση $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ και μετράτε το spin παράλληλα με τον άξονα των z . Σύμφωνα με αυτά που είπαμε μέχρι τώρα, θα βρείτε είτε $|0\rangle$ είτε το $|1\rangle$ με πιθανότητα $|a|^2$ και $|b|^2$. Έστω ότι το αποτέλεσμα της μέτρησης ήταν το $\lambda_2 = \frac{\hbar}{2}$ οπότε βρισκόμαστε στην κατάσταση $|+z\rangle = |1\rangle$. Στη συνέχεια μετράτε το spin στον άξονα των x οπότε θα πρέπει να βρείτε μία από τις καταστάσεις:

$$|-x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|-z\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|+z\rangle$$

$$|+x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|-z\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|+z\rangle$$

Προσέξτε όμως! Η μέτρηση ως προς τον άξονα των x μας οδηγεί είτε στην $|-x\rangle$ είτε στην $|+x\rangle$ που αντιστοιχούν σε αρνητικό ή θετικό spin ως προς τον άξονα των x αλλά πλέον έχουμε μία υπέρθεση από τις

καταστάσεις $|-z\rangle$ και $|+z\rangle$. Αν μετράγαμε τώρα εκ νέου το spin στον άξονα των z μπορεί να πάρουμε με 50% πιθανότητα θετικό spin, δηλαδή την κατάσταση $|+z\rangle$ και με 50% πιθανότητα αρνητικό spin, δηλαδή την κατάσταση $|-z\rangle$. Δηλαδή ξεκινήσαμε από την κατάσταση $|+z\rangle = |1\rangle$ που ήταν απολύτως καθορισμένη με την έννοια ότι αν μετράγαμε το spin ως προς το z θα είχαμε 100% πιθανότητα να το βρούμε θετικό και μετρώντας το spin ως προς το x καταλήξαμε σε μία κατάσταση όπου πλέον έχουμε 50% να το βρούμε στην αρχική του κατάσταση! Η μέτρηση ως προς το x άλλαξε την βεβαιότητα με την οποία γνωρίζουμε το spin στην κατάσταση του z .

Η παραπάνω συμπεριφορά είναι τελείως αντίθετη με την καθημερινή εμπειρία μας. Αν φανταστούμε ότι το spin εκφράζει την περιστροφή μίας μπάλας γύρω από τον εαυτό της, τότε εάν την μετράγαμε σε έναν άξονα, πως γίνεται η μέτρηση αυτή να εισάγει κάποια αβεβαιότητα ως προς την περιστροφή της σε έναν άλλο άξονα; Γιατί δεν μπορούμε να μετρήσουμε ως προς τους δύο άξονες την περιστροφή με απόλυτη βεβαιότητα;

Προσέξτε ότι στην κβαντική περίπτωση, η αβεβαιότητα προκύπτει από τον τρόπο που η κβαντική μηχανική περιγράφει τις μετρήσεις: τα ιδιοδιανύσματα $|-z\rangle$ και $|+z\rangle$ του $\mathbf{H}_z$ δεν είναι ίδια με τα ιδιοδιανύσματα $|-x\rangle$ και $|+x\rangle$ του $\mathbf{H}_x$. Επομένως είναι αδύνατο να μετρήσουμε με απόλυτη βεβαιότητα το spin ως προς το x και το z : Η δεύτερη μέτρηση θα αλλάξει την κβαντική κατάσταση του qubit θα το φέρει σε μία υπέρθεση καταστάσεων στην οποία δεν θα έχουμε απόλυτη βεβαιότητα για το αποτέλεσμα της πρώτης μέτρησης αν την ξανακάνουμε.

1.18 Οι ιδιότητες των πινάκων μέτρησης

Ας ασχοληθούμε τώρα με τις ιδιότητες των πινάκων μέτρησης $\mathbf{H}$. Σύμφωνα με την κβαντική μηχανική, οι πίνακες αυτοί πρέπει να είναι Ερμιτιανοί, δηλαδή τα στοιχεία h_{pq} τους πρέπει να πληρούν την σχέση:

$$h_{pq} = h_{qp}^*$$

Η παραπάνω σχέση λέει ότι όταν στον πίνακα κάνουμε τις στήλες γραμμές και τις γραμμές στήλες παίρνουμε το μιγαδικό συζυγές των στοιχείων. Ένας εναλλακτικός τρόπος να γράψουμε την παραπάνω σχέση είναι ότι ο ανάστροφος του $\mathbf{H}$ είναι πάλι ο ίδιος ο $\mathbf{H}$,

$$\mathbf{H}^T = \mathbf{H}$$

Ας δούμε μερικές ιδιότητες των Ερμιτιανών πινάκων που είναι χρήσιμες όταν μετράμε τα qubit. Ξεκινάμε από τις ιδιοτιμές του πίνακα. Αν το λ είναι ιδιοτιμή του $\mathbf{H}$ που αντιστοιχεί στο ιδιοδιάνυσμα $|\psi_\lambda\rangle$ τότε:

$$\mathbf{H} |\psi_\lambda\rangle = \lambda |\psi_\lambda\rangle \quad (1.45)$$

Αν πολλαπλασιάσουμε από αριστερά με $\langle\psi_\lambda|$ θα έχουμε:

$$\langle\psi_\lambda|\mathbf{H}|\psi_\lambda\rangle = \langle\psi_\lambda|\lambda|\psi_\lambda\rangle = \lambda \langle\psi_\lambda|\psi_\lambda\rangle = \lambda \quad (1.46)$$

Αν πάρουμε τους αναστροφούς δεξιά και αριστερά της (1.45), θα έχουμε:

$$(\mathbf{H} |\psi_\lambda\rangle)^T = \lambda^T |\psi_\lambda\rangle^T$$

Αλλά για το πρώτο μέρος μπορούμε να γράψουμε ότι:

$$(\mathbf{H} |\psi_\lambda\rangle)^T = |\psi_\lambda\rangle^T \mathbf{H}^T = \langle\psi_\lambda| \mathbf{H}$$

ενώ στο δεύτερο μέρος το λ^T είναι ο ανάστροφος ενός πίνακα 1×1 , δηλαδή ενός αριθμού, οπότε θα έχουμε απλά $\lambda^T = \lambda^*$ και επομένως:

$$\lambda^T |\psi_\lambda\rangle^T = \lambda^* \langle\psi_\lambda|$$

Εξισώνοντας τα δύο μέλη παίρνουμε:

$$\langle\psi_\lambda| \mathbf{H} = \lambda^* \langle\psi_\lambda|$$

και πολλαπλασιάζοντας αριστερά και τα δύο μέλη με $|\psi_\lambda\rangle$ θα έχουμε:

$$\langle\psi_\lambda|\mathbf{H}|\psi_\lambda\rangle = \langle\psi_\lambda|\lambda|\psi_\lambda\rangle = \lambda^* \langle\psi_\lambda|\psi_\lambda\rangle = \lambda^* \quad (1.47)$$

Συγκρίνοντας τις (1.46) και (1.47) θα δούμε ότι

$$\lambda = \lambda^*$$

Δηλαδή ένας Ερμιτιανός πίνακας πάντα θα έχει πραγματικές ιδιοτιμές. Τα μεγέθη που μετράμε στην κβαντική μηχανική πάντα είναι πραγματικοί αριθμοί.

1.19 Κανονικοί πίνακες

Στα προηγούμενα είδαμε ότι οι μοναδιαίοι πίνακες U παίζουν σημαντικό ρόλο στην κβαντική υπολογιστική επειδή καθορίζουν πως εξελίσσεται ένα κβαντικό σύστημα όπως το qubit. Επίσης οι Ερμιτιανοί πίνακες H καθορίζουν πως λαμβάνουν χώρα οι μετρήσεις σε ένα κβαντικό σύστημα. Ας θυμηθούμε τους ορισμούς των δύο κατηγοριών πινάκων:

$$H^T = H$$

$$U^T U = U U^T = I$$

Οι πίνακες αυτοί εντάσσονται σε μία γενικότερη κατηγορία πινάκων που ονομάζονται *κανονικοί* πίνακες. Ένας $N \times N$ πίνακας A ονομάζεται κανονικός όταν ισχύει:

$$A A^T = A^T A$$

Από τις ιδιότητες του U και του H είναι εύκολο να καταλάβουμε ότι οι μοναδιαίοι και οι Ερμιτιανοί πίνακες είναι και κανονικοί πίνακες και επομένως κληρονομούν όλες τις ιδιότητες τους.

Μία πολύ βασική ιδιότητα των κανονικών πινάκων είναι ότι διαγωνιοποιούνται, δηλαδή πάντα μπορούμε να βρούμε έναν διαγώνιο πίνακα Λ και έναν μοναδιαίο πίνακα V^T έτσι ώστε ο A να γράφεται ως:

$$A = V \Lambda V^T$$

Παράδειγμα 1.8: Διαγωνιοποίηση του πίνακα H_x

Ας δούμε πως διαγωνιοποιείται ο πίνακας H_x ο οποίος δίνεται από την σχέση

$$H_x = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Είδαμε στα προηγούμενα ότι ο πίνακας αυτός έχει δύο ιδιοτιμές, την $\lambda_1 = -\hbar/2$ και την $\lambda_2 = \hbar/2$ ενώ αν θέσουμε $a = 1/\sqrt{2}$ τα ιδιοδιανύσματα που αντιστοιχούν σε αυτές τις ιδιοτιμές είναι τα:

$$|-x\rangle = \begin{bmatrix} a \\ -a \end{bmatrix}, \quad |+x\rangle = \begin{bmatrix} a \\ a \end{bmatrix}$$

Επομένως εφόσον $H_x |-x\rangle = \lambda_1 |-x\rangle$ και $H_x |+x\rangle = \lambda_2 |+x\rangle$, μπορούμε να γράψουμε:

$$H_x \begin{bmatrix} a \\ -a \end{bmatrix} = \lambda_1 \begin{bmatrix} a \\ -a \end{bmatrix}, \quad H_x \begin{bmatrix} a \\ a \end{bmatrix} = \lambda_2 \begin{bmatrix} a \\ a \end{bmatrix}$$

Μπορούμε να συνδυάσουμε τις δύο αυτές εξισώσεις σε μία:

$$H_x \begin{bmatrix} a & a \\ -a & a \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 a & \lambda_2 a \\ -\lambda_1 a & \lambda_2 a \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a & a \\ -a & a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \quad (1.48)$$

Μπορούμε να δείξουμε ότι ο πίνακας V ο οποίος έχει ως στήλες τα ιδιοδιανύσματα του H , δηλαδή:

$$V = \begin{bmatrix} a & a \\ -a & a \end{bmatrix}$$

είναι μοναδιαίος. Πράγματι ο ανάστροφος του είναι ο:

$$V^T = \begin{bmatrix} a & -a \\ a & a \end{bmatrix}$$

και μπορούμε να δούμε ότι:

$$\mathbf{V}^T \mathbf{V} = \begin{bmatrix} a & -a \\ a & a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & a \\ -a & a \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2a^2 & 0 \\ 0 & 2a^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

και με τον ίδιο τρόπο προκύπτει και ότι $\mathbf{V} \mathbf{V}^T = \mathbf{I}$, οπότε

$$\mathbf{V}^T \mathbf{V} = \mathbf{V} \mathbf{V}^T = \mathbf{I}$$

δηλαδή ο πίνακας είναι μοναδιαίος. Αν επίσης ορίσουμε τον διαγώνιο πίνακα να αποτελείται από τις ιδιοτιμές του $\mathbf{H}_x$,

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

τότε από την (1.48), θα έχουμε:

$$\mathbf{H}_x \mathbf{V} = \mathbf{V} \mathbf{\Lambda}$$

οπότε πολλαπλασιάζοντας δεξιά με τον πίνακα $\mathbf{V}^T$ θα έχουμε:

$$\mathbf{H}_x = \mathbf{V} \mathbf{\Lambda} \mathbf{V}^T$$

Με αυτό τον τρόπο γράψαμε τον πίνακα $\mathbf{H}_x$ στην διαγώνια μορφή του.

Το παραπάνω παράδειγμα υποδεικνύει τον τρόπο με τον οποίο μπορούμε να διαγωνιοποιούμε έναν οποιοδήποτε κανονικό πίνακα: βρίσκουμε όλες τις ιδιοτιμές λ_i και τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα $|\psi_i\rangle$. Φροντίζουμε έτσι ώστε τα $|\psi_i\rangle$ να είναι μία ορθοκανονική βάση, δηλαδή $\langle \psi_p | \psi_q \rangle = 0$ για $p \neq q$ και $\langle \psi_p | \psi_p \rangle = 1$. Στη συνέχεια βάζουμε τις ιδιοτιμές ως στοιχεία ενός διαγώνιου πίνακα $\mathbf{\Lambda}$ έτσι ώστε το στοιχείο στην $i^{\text{οστή}}$ γραμμή και την $i^{\text{οστή}}$ στήλη να είναι το λ_i , και φτιάχνουμε τον πίνακα $\mathbf{V}$ έτσι ώστε η $i^{\text{οστή}}$ στήλη του να περιέχει τα στοιχεία του $|\psi_i\rangle$.

1.20 Μία βάση από ιδιοδιανύσματα

Υπάρχει και μία ενδιαφέρουσα ιδιότητα που προκύπτει από την διαγωνιοποίηση των κανονικών πινάκων. Εφόσον $\mathbf{V} \mathbf{\Lambda} \mathbf{V}^T = \mathbf{A}$ προκύπτει ότι

$$\mathbf{A} \mathbf{V} = \mathbf{\Lambda} \mathbf{V}$$

Αν γράψουμε το $\mathbf{V}$ ως εξής:

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} v_{11} & \cdots & v_{1N} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ v_{N1} & \cdots & v_{NN} \end{bmatrix}$$

και τον $\mathbf{\Lambda}$ ως εξής:

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_N \end{bmatrix}$$

τότε είναι σχετικά εύκολο να εφαρμόσουμε τις ιδιότητες των πινάκων και να δείξουμε ότι:

$$\mathbf{A} \begin{bmatrix} v_{i1} \\ \vdots \\ v_{N1} \end{bmatrix} = \lambda_i \begin{bmatrix} v_{i1} \\ \vdots \\ v_{N1} \end{bmatrix}$$

Δηλαδή εφόσον ο $\mathbf{A}$ διαγωνιοποιείται τότε ο πίνακας $\mathbf{V}$ θα έχει αναγκαστικά ως στήλες ιδιοδιανύσματα του $\mathbf{A}$. Ας θέσουμε τώρα:

$$|\psi_i\rangle = \begin{bmatrix} v_{i1} \\ \vdots \\ v_{N1} \end{bmatrix}$$

Είναι εύκολο να δείξουμε ότι:

$$\langle \psi_p | \psi_q \rangle = \sum_{k=1}^N v_{pk}^* v_{qk} \quad (1.49)$$

Εφόσον ο V πρέπει να είναι μοναδιαίος, $V^T V = I$ οπότε:

$$\begin{bmatrix} v_{11}^* & \cdots & v_{N1}^* \\ \vdots & & \vdots \\ v_{1N}^* & \cdots & v_{NN}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{11} & \cdots & v_{1N} \\ \vdots & & \vdots \\ v_{N1} & \cdots & v_{NN} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

Από την παραπάνω σχέση προκύπτει ότι:

$$\sum_{k=1}^N v_{pk}^* v_{qk} = \begin{cases} 1 & , \quad p = q \\ 0 & , \quad p \neq q \end{cases}$$

Συνδυάζοντας την τελευταία σχέση και την (1.49), προκύπτει ότι:

$$\langle \psi_p | \psi_q \rangle = \begin{cases} 1 & , \quad p = q \\ 0 & , \quad p \neq q \end{cases}$$

Επομένως όλα τα $|\psi_i\rangle$ είναι κάθετα μεταξύ τους και έχουν μέτρο ίσο με $\langle \psi_i | \psi_i \rangle = 1$. Δείξαμε ότι:

Αποτέλεσμα 1.8: Ορθοκανονικότητα των ιδιοδιανυσμάτων κανονικού πίνακα

Έστω ένας κανονικός πίνακας A που διαγωνιοποιείται ως $A = V^T \Lambda V$. Τότε ο διαγώνιος πίνακας Λ περιέχει τις ιδιοτιμές του πίνακα A και ο μοναδιαίος πίνακας V έχει ως στήλες τα ιδιοδιανύσματα $|\psi_i\rangle$ τα οποία είναι κάθετα μεταξύ τους, $\langle \psi_p | \psi_q \rangle = 0$ για $p \neq q$ και έχουν μέτρο ίσο με 1, $\langle \psi_i | \psi_i \rangle = 1$.

Τώρα θα δείξουμε ότι τα ιδιοδιανύσματα που περιέχονται στις στήλες του πίνακα V αποτελούν και μία ορθοκανονική βάση που παράγει όλες τις πιθανές κβαντικές καταστάσεις $|\psi\rangle$ ενός συστήματος. Αυτό το είχαμε ήδη δει στην περίπτωση των ιδιοδιανυσμάτων του H_x που υπολογίσαμε στις (1.43) και (1.44) όπου αποδείξαμε ότι τα $|0\rangle$ και $|1\rangle$ παράγονται ως γραμμικός συνδυασμός των $|v_1\rangle$ και $|v_2\rangle$.

Ας υποθέσουμε ότι ο πίνακας A είναι 2×2 και επομένως έχουμε δύο ιδιοτιμές λ_1 και λ_2 και πως ο πίνακας V έχει στοιχεία:

$$V = \begin{bmatrix} v_{11} & v_{12} \\ v_{21} & v_{22} \end{bmatrix}$$

Τα ιδιοδιανύσματα είναι τα $|\psi_1\rangle$ και $|\psi_2\rangle$ που αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές λ_1 και λ_2 προκύπτουν από τις στήλες του V ,

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \begin{bmatrix} v_{11} \\ v_{21} \end{bmatrix} = v_{11} |0\rangle + v_{21} |1\rangle \\ |\psi_2\rangle &= \begin{bmatrix} v_{12} \\ v_{22} \end{bmatrix} = v_{12} |0\rangle + v_{22} |1\rangle \end{aligned}$$

Από τις παραπάνω σχέσεις εύκολα προκύπτει ότι:

$$\begin{aligned} v_{11} &= \langle 0 | \psi_1 \rangle \quad , \quad v_{21} = \langle 1 | \psi_1 \rangle \\ v_{12} &= \langle 0 | \psi_2 \rangle \quad , \quad v_{22} = \langle 1 | \psi_2 \rangle \end{aligned}$$

Θέλουμε τώρα να εκφράσουμε τα $|0\rangle$ και $|1\rangle$ ως προς τα $|\psi_1\rangle$ και $|\psi_2\rangle$. Δηλαδή προσπαθούμε να βρούμε συντελεστές c_{pq} έτσι ώστε:

$$\begin{aligned} |0\rangle &= c_{11} |\psi_1\rangle + c_{21} |\psi_2\rangle \\ |1\rangle &= c_{12} |\psi_1\rangle + c_{22} |\psi_2\rangle \end{aligned}$$

Πολλαπλασιάζουμε από αριστερά και τις δύο σχέσεις με $\langle 0|$ και $\langle 1|$. Θα βρούμε:

$$1 = \langle 0|0\rangle = v_{11}c_{11} + v_{12}c_{21}$$

$$0 = \langle 1|0\rangle = v_{21}c_{11} + v_{22}c_{21}$$

$$0 = \langle 0|1\rangle = v_{11}c_{12} + v_{12}c_{22}$$

$$1 = \langle 1|1\rangle = v_{21}c_{12} + v_{22}c_{22}$$

Αν προσέξουμε λίγο τους δείκτες των στοιχείων στις παραπάνω εξισώσεις θα δούμε ότι τα αθροίσματα στο δεξιό μέρος μπορεί να εκφραστεί βάσει των στοιχείων ενός πίνακα $\mathbf{D}$ που είναι το γινόμενο του πίνακα $\mathbf{V}$ και του πίνακα που περιέχει τους συντελεστές c_{pq} που ψάχνουμε:

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{bmatrix}$$

Οι εξισώσεις γράφονται ενιαία με μορφή πίνακα

$$\begin{bmatrix} v_{11} & v_{12} \\ v_{21} & v_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{bmatrix} = \mathbf{V}\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \mathbf{I}$$

Η παραπάνω σχέση σημαίνει ότι ο πίνακας $\mathbf{C}$ που περιέχει τους συντελεστές που ψάχνουμε είναι ο αντίστροφος του μοναδιαίου πίνακα $\mathbf{V}$ που γνωρίζουμε ότι είναι ο ανάστροφος $\mathbf{V}^T$ του $\mathbf{V}$,

$$\mathbf{C} = \mathbf{V}^T$$

Δείξαμε επομένως κάτι πολύ σημαντικό για την περίπτωση όπου ο κανονικός $\mathbf{A}$ είναι 2×2 το οποίο όμως επεκτείνεται και για πίνακες μεγαλύτερων διαστάσεων:

Αποτέλεσμα 1.9: Διαγωνιοποίηση κανονικού πίνακα και ορθοκανονική βάση

Έστω ένας κανονικός $N \times N$, πίνακας $\mathbf{A}$ που γνωρίζουμε ότι διαγωνιοποιείται ως $\mathbf{A} = \mathbf{V}^T \mathbf{\Lambda} \mathbf{V}$ όπου $\mathbf{\Lambda}$ είναι ένας διαγώνιος πίνακας που περιέχει τις ιδιοτιμές λ_i του $\mathbf{A}$ στα στοιχεία της κύριας διαγώνιου του και ο $\mathbf{V}$ είναι ένας μοναδιαίος πίνακας ο οποίος περιέχει στις στήλες του τα ιδιοδιανύσματα $|\psi_i\rangle$ τα οποία αποτελούν μία ορθοκανονική βάση για όλες τις κυματοσυναρτήσεις που αναπαρίστανται με διάνυσμα στις N διαστάσεις.

Το παραπάνω αποτέλεσμα έχει μία ιδιαίτερη σημασία για τους Ερμιτιανούς πίνακες $\mathbf{H}$ που όπως είπαμε στα προηγούμενα περιγράφουν τα φυσικά μεγέθη που μπορούμε να μετρήσουμε στην κβαντική μηχανική. Εφόσον οι ιδιοτιμές λ_i του $\mathbf{H}$ είναι τα πιθανά αποτελέσματα της μέτρησης του μεγέθους που περιγράφεται από τον $\mathbf{H}$ και τα ιδιοδιανύσματα του $|\psi_i\rangle$ αντιπροσωπεύουν την τελική κατάσταση όταν μετρήσουμε την αντίστοιχη ιδιοτιμή λ_i , η παραπάνω ιδιότητα εξασφαλίζει ότι η αρχική κατάσταση του συστήματος πριν την μέτρηση $|\psi\rangle$ πάντα ολόκληρη θα μπορεί να εκφραστεί ως γραμμικός συνδυασμός των $|\psi_i\rangle$,

$$|\psi\rangle = a_1 |\psi_1\rangle + a_2 |\psi_2\rangle + \cdots + a_N |\psi_N\rangle = \sum_{i=1}^N a_i |\psi_i\rangle$$

Μετά την μέτρηση η κατάσταση θα “καταρρεύσει” σε ένα από τα ιδιοδιανύσματα $|\psi_i\rangle$ με πιθανότητα $|a_i|^2$. Έχει ενδιαφέρον να δούμε ότι το άθροισμα των πιθανοτήτων πρέπει να ισούται με 1. Εφόσον $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ θα έχουμε:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | \sum_i a_i |\psi_i\rangle \rangle = \sum_i a_i \langle \psi | \psi_i \rangle$$

Επίσης έχουμε:

$$\langle \psi | \psi_i \rangle = \langle \psi_i | \psi \rangle^* = \left(\sum_{k=1}^N a_k \langle \psi_i | \psi_k \rangle \right)^*$$

Όπως είδαμε όμως:

$$\langle \psi_i | \psi_k \rangle = \begin{cases} 1 & , \quad i = k \\ 0 & , \quad i \neq k \end{cases}$$

Οπότε:

$$\langle \psi | \psi_i \rangle = a_i^*$$

και δεδομένου ότι $\langle \psi | \psi \rangle = 1$,

$$\sum_i |a_i|^2 = \langle \psi | \psi \rangle = 1$$

Δηλαδή το γεγονός τα ιδιοδιανύσματα $|\psi_i\rangle$ του $\mathbf{H}$ φτιάχνουν μία ορθοκανονική βάση εξασφαλίζει ότι οι πιθανότητες $|a_i|^2$ του να λάβουμε το αποτέλεσμα λ_i θα αθροίζονται στη μονάδα.

1.21 Πίνακες προβολών

Θα δούμε τώρα πως πέρα από το $\langle \psi | \psi \rangle$ είναι χρήσιμο να εφαρμόζουμε και το $|\psi\rangle \langle \psi|$. Δεν πρέπει να μας τρομάζει το $|\psi\rangle \langle \psi|$ καθώς για παράδειγμα στην περίπτωση ενός qubit το $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ παριστάνεται με ένα διάνυσμα 2×1 ,

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$$

ενώ το $\langle \psi |$ θα είναι ένα διάνυσμα 1×2

$$\langle \psi | = [a^* \quad b^*]$$

Όταν γράφουμε $|\psi\rangle \langle \psi|$ στην ουσία πρόκειται για τον πολλαπλασιασμό ενός πίνακα 2×1 με έναν πίνακα 1×2 ,

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

Ίσως αυτή η μορφή δεν είναι ιδιαίτερα διαφωτιστική για το πως ερμηνεύεται ο πίνακας $|\psi\rangle \langle \psi|$. Εναλλακτικά αν δούμε τι συμβαίνει όταν ο $|\psi\rangle \langle \psi|$ εφαρμόζεται σε μία δεύτερη κβαντική κατάσταση ενός qubit $|\phi\rangle$. Θα έχουμε:

$$(|\psi\rangle \langle \psi|) |\phi\rangle = |\psi\rangle \langle \psi | \phi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle |\psi\rangle \quad (1.50)$$

Η πρώτη ισότητα προκύπτει από το γεγονός ότι όταν πολλαπλασιάζονται τρεις πίνακες $\mathbf{A} = |\psi\rangle$, $\mathbf{B} = \langle \psi|$ και $\mathbf{C} = |\phi\rangle$ τότε $(\mathbf{AB})\mathbf{C} = \mathbf{A}(\mathbf{BC})$. Στην περίπτωση αυτή $\mathbf{BC} = |\psi\rangle \langle \phi|$ είναι ένας πίνακας 2×2 δηλαδή αριθμός οπότε $\mathbf{A}(\mathbf{BC}) = (\mathbf{BC})\mathbf{A} = \langle \psi | \phi \rangle |\psi\rangle$.

Για να ερμηνεύσουμε λίγο καλύτερα το αποτέλεσμα στην (1.50), αν σκεφτούμε μία ανάλογη περίπτωση που έχουμε στα διανύσματα σε ένα επίπεδο. Ας πάρουμε δύο διανύσματα στο επίπεδο.

$$\vec{a} = (x_a, y_a)$$

$$\vec{n} = (n_b, n_b)$$

Το εσωτερικό γινόμενο των δύο διανυσμάτων $\vec{a} \cdot \vec{n}$ δίνεται από την σχέση:

$$\vec{a} \cdot \vec{n} = |\vec{a}| |\vec{n}| \cos \phi_{an}$$

όπου το ϕ_{an} είναι η γωνία μεταξύ των διανυσμάτων $\vec{a}$ και $\vec{n}$. Αν το $\vec{n}$ έχει μέτρο ίσο με τη μονάδα, $|\vec{n}| = 1$, τότε:

$$\vec{a} \cdot \vec{n} = |\vec{a}| \cos \phi_{an}$$

δηλαδή το $\vec{a} \cdot \vec{n}$ είναι η προβολή του $\vec{a}$ κατά μήκος του μοναδιαίου διανύσματος $\vec{n}$. Αν πολλαπλασιάσουμε το $\vec{a} \cdot \vec{n}$ με το $\vec{n}$ τότε το διάνυσμα

$$\vec{\beta} = (\vec{a} \cdot \vec{n}) \vec{n}$$

έχει μήκος ίσο με την προβολή του $\vec{a}$ πάνω στο $\vec{n}$ και κατεύθυνση ίδια με το $\vec{n}$. Επομένως σαν διάνυσμα το $\vec{\beta}$, είναι η προβολή του $\vec{a}$ πάνω στο $\vec{n}$. Αν δείτε την (1.50) βλέπουμε ότι στην ουσία είναι παρόμοιες, με το εσωτερικό γινόμενο των καταστάσεων $\langle \psi | \phi \rangle$ παίζει το ρόλο του εσωτερικού γινομένου των διανυσμάτων

$\vec{a} \cdot \vec{n}$. Στην δεύτερη περίπτωση το εσωτερικό γινόμενο διανυσμάτων πολλαπλασιάζεται με το μοναδιαίο διάνυσμα $\vec{n}$ ενώ στην πρώτη περίπτωση με τη κυματοσυνάρτηση $|\psi\rangle$. Οπότε υπό αυτή την έννοια ο πίνακας $|\psi\rangle\langle\psi|$ πραγματοποιεί την προβολή μίας κυματοσυνάρτησης όπως η $|\phi\rangle$ πάνω στην $|\psi\rangle$. Για αυτό το λόγο ονομάζουμε τον $|\psi\rangle\langle\psi|$, *πίνακα προβολής*.

Παράδειγμα 1.9: Πίνακες προβολής των ιδιοδιανυσμάτων του H_x

Μπορούμε να υπολογίσουμε τους πίνακες προβολής για τα ιδιοδιανύσματα του H_x που όπως είδαμε είναι:

$$|-x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$$

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

Θα υπολογίσουμε τους πίνακες προβολής $|-x\rangle\langle -x|$ και $|+x\rangle\langle +x|$. Ας γράψουμε τα $|-x\rangle$ και $|+x\rangle$ ως διανύσματα στήλης:

$$|-x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad \langle -x| = \frac{1}{\sqrt{2}} [1 \quad -1]$$

$$|+x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \langle +x| = \frac{1}{\sqrt{2}} [1 \quad 1]$$

Αν κάνουμε τους πολλαπλασιασμούς πινάκων προκύπτει ότι:

$$|-x\rangle\langle -x| = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} [1 \quad -1] = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$|+x\rangle\langle +x| = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} [1 \quad 1] = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Από το παραπάνω παράδειγμα προκύπτει μία ενδιαφέρουσα ιδιότητα. Εάν προσθέσουμε τους δύο πίνακες προβολής,

$$|-x\rangle\langle -x| + |+x\rangle\langle +x| = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \mathbf{I}$$

Δηλαδή αν αθροίσουμε τους πίνακες προβολής όλων των ιδιοδιανυσμάτων του πίνακα H_x θα βρούμε τον ταυτοτικό πίνακα. Πρόκειται για μία γενικότερη ιδιότητα των πινάκων προβολής: Αν έχουμε ένα κανονικό $N \times N$ πίνακα A και τα $|\psi_i\rangle$ είναι μία ορθοκανονική βάση που παράγεται από τα ιδιοδιανύσματα του, τότε ο πίνακας S που παράγεται από το άθροισμα των πινάκων προβολών στα ιδιοδιανύσματα θα ισούται με τον ταυτοτικό πίνακα:

$$S = |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + \cdots + |\psi_N\rangle\langle\psi_N| = \sum_{p=1}^N |\psi_p\rangle\langle\psi_p| = \mathbf{I}$$

Η απόδειξη δεν είναι τόσο δύσκολη όσο φαίνεται. Εφόσον τα $|\psi_i\rangle$ συνθέτουν μία ορθοκανονική βάση, θα πρέπει κάθε κυματοσυνάρτηση $|\psi\rangle$ να γράφεται ως γραμμικός συνδυασμός των $|\psi_i\rangle$,

$$|\psi\rangle = a_1|\psi_1\rangle + \cdots + a_N|\psi_N\rangle = \sum_{p=1}^N a_p|\psi_p\rangle$$

Εφόσον $\langle\psi_i|\psi\rangle = a_i$, μπορούμε να δούμε ότι:

$$|\psi_i\rangle\langle\psi_i|\psi\rangle = |\psi_i\rangle a_i = a_i|\psi_i\rangle$$

Επομένως ας γράψουμε για κάθε i τις σχέσεις:

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle \langle \psi_1| \psi\rangle &= a_1 |\psi_1\rangle \\ |\psi_2\rangle \langle \psi_2| \psi\rangle &= a_2 |\psi_2\rangle \\ &\vdots \\ |\psi_N\rangle \langle \psi_N| \psi\rangle &= a_N |\psi_N\rangle \end{aligned}$$

οπότε αθροίζοντας:

$$\mathbf{S} |\psi\rangle = (|\psi_1\rangle \langle \psi_1| + \cdots + |\psi_N\rangle \langle \psi_N|) |\psi\rangle = a_1 |\psi_1\rangle + \cdots + a_N |\psi_N\rangle = |\psi\rangle$$

Δηλαδή όταν ο πίνακας $\mathbf{S}$ εφαρμόζεται σε οποιοδήποτε κυματοσυνάρτηση $|\psi\rangle$ ισούται πάντα με το $|\psi\rangle$. Επομένως ο πίνακας $\mathbf{S}$ πρέπει να είναι ο ταυτοτικός πίνακας $\mathbf{I}$,

$$|\psi_1\rangle \langle \psi_1| + \cdots + |\psi_N\rangle \langle \psi_N| = \mathbf{I}$$

1.22 Οι κυματοσυναρτήσεις ως διανύσματα

Καταλαβαίνουμε από τα προηγούμενα ότι τα διανύσματα και οι πίνακες έχουν κεντρική σημασία στην κβαντική υπολογιστική καθώς είτε περιγράφουν την εξέλιξη των qubit (στην περίπτωση των μοναδιαίων πινάκων) είτε την διαδικασία μέτρησης (στην περίπτωση των Ερμιτιανών πινάκων). Αλλά και το πως αναπαριστούμε μία κυματοσυνάρτηση $|\psi\rangle$ ως διάνυσμα έχει και αυτό ιδιαίτερη σημασία, καθώς οι πίνακες αυτοί πολλαπλασιάζονται με τα διανύσματα αυτά.

Για παράδειγμα αν υποθέσουμε ότι χρησιμοποιούμε μία ορθοκανονική βάση $|\phi_i\rangle$, τότε για οποιαδήποτε κυματοσυνάρτηση $|\psi\rangle$ μπορούμε να γράψουμε:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N a_i |\psi_i\rangle$$

Οπότε σύμφωνα με αυτά που ξέρουμε μέχρι τώρα θα πρέπει να αναπαριστήσουμε την κυματοσυνάρτηση ως:

$$|\psi\rangle \rightarrow \vec{a} = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_N \end{bmatrix}$$

Αν όμως επιλέγαμε μία εναλλακτική ορθοκανονική βάση, έστω τις κυματοσυναρτήσεις ϕ_i τότε θα χρησιμοποιούσαμε εν γένει διαφορετικούς συντελεστές:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N b_i |\phi_i\rangle$$

οπότε:

$$|\psi\rangle \rightarrow \vec{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_N \end{bmatrix}$$

Βλέπουμε επομένως ότι οι συντεταγμένες των διανυσμάτων που περιγράφουν κάθε φορά την κυματοσυνάρτηση $|\psi\rangle$ είναι διαφορετικές. Ωστόσο θα πρέπει

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N a_i |\psi_i\rangle = \sum_{i=1}^N b_i |\phi_i\rangle$$

Από την παραπάνω σχέση μπορεί να προκύψει μία σχέση μεταξύ των συντελεστών a_i και b_i . Αν πολλαπλασιάσουμε δεξιά με το $|\phi_p\rangle$ τότε:

$$\sum_{i=1}^N a_i \langle \phi_p | \psi_i \rangle = \sum_{i=1}^N b_i \langle \phi_p | \phi_i \rangle$$

Εφόσον όμως τα $|\phi_i\rangle$ είναι ορθοκανονική βάση, θα έχουμε $\langle\phi_p|\phi_i\rangle = 0$ όταν $p \neq i$ και $\langle\phi_p|\phi_p\rangle = 1$. Επομένως στο άθροισμα στο δεύτερο μέρος θα επιβιώσει μόνο ο όρος b_p . Αν σχηματίσουμε ένα πίνακα $\mathbf{R}$ με στοιχεία $r_{pi} = \langle\phi_p|\psi_i\rangle$ τότε:

$$\sum_{i=1}^N r_{pi} a_i = b_p$$

ή σε μορφή πινάκων:

$$\mathbf{R}\vec{a} = \vec{b}$$

Θα δείξουμε τώρα ότι ο πίνακας $\mathbf{R}$ είναι μοναδιαίος. Ας υπολογίσουμε τα στοιχεία γ_{pq} του πίνακα $\mathbf{\Gamma}$ που προκύπτει από το γινόμενο $\mathbf{R}^T \mathbf{R}$. Θα έχουμε:

$$\gamma_{pq} = \sum_{i=1}^N r_{ip}^* r_{iq}$$

Ας δούμε τώρα την ομορφιά της χρήσης του συμβολισμού των bracket που οφείλεται στον Paul Dirac. Εφόσον $r_{pi} = \langle\phi_p|\psi_i\rangle$ θα έχουμε $r_{pi}^* = \langle\phi_p|\psi_i\rangle^* = \langle\psi_i|\phi_p\rangle$. Οπότε:

$$\gamma_{pq} = \sum_{i=1}^N \langle\phi_p|\psi_i\rangle \langle\psi_i|\phi_q\rangle = \langle\phi_p| \left[\sum_{i=1}^N |\psi_i\rangle \langle\psi_i| \right] |\phi_q\rangle$$

Η παραπάνω σχέση προκύπτει από το γεγονός ότι το $\langle\phi_p|\psi_i\rangle \langle\psi_i|\phi_q\rangle$ είναι στην ουσία ένα γινόμενο ενός $1 \times N$ πίνακα γραμμή $\langle\phi_p|$ επί έναν $N \times N$ πίνακα προβολής $|\psi_i\rangle \langle\psi_i|$ επί ένα $1 \times N$ πίνακα στήλη $|\phi_q\rangle$. Αν εφαρμόσουμε την επιμεριστική ιδιότητα θα πρέπει να έχουμε:

$$\langle\phi_p|\psi_1\rangle \langle\psi_1|\phi_q\rangle + \langle\phi_p|\psi_2\rangle \langle\psi_2|\phi_q\rangle = \langle\phi_p| (|\psi_1\rangle \langle\psi_1| + |\psi_2\rangle \langle\psi_2|) |\phi_q\rangle$$

που εύκολα γενικεύεται και για αθροίσματα με περισσότερους όρους. Είδαμε ότι το άθροισμα όλων των πινάκων προβολών $|\psi_i\rangle \langle\psi_i|$ πρέπει να μας κάνει τον ταυτοτικό πίνακα:

$$\sum_{i=1}^N |\psi_i\rangle \langle\psi_i| = \mathbf{I}$$

Χρησιμοποιώντας την παραπάνω σχέση βλέπουμε ότι:

$$\gamma_{pq} = \sum_{i=1}^N \langle\phi_p|\psi_i\rangle \langle\psi_i|\phi_q\rangle = \langle\phi_p|\mathbf{I}|\phi_q\rangle = \langle\phi_p|\phi_q\rangle = \begin{cases} 1 & , p = q \\ 0 & , p \neq q \end{cases}$$

Δηλαδή ο πίνακας $\mathbf{\Gamma} = \mathbf{R}^T \mathbf{R}$ που έχει στοιχεία τα γ_{pq} είναι ο ταυτοτικός πίνακας $\mathbf{I}$, οπότε $\mathbf{R}^T \mathbf{R} = \mathbf{I}$. Με τον ίδιο τρόπο μπορούμε να δείξουμε ότι $\mathbf{R} \mathbf{R}^T = \mathbf{I}$ και επομένως:

$$\mathbf{R}^T \mathbf{R} = \mathbf{R} \mathbf{R}^T = \mathbf{I}$$

Αποτέλεσμα 1.10: Αλλαγή ορθοκανονικής βάσης μέσω μοναδιαίου πίνακα

Έστω δύο ορθοκανονικές βάσεις $|\psi_i\rangle$ και $|\phi_i\rangle$. Αν η αναπαράσταση του $|\psi\rangle$ στις δύο αυτές βάσεις είναι:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N a_i |\psi_i\rangle$$

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N b_i |\phi_i\rangle$$

όπου $a_i = \langle \psi_i | \psi \rangle$, $b_i = \langle \phi_i | \psi \rangle$ και σχηματίζουμε τα διανύσματα στήλες:

$$\vec{a} = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_N \end{bmatrix}$$

$$\vec{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_N \end{bmatrix}$$

Τότε πάντα θα υπάρχει ένας μοναδιαίος πίνακας $\mathbf{R}$ ο οποίος θα συνδέει την μία αναπαράσταση με την άλλη, δηλαδή:

$$\vec{b} = \mathbf{R}\vec{a}$$

Ο πίνακας αυτός θα έχει στοιχεία r_{pq} που καθορίζονται από την σχέση:

$$r_{pq} = \langle \phi_p | \psi_q \rangle$$

Παράδειγμα 1.10: Αλλαγή βάσης από τα ιδιοδιανύσματα του x σε αυτά του y

Είδαμε ότι μπορούμε να φτιάξουμε μία ορθοκανονική βάση από τα ιδιοδιανύσματα που αντιστοιχούν στις δύο διαφορετικές τιμές του spin κατά τον x και y άξονα. Οι ορθοκανονικές βάσεις έχουν ως εξής:

$$|\psi_1\rangle = |-x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$$

$$|\psi_2\rangle = |+x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$$

$$|\phi_1\rangle = |-y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{j}{\sqrt{2}}|1\rangle$$

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

Ας θεωρήσουμε τώρα μία κυματοσυνάρτηση η οποία είναι

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|-x\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|+x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|-x\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|+x\rangle$$

Θέλουμε να βρούμε την αναπαράσταση της ως προς τα $|-y\rangle$ και $|+y\rangle$ υπολογίζοντας πρώτα τον πίνακα $\mathbf{R}$. Το διάνυσμα που περιέχει τις συντεταγμένες του $|\psi\rangle$ ως προς τα $|\psi_1\rangle = |-x\rangle$ και $|\psi_2\rangle = |+x\rangle$ είναι:

$$\vec{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

Ο πίνακας $\mathbf{R}$ είδαμε ότι έχει στοιχεία $r_{pq} = \langle \phi_p | \psi_q \rangle$. Οπότε

$$\begin{aligned} r_{11} &= \langle \phi_1 | \psi_1 \rangle = \frac{1-j}{2} & r_{12} &= \langle \phi_1 | \psi_2 \rangle = \frac{1+j}{2} \\ r_{21} &= \langle \phi_2 | \psi_1 \rangle = \frac{1+j}{2} & r_{22} &= \langle \phi_2 | \psi_2 \rangle = \frac{1-j}{2} \end{aligned}$$

Οπότε ο πίνακας $\mathbf{R}$ γράφεται ως εξής:

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} a & a^* \\ a^* & a \end{bmatrix}$$

όπου $a = (1 - j)/2$. Μπορούμε να επιβεβαιώσουμε ότι ο πίνακας είναι μοναδιαίος υπολογίζοντας τον ανάστροφο του:

$$\mathbf{R}^T = \begin{bmatrix} a^* & a \\ a & a^* \end{bmatrix}$$

Βλέπουμε ότι

$$\mathbf{R}\mathbf{R}^T = \begin{bmatrix} a & a^* \\ a^* & a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a^* & a \\ a & a^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2|a|^2 & a^2 + (a^*)^2 \\ a^2 + (a^*)^2 & 2|a|^2 \end{bmatrix}$$

Δεδομένου ότι $a = (1 - j)/2$, βλέπουμε ότι $a^2 = (1 - 2j + j^2)/4 = (1 - 2j - 1)/4 = -j/2$ και επομένως το a^2 είναι καθαρά φανταστικό (δεν έχει πραγματικό μέρος). Άρα $a^2 + (a^*)^2 = 0$. Επίσης εύκολα βλέπουμε ότι $|a|^2 = 1/2$ οπότε $2|a|^2 = 1$. Τελικά:

$$\mathbf{R}\mathbf{R}^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \mathbf{I}$$

Η παραπάνω σχέση επιβεβαιώνει ότι ο πίνακας $\mathbf{R}$ είναι μοναδιαίος. Για να βρούμε τους συντελεστές όταν χρησιμοποιούμε την ορθοκανονική βάση:

$$\vec{b} = \mathbf{R}\vec{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} a & a^* \\ a^* & a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a - a^* \\ a^* - a \end{bmatrix} = \frac{j}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Στην νέα ορθοκανονική βάση επομένως θα έχουμε:

$$|\psi\rangle = -\frac{j}{\sqrt{2}} |\phi_1\rangle + \frac{j}{\sqrt{2}} |\phi_2\rangle = -\frac{j}{\sqrt{2}} |-y\rangle + \frac{j}{\sqrt{2}} |+y\rangle$$

1.23 Τα στοιχεία των πινάκων

Είδαμε στην προηγούμενη ενότητα ότι οι συντεταγμένες a_i των διανυσμάτων εξαρτώνται από την επιλογή της βάσης $|\psi_i\rangle$. Μπορούμε να δείξουμε ότι το ίδιο ισχύει και για τα στοιχεία A_{pq} των πινάκων $\mathbf{A}$ που δρουν πάνω στις κυματοσυναρτήσεις είτε είναι μοναδιαίοι είτε είναι Ερμιτιανοί. Ας θεωρήσουμε μία κυματοσυνάρτηση:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N a_i |\psi_i\rangle$$

στην οποία δρα ένας πίνακας $\mathbf{A}$ και την μετασχηματίζει σε μία κυματοσυνάρτηση $|\phi\rangle$ με συντεταγμένες b_i ,

$$|\phi\rangle = \mathbf{A}|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N b_i |\psi_i\rangle$$

Πολλαπλασιάζοντας αριστερά με $\langle\psi_p|$ θα έχουμε:

$$\langle\psi_p|\mathbf{A}|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N b_i \langle\psi_p|\psi_i\rangle$$

Όμως $\langle\psi_p|\psi_i\rangle = 0$ όταν $i \neq p$ και $\langle\psi_p|\psi_p\rangle = 1$. Οπότε:

$$b_p = \langle\psi_p|\mathbf{A}|\psi\rangle$$

Μπορούμε να αναπτύξουμε το $\mathbf{A}|\psi\rangle$ ως εξής:

$$\mathbf{A}|\psi\rangle = \sum_{q=1}^N a_q \mathbf{A}|\psi_q\rangle$$

και ως εκ τούτου:

$$b_p = \sum_{q=1}^N \langle\psi_p|\mathbf{A}|\psi_q\rangle a_q$$

Η παραπάνω σχέση περιγράφει πως ο πίνακας $\mathbf{A}$ δρα πάνω στους συντελεστές a_q της $|\psi\rangle$ ώστε να υπολογιστούν οι συντελεστές b_q της $|\phi\rangle$. Εμείς γνωρίζουμε ότι στην ουσία θα πρέπει να λαμβάνει χώρα ο πολλαπλασιασμός του διανύσματος στήλη $\vec{a}$ που περιέχει τα a_q και να παράγεται το διάνυσμα στήλη $\vec{b}$ που περιέχει τα b_q βάσει του πολλαπλασιασμού πινάκων $\vec{b} = \mathbf{A}\vec{a}$ από την οποία προκύπτει ότι

$$b_p = \sum_{q=1}^N A_{pq} a_q$$

Συγκρίνοντας τις δύο τελευταίες σχέσεις εύκολα προκύπτει ότι:

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

Η παραπάνω σχέση προσφέρει μία έκφραση των στοιχείων του πίνακα $\mathbf{A}$ βάσει των διανυσμάτων της ορθοκανονικής βάσης $|\psi_i\rangle$.

Μπορούμε σχετικά εύκολα να καταλήξουμε σε μία σχέση η οποία συνδέει τα στοιχεία του πίνακα A_{pq} όταν χρησιμοποιούμε ως ορθοκανονική βάση αναπαράστασης τα $|\psi_i\rangle$ με τα στοιχεία του πίνακα $\bar{A}_{pq}$ όταν χρησιμοποιούμε ως βάση αναπαράστασης τα $|\phi_i\rangle$. Θα έχουμε:

$$\bar{A}_{pq} = \langle \phi_p | \mathbf{A} | \phi_q \rangle$$

Ας θυμηθούμε ότι

$$\sum_{i=1}^N |\psi_i\rangle \langle \psi_i| = \mathbf{I}$$

Οπότε:

$$\bar{A}_{pq} = \langle \phi_p | \mathbf{I} \mathbf{A} | \phi_q \rangle = \langle \phi_p | \sum_{m=1}^N |\psi_m\rangle \langle \psi_m| \mathbf{A} \sum_{n=1}^N |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \phi_q \rangle$$

Αν μαζέψουμε όλα τα αθροίσματα έξω θα έχουμε:

$$\bar{A}_{pq} = \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N \langle \phi_p | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \mathbf{A} | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \phi_q \rangle$$

Στην προηγούμενη ενότητα είδαμε ότι τα $\langle \phi_p | \psi_q \rangle$ είναι τα στοιχεία r_{pq} ενός μοναδιαίου πίνακα $\mathbf{R}$ ενώ τα $\bar{r}_{pq} = \langle \psi_p | \phi_q \rangle$ είναι του ανάστροφου πίνακα $\mathbf{R}^T$. Οπότε μπορούμε να γράψουμε:

$$\bar{A}_{pq} = \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N r_{pm} A_{mn} \bar{r}_{nq}$$

Η παραπάνω σχέση υποδεικνύει ότι τα στοιχεία $\bar{A}_{pq}$ μπορούν να προκύψουν από τον πολλαπλασιασμό πινάκων:

$$\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{R} \mathbf{A} \mathbf{R}^T$$

Πράγματι τα στοιχεία β_{mq} του $\mathbf{B} = \mathbf{A} \mathbf{R}^T$ είναι:

$$\beta_{mq} = \sum_{n=1}^N A_{mn} \bar{r}_{nq}$$

οπότε τα στοιχεία $\bar{A}_{pq}$ του πίνακα $\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{R} \mathbf{B}$ θα είναι:

$$\bar{A}_{pq} = \sum_{m=1}^N r_{pm} \beta_{mq} = \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N r_{pm} A_{mn} \bar{r}_{nq}$$

Από την παραπάνω σχέση προκύπτει ότι η αναπαράσταση $\bar{\mathbf{A}}$ σε μία εναλλακτική βάση $|\phi_i\rangle$ υπολογίζεται βάση της σχέσης $\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{R} \mathbf{A} \mathbf{R}^T$.

1.24 Κβαντικοί Τελεστές

Εδώ προκύπτει μία ενδιαφέρουσα συνέπεια που αφορά τα όσα ξέρουμε μέχρι τώρα για τους πίνακες στην κβαντική υπολογιστική. Είδαμε ότι κάθε επεξεργασία που μπορούμε να κάνουμε σε ένα κβαντικό σύστημα όπως ένα qubit περιγράφεται με την δράση $\hat{U}|\psi\rangle$ ενός μοναδιαίου πίνακα $\hat{U}$ που περιγράφει την δράση αυτή πάνω στην κυματοσυνάρτηση του συστήματος $|\psi\rangle$. Ωστόσο τώρα βλέπουμε που περιγράφει τη δράση $\hat{U}$ δεν είναι μοναδικός αλλά εξαρτάται από την βάση που χρησιμοποιούμε για την αναπαράσταση της κυματοσυνάρτησης. Επομένως, ο πίνακας είναι απλά ένας τρόπος περιγραφής της δράσης $\hat{U}$. Στην ορολογία της κβαντικής υπολογιστικής χρησιμοποιούμε τον όρο “τελεστής” για να περιγράψουμε τις δράσεις που κάνουμε πάνω σε κβαντικά συστήματα. Ο τελεστής είναι μία συνάρτηση που μετασχηματίζει την αρχική κυματοσυνάρτηση σε μία άλλη κυματοσυνάρτηση.

Σύμφωνα με τα παραπάνω, όταν ένα κβαντικό σύστημα εξελίσσεται, τότε εφαρμόζεται στην αρχική κατάσταση του $|\psi(0)\rangle$ ένας τελεστής $\hat{U}$ ο οποίος περιγράφει το πως υπολογίζεται η τελική κατάσταση $|\psi(t)\rangle$ από την αρχική $|\psi(0)\rangle$. Γράφουμε:

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

Αν επιλέξουμε μία συγκεκριμένη βάση $|\psi_i\rangle$ στην οποία εκφράζουμε τις κυματοσυναρτήσεις $|\psi\rangle$, τότε ο τελεστής $\hat{U}$ μπορεί να περιγραφεί από έναν πίνακα $\mathbf{U}$ ο οποίος έχει στοιχεία U_{pq} :

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

Αν αλλάξουμε την βάση αναπαράστασης των κυματοσυναρτήσεων τότε όπως είδαμε ο τελεστής περιγράφεται από έναν εναλλακτικό πίνακα $\bar{\mathbf{U}}$. Ωστόσο υπάρχει πάντα ένας μοναδιαίος πίνακας $\mathbf{R}$ ο οποίος συνδέει τους δύο πίνακες που περιγράφουν τον τελεστή $\bar{\mathbf{U}}$,

$$\bar{\mathbf{U}} = \mathbf{R}\mathbf{U}\mathbf{R}^T$$

Παράδειγμα 1.11: Ο πίνακας της κβαντικής πύλης NOT

Ας θεωρήσουμε τον τελεστή $\hat{U}$ που περιγράφει την κβαντική πύλη NOT. Έστω $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ τότε το $\hat{U}$ ανταλλάσσει τα πλάτη των $|0\rangle$ και $|1\rangle$,

$$\hat{U}|\psi\rangle = b|0\rangle + a|1\rangle$$

Αν επιλέξουμε ως βάση τα $|\psi_1\rangle = |0\rangle$ και $|\psi_2\rangle = |1\rangle$ τότε ο πίνακας $\mathbf{U}$ που περιγράφει την κβαντική πύλη NOT θα έχει στοιχεία:

$$\begin{aligned} u_{11} &= \langle\psi_1|\hat{U}|\psi_1\rangle = \langle 0|\hat{U}|0\rangle = \langle 0|1\rangle = 0 \\ u_{12} &= \langle\psi_1|\hat{U}|\psi_2\rangle = \langle 0|\hat{U}|1\rangle = \langle 0|0\rangle = 1 \\ u_{21} &= \langle\psi_2|\hat{U}|\psi_1\rangle = \langle 1|\hat{U}|0\rangle = \langle 1|1\rangle = 1 \\ u_{22} &= \langle\psi_2|\hat{U}|\psi_2\rangle = \langle 1|\hat{U}|1\rangle = \langle 1|0\rangle = 0 \end{aligned}$$

οπότε ο πίνακας που περιγράφει την κβαντική πύλη NOT θα είναι:

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

Σε ότι αφορά τους ερμιτιανούς $\mathbf{H}$ πίνακες που όπως είδαμε περιγράφουν τις μετρήσεις στην κβαντική υπολογιστική, πάλι δεν είναι μοναδικά ορισμένοι. Η κβαντική μηχανική μας λέει ότι για κάθε μέγεθος που θέλουμε να μετρήσουμε υπάρχει ένας τελεστής $\hat{H}$ ο οποίος ανάλογα με την βάση $|\psi_i\rangle$ που επιλέγουμε πάλι περιγράφεται από έναν ερμιτιανό πίνακα $\mathbf{H}$ με στοιχεία h_{pq} ,

$$h_{pq} = \langle\psi_p|\hat{H}|\psi_q\rangle$$

Όπως και στην περίπτωση των πινάκων $\mathbf{U}$ που καθορίζουν την εξέλιξη των συστημάτων, αν αλλάξουμε την βάση, ο πίνακας $\bar{\mathbf{H}}$ που περιγράφει τον τελεστή στην νέα βάση προκύπτει ως:

$$\bar{\mathbf{H}} = \mathbf{R}\mathbf{H}\mathbf{R}^T$$

Μπορούμε να δείξουμε ότι οι δύο πίνακες έχουν τις ίδιες ιδιοτιμές. Πράγματι, εάν το λ είναι ιδιοτιμή του $\bar{H}$ τότε θα υπάρχει ένα $|\psi_\lambda\rangle$ για το οποίο:

$$\bar{H} |\psi_\lambda\rangle = \lambda |\psi_\lambda\rangle$$

ή αν χρησιμοποιήσουμε την σχέση που συνδέει τους πίνακες H και $\bar{H}$,

$$RHR^T |\psi_\lambda\rangle = \lambda |\psi_\lambda\rangle$$

Πολλαπλασιάζοντας αριστερά με R^T θα έχουμε:

$$HR^T |\psi_\lambda\rangle = \lambda R^T |\psi_\lambda\rangle$$

Αν θέσουμε $|\phi_\lambda\rangle = R^T |\psi_\lambda\rangle$ τότε βλέπουμε ότι το $|\phi_\lambda\rangle$ είναι ιδιοδιάνυσμα του H με ιδιοτιμή λ . Επομένως οι δύο διαφορετικές αναπαραστάσεις με πίνακα έχουν τις ίδιες ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα συνδέονται μέσω του πίνακα R^T ο οποίος είναι μοναδιαίος. Αυτό θα έπρεπε να το περιμένουμε από φυσική άποψη: δεν μπορεί η τιμή λ ενός μεγέθους που μετρούμε να εξαρτάται από την επιλογή της ορθοκανονικής βάσης που χρησιμοποιούμε για την αναπαράσταση των κυματοσυναρτήσεων.

1.25 Ιδιότητες τελεστών

Εφόσον τελικά είναι οι τελεστές και όχι οι πίνακες που καθορίζουν το πως εξελίσσονται τα συστήματα αλλά και τον τρόπο που μετράμε σε αυτά, έχει νόημα να ορίσουμε αντίστοιχες ιδιότητες με αυτές των πινάκων και για τους τελεστές.

Θυμηθείτε ότι στην κβαντική υπολογιστική ασχολούμαστε με δύο ειδών πινάκων A , τους Ερμιτιανούς για τις μετρήσεις και τους μοναδιαίους για την εξέλιξη των συστημάτων. Και οι δύο εντάσσονται στην ευρύτερη κατηγορία των κανονικών πινάκων για τους οποίους $AA^T = A^T A$. Ο ανάστροφος του πίνακα A είναι ο πίνακας A^T για τον οποίο έχουμε κάνει τις γραμμές στήλες και έχουμε πάρει το μιγαδικό συζυγές, δηλαδή

$$\langle \psi_p | A^T | \psi_q \rangle = \langle \psi_q | A | \psi_p \rangle^*$$

Έτσι με αυτή την αναλογία ο ανάστροφος $\hat{A}^T$ ενός τελεστή $\hat{A}$ είναι ο τελεστής για τον οποίο έχουμε:

$$\langle \psi_p | \hat{A}^T | \psi_q \rangle = \langle \psi_q | \hat{A} | \psi_p \rangle^*$$

Η ιδιότητα αυτή έχει μία πολύ χρήσιμη γενίκευση, που θα μας φανεί χρήσιμη αρκετές φορές παρακάτω: για οποιεσδήποτε δύο καταστάσεις $|\phi\rangle, |\chi\rangle$ (όχι απαραίτητα στοιχεία κάποιας βάσης) ισχύει

$$\langle \phi | \hat{A} | \chi \rangle = \langle \hat{A}^T \phi | \chi \rangle.$$

Πράγματι, δουλεύοντας όπως και στην απόδειξη ότι οι Ερμιτιανοί πίνακες έχουν πραγματικές ιδιοτιμές, ας πάρουμε τον ανάστροφο της κατάστασης $\hat{A}^T |\phi\rangle$ (θυμηθείτε ότι το bra $\langle \phi|$ ενός ket $|\phi\rangle$ ορίζεται ακριβώς ως ο ανάστροφός του, $\langle \phi| = |\phi\rangle^T$). Χρησιμοποιώντας ότι ο ανάστροφος ενός γινομένου αντιστρέφει τη σειρά, παίρνουμε

$$\left(\hat{A}^T |\phi\rangle \right)^T = |\phi\rangle^T \left(\hat{A}^T \right)^T = \langle \phi | \hat{A},$$

αφού ο ανάστροφος του ανάστροφου μας επιστρέφει, όπως αναμένουμε, τον αρχικό τελεστή, $(\hat{A}^T)^T = \hat{A}$. Το αριστερό μέλος όμως δεν είναι τίποτα άλλο από το bra της κατάστασης $\hat{A}^T |\phi\rangle$, δηλαδή $\langle \hat{A}^T \phi|$, οπότε

$$\langle \hat{A}^T \phi | = \langle \phi | \hat{A}.$$

Εφαρμόζοντας και τις δύο πλευρές πάνω σε ένα $|\chi\rangle$ καταλήγουμε στη ζητούμενη σχέση $\langle \hat{A}^T \phi | \chi \rangle = \langle \phi | \hat{A} | \chi \rangle$. Ειδικότερα, όταν ο $\hat{A}$ είναι Ερμιτιανός έχουμε $\hat{A}^T = \hat{A}$, οπότε ο τελεστής μπορεί να «μετακινηθεί» από το ket στο bra ενός bracket χωρίς να αλλάξει,

$$\langle \phi | \hat{A} | \chi \rangle = \langle \hat{A} \phi | \chi \rangle \quad (\hat{A} \text{ Ερμιτιανός}).$$

Ένας κανονικός πίνακας A αντιμετατίθεται με τον ανάστροφο του, $A^T A = A A^T$. Κατ' επέκταση, ένας κανονικός τελεστής πληρεί παρόμοια ιδιότητα,

$$\hat{A}^T \hat{A} = \hat{A} \hat{A}^T$$

Ο αντίστροφος A^{-1} ενός πίνακα A είναι ο πίνακας για τον οποίο $A^{-1} A = I$, οπότε για οποιοδήποτε κυματοσυνάρτηση $|\psi\rangle$ όταν ο A^{-1} δράσει στο $A|\psi\rangle$ θα πάρουμε $A^{-1} A|\psi\rangle = I|\psi\rangle = |\psi\rangle$.

Εφόσον κάθε τελεστής που θα χρησιμοποιήσουμε περιγράφεται με έναν πίνακα A προκύπτει μία σημαντική ιδιότητα για τους τελεστές που χρησιμοποιούμε: είναι γραμμικοί. Πράγματι ας θεωρήσουμε ένα γραμμικό συνδυασμό κυματοσυναρτήσεων $|\psi_a\rangle$ και $|\psi_b\rangle$ που δεν είναι απαραίτητα στοιχεία βάσης αλλά οποιαδήποτε κυματοσυναρτήσεις.

$$|\psi\rangle = a|\psi_a\rangle + b|\psi_b\rangle$$

Τότε αν θεωρήσουμε ότι τα $|\psi\rangle$ και $|\psi_a\rangle, |\psi_b\rangle$ είναι διανύσματα στήλης, η δράση του πίνακα A θα γραφόταν ως εξής:

$$A|\psi\rangle = aA|\psi_a\rangle + bA|\psi_b\rangle$$

Οπότε και η δράση του αντίστοιχου τελεστή που περιγράφεται από τον πίνακα A θα έπρεπε να είναι:

$$\hat{A}|\psi\rangle = a\hat{A}|\psi_a\rangle + b\hat{A}|\psi_b\rangle$$

Η παραπάνω σχέση υποδεικνύει ότι η δράση του τελεστή $\hat{A}$ πάντα θα διατηρεί τους συντελεστές του γραμμικού στην έξοδο. Ως εκ τούτου ο τελεστής $\hat{A}$ θα είναι γραμμικός.

Με τον ίδιο τρόπο ορίζουμε τον αντίστροφο $\hat{A}^{-1}$ ενός τελεστή $\hat{A}$ να είναι ο τελεστής ο οποίος αν δράσει στη δράση $\hat{A}|\psi\rangle$ του $\hat{A}$ σε οποιαδήποτε κυματοσυνάρτηση $|\psi\rangle$ θα πάρουμε πάλι το $|\psi\rangle$,

$$\hat{A}^{-1}\hat{A}|\psi\rangle = |\psi\rangle$$

Ένας μοναδιαίος πίνακας U αντιστρέφεται από τον ανάστροφο του, $U^T U = I$, οπότε $U^{-1} = U^T$. Με τον ίδιο τρόπο ένας τελεστής θα είναι μοναδιαίος εάν αντιστρέφεται από τον ανάστροφο του:

$$\hat{U}^{-1} = \hat{U}^T$$

Ένας Ερμιτιανός πίνακας H είναι ένας πίνακας ο οποίος είναι ίσος με τον ανάστροφό του H^T . Ένας Ερμιτιανός τελεστής $\hat{H}$ θα πληρεί την ίδια ιδιότητα:

$$\hat{H}^T = \hat{H}$$

Με τρόπο ανάλογο με την περίπτωση των πινάκων, ορίζουμε τις ιδιοτιμές λ ενός τελεστή $\hat{A}$ ως τους αριθμούς που πληρούν την ιδιότητα

$$\hat{A}|\psi_\lambda\rangle = \lambda|\psi_\lambda\rangle$$

Κάθε $|\psi_\lambda\rangle$ που ορίζεται με αυτόν τον τρόπο ονομάζεται ιδιοδιάνυσμα του $\hat{A}$.

Αποτέλεσμα 1.11: Τελεστές, πίνακες και αλλαγή βάσης

Στην κβαντική υπολογιστική είναι προτιμότερο να σκεφτόμαστε τις διαδικασίες εξέλιξης ενός συστήματος και της κβαντικής μέτρησης με τη χρήση τελεστών και όχι πινάκων. Οι τελεστές είναι πιο θεμελιώδεις έννοιες επειδή δεν είναι απαραίτητο να χρησιμοποιείται κάποια ορθοκανονική βάση $|\psi_i\rangle$ ως αναφορά για την περιγραφή τους. Οι τελεστές που θα χρησιμοποιήσουμε θα είναι πάντα γραμμικοί, δηλαδή εάν $|\psi\rangle = a|\psi_a\rangle + b|\psi_b\rangle$ θα ισχύει:

$$\hat{A}|\psi\rangle = a\hat{A}|\psi_a\rangle + b\hat{A}|\psi_b\rangle$$

Ωστόσο εφόσον έχουμε επιλέξει κάποια βάση αναφοράς $|\psi_i\rangle$ τότε κάθε κβαντικός τελεστής που θα χρησιμοποιήσουμε $\hat{A}$ θα περιγράφεται από έναν μοναδιαίο πίνακα A αν περιγράφει την εξέλιξη ενός συστήματος ή έναν Ερμιτιανό πίνακα A αν περιγράφει την διαδικασία της μέτρησης. Οι τιμές των

στοιχείων του πίνακα A καθορίζονται από την σχέση:

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

Αν αλλάξουμε την βάση αναφοράς από $|\psi_i\rangle$ σε $|\phi_i\rangle$ τότε αλλάζει και ο πίνακας που περιγράφει τον τελεστή από A σε $\bar{A}$ και οι δύο πίνακες συνδέονται με μία σχέση της μορφής,

$$\bar{A} = R A R^T$$

όπου ο πίνακας r_{pq} έχει στοιχεία $r_{pq} = \langle \phi_p | \psi_q \rangle$. Οι τελεστές έχουν ιδιοδιανύσματα και ιδιοτιμές όπως και οι πίνακες. Το λ είναι ιδιοτιμή του $\hat{A}$ που αντιστοιχεί στο ιδιοδιάνυσμα $|\psi_\lambda\rangle$ εάν

$$\hat{A} |\psi_\lambda\rangle = \lambda |\psi_\lambda\rangle$$

Όπως σε ένα κανονικό πίνακα, τα ιδιοδιανύσματα του φτιάχνουν μία ορθοκανονική βάση, έτσι και τα ιδιοδιανύσματα του κανονικού τελεστή $\hat{A}$ φτιάχνουν και αυτά την αντίστοιχη ορθοκανονική βάση.

Μπορούμε όποτε μας βολεύει να παριστούμε τους τελεστές με πίνακες σε μία κατάλληλη ορθοκανονική βάση ή να προχωράμε απευθείας στους υπολογισμούς μας χωρίς να χρησιμοποιούμε την αναπαράσταση με πίνακα. Ας δούμε ένα παράδειγμα.

Παράδειγμα 1.12: Ιδιοτιμές του τελεστή της κβαντικής NOT

Ας υπολογίσουμε τις ιδιοτιμές του τελεστή $\hat{U}$ ο οποίος υλοποιεί την κβαντική NOT, δηλαδή όταν δρα σε μία κυματοσυνάρτηση $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ αντιστρέφει τους συντελεστές των $|0\rangle$ και $|1\rangle$:

$$\hat{U} |\psi\rangle = b|0\rangle + a|1\rangle$$

Για να είναι μία κυματοσυνάρτηση $|\psi\rangle$ ιδιοδιάνυσμα με ιδιοτιμή λ , θα πρέπει:

$$\hat{U} |\psi\rangle = \lambda |\psi\rangle$$

δηλαδή θα πρέπει να ισχύει:

$$b|0\rangle + a|1\rangle = \lambda a|0\rangle + \lambda b|1\rangle$$

Αν πολλαπλασιάσουμε αριστερά με $\langle 0|$ θα έχουμε:

$$b \langle 0|0\rangle + a \langle 1|0\rangle = \lambda a \langle 0|0\rangle + \lambda b \langle 1|0\rangle$$

οπότε εφόσον $\langle 0|0\rangle = 1$ και $\langle 1|0\rangle = 0$ οι συντελεστές του $|0\rangle$ στο δεξιό και το αριστερό μέρος θα πρέπει να είναι ίσοι:

$$b = \lambda a$$

Με τον ίδιο τρόπο αν πολλαπλασιάσουμε με $\langle 1|$ προκύπτει ότι οι συντελεστές του $|1\rangle$ θα πρέπει να είναι ίσοι:

$$a = \lambda b$$

Οπότε έχουμε:

$$a = \lambda b = \lambda^2 a$$

Το a δεν μπορεί να είναι μηδέν γιατί τότε και το $b = \lambda a$ θα ήταν μηδέν οπότε για την κυματοσυνάρτηση $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ οι πιθανότητες $|a|^2$ και $|b|^2$ θα άθροιζαν στο μηδέν και όχι στο ένα. Επομένως μπορούμε να διαιρέσουμε με a αμφότερα τα μέλη και να πάρουμε:

$$\lambda^2 = 1$$

οπότε οι ιδιοτιμές του $\hat{U}$ θα πρέπει να είναι $\lambda = \pm 1$.

Παράδειγμα 1.13: Ιδιοδιανύσματα του τελεστή της κβαντικής NOT

Ας υπολογίσουμε τα ιδιοδιανύσματα του τελεστή που περιγράφει την κβαντική πύλη NOT. Στο προηγούμενο παράδειγμα είδαμε ότι ο τελεστής αυτός έχει ιδιοτιμές τα $\lambda = \pm 1$.

Είδαμε ότι τα ιδιοδιανύσματα $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ έχουν την ιδιότητα $a = \lambda b$. Επίσης αν θέλουμε $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ τότε θα πρέπει $|a|^2 + |b|^2 = 1$ οπότε:

$$|a|^2 + \lambda^2 |a|^2 = 1$$

Εφόσον όμως $\lambda = \pm 1$ θα ισχύει $\lambda^2 = 1$ και βρίσκουμε επομένως μία συνθήκη που πρέπει να πληρεί το a ,

$$|a|^2 = \frac{1}{1 + \lambda^2} = \frac{1}{2}$$

Ας επιλέξουμε:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Τότε θα πρέπει $b = \lambda a$ όπως είδαμε στο προηγούμενο παράδειγμα, και επομένως:

$$b = \frac{\lambda}{\sqrt{2}} = \pm \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Τα ιδιοδιανύσματα $|\psi_1\rangle$ και $|\psi_{-1}\rangle$ για τις ιδιοτιμές $\lambda = 1$ και $\lambda = -1$ δίνονται από τις σχέσεις:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$$

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

Τα προηγούμενα δύο παραδείγματα δείχνουν πως οι ιδιότητες των τελεστών όπως οι ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα τους μπορούν να υπολογιστούν απευθείας χωρίς να χρησιμοποιούμε κάποια αναπαράσταση σε πίνακα. Πολλές φορές όμως η αναπαράσταση σε πίνακα δίνει πιο άμεσα αποτελέσματα.

1.26 Τελεστές Προβολών

Είδαμε πως το $|\psi\rangle\langle\psi|$ αντιστοιχεί σε ένα πίνακα που υπό μία έννοια πραγματοποιεί την προβολή κατά την διεύθυνση του $|\psi\rangle$. Θα μπορούσαμε να ορίσουμε έναν τελεστή $\hat{P}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ από τον οποίο προκύπτει ο πίνακας αυτός και του οποίου η δράση είναι ακριβώς η ίδια με του πίνακα:

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

Οι ιδιότητες των πινάκων προβολής μεταφέρονται και στους τελεστές προβολής. Για παράδειγμα αν θεωρήσουμε μία ορθοκανονική βάση $|\psi_i\rangle$ θα πρέπει όταν αθροίζουμε όλους τους τελεστές προβολής $|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ να παίρνουμε τον ταυτοτικό τελεστή $\hat{I}$. Ο ταυτοτικός τελεστής $\hat{I}$ είναι ένας τελεστής που όταν δρα σε οποιοδήποτε κυματοσυνάρτηση $|\psi\rangle$ μας δίνει πάλι την $|\psi\rangle$,

$$\hat{I} |\psi\rangle = |\psi\rangle$$

Έχουμε δηλαδή:

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

Παράδειγμα 1.14: Τελεστές προβολής των ιδιοδιανυσμάτων της κβαντικής NOT

Ας υπολογίσουμε τους τελεστές προβολής των ιδιοδιανυσμάτων $|\psi_1\rangle$ και $|\psi_{-1}\rangle$ που αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές $\lambda = 1$ και $\lambda = -1$ ενός τελεστή $\hat{U}$ που υλοποιεί την κβαντική NOT. Έχουμε:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle)$$

$$\langle\psi_1| = \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle 0| + \langle 1|)$$

Οπότε:

$$|\psi_1\rangle \langle\psi_1| = \frac{1}{2} (|0\rangle + |1\rangle) (\langle 0| + \langle 1|)$$

Κάνοντας τις πράξεις θα βρούμε:

$$(|0\rangle + |1\rangle) (\langle 0| + \langle 1|) = |0\rangle \langle 0| + |0\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 0| + |1\rangle \langle 1| = \hat{I} + |0\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 0|$$

Οπότε

$$\hat{P}_{\psi_1} = |\psi_1\rangle \langle\psi_1| = \frac{1}{2} (\hat{I} + |0\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 0|)$$

Με τον ίδιο τρόπο μπορούμε να δείξουμε ότι

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

Μην σας ξενίζει το $|0\rangle \langle 1|$ ή το $|1\rangle \langle 0|$. Ανάλογα όπως και στην περίπτωση του $|\psi\rangle \langle\psi|$, ο τελεστής $\hat{A} = |\phi\rangle \langle\psi|$ δρα με ακριβώς ανάλογο τρόπο σε μία κυματοσυνάρτηση $|\omega\rangle$:

$$\hat{A} |\omega\rangle = |\phi\rangle \langle\psi|\omega\rangle = \langle\psi|\omega\rangle |\phi\rangle$$

Δηλαδή προβάλλουμε το $|\omega\rangle$ στην διεύθυνση του $|\psi\rangle$ και του δίνουμε την διεύθυνση του $|\phi\rangle$.

Υπάρχει μία ενδιαφέρουσα ιδιότητα που συνδέει τους τελεστές προβολής $|\psi_i\rangle \langle\psi_i|$ μίας ορθοκανονικής βάσης $|\psi_i\rangle$ και τα στοιχεία του πίνακα που περιγράφει έναν τελεστή $\hat{A}$. Ας υποθέσουμε μία κυματοσυνάρτηση γράφεται ως εξής ως γραμμικός συνδυασμός των $|\psi_i\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N a_i |\psi_i\rangle$$

Η δράση του τελεστή $\hat{A}$ μπορεί να γραφτεί και ως εξής:

$$|\phi\rangle = \hat{A} |\psi\rangle = \sum_{i=1}^N a_i \hat{A} |\psi_i\rangle$$

Χρησιμοποιώντας την σχέση:

$$\sum_{q=1}^N |\psi_q\rangle \langle\psi_q| = \hat{I}$$

$$\hat{A} |\psi\rangle = \sum_{i=1}^N a_i \sum_{q=1}^N \langle\psi_q|\hat{A}|\psi_i\rangle |\psi_q\rangle$$

Όπως έχουμε πει και στα προηγούμενα τα στοιχεία του πίνακα $\mathbf{A}$ που περιγράφει τον $\hat{A}$ στην ορθοκανονική βάση $|\psi_i\rangle$ είναι $A_{qi} = \langle\psi_q|\hat{A}|\psi_i\rangle$ οπότε:

$$\hat{A} |\psi\rangle = \sum_{q=1}^N \sum_{i=1}^N A_{qi} a_i |\psi_q\rangle$$

Ας ορίσουμε τώρα έναν τελεστή $\hat{B}$ ο οποίος παράγεται από τα στοιχεία του $\mathbf{A}$ ως εξής:

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

Θα έχουμε:

$$\hat{B} |\psi\rangle = \sum_{p=1}^N \sum_{q=1}^N A_{qp} |\psi_q\rangle \langle \psi_p| \sum_{i=1}^N a_i |\psi_i\rangle$$

Αλλάζοντας λίγο την σειρά των αθροισμάτων θα έχουμε:

$$\hat{B} |\psi\rangle = \sum_{q=1}^N \sum_{i=1}^N \sum_{p=1}^N A_{qp} a_i |\psi_q\rangle \langle \psi_p| \psi_i\rangle$$

Όμως ας θυμηθούμε ότι τα $|\psi_i\rangle$ είναι ορθοκανονική βάση, οπότε $\langle \psi_p | \psi_i \rangle = 0$ όταν $i \neq p$ και $\langle \psi_p | \psi_i \rangle = 1$ όταν $i = p$. Επομένως το παραπάνω τριπλό άθροισμα είναι επί της ουσίας:

$$\hat{B} |\psi\rangle = \sum_{q=1}^N \sum_{i=1}^N A_{qi} a_i |\psi_q\rangle$$

Βλέπουμε επομένως ότι ο $\hat{A}$ και ο $\hat{B}$ έχουν ακριβώς την ίδια δράση σε οποιοδήποτε κυματοσυνάρτηση $|\psi\rangle$ και ως εκ τούτου πρέπει να ταυτίζονται:

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

Η παραπάνω σχέση εκφράζει έναν τελεστή $\hat{A}$ βάσει των στοιχείων A_{pq} ου πίνακα $\mathbf{A}$ που τον περιγράφει στην ορθοκανονική βάση $|\psi_i\rangle$.

1.27 Διαγωνιοποίηση τελεστών

Αν υποθέσουμε ότι ένας τελεστής $\hat{A}$ περιγράφεται από τον κανονικό πίνακα $\mathbf{A}$ στην ορθοκανονική βάση $|\psi_i\rangle$ τότε το γεγονός ότι ο $\mathbf{A}$ διαγωνιοποιείται, μας οδηγεί σε μία πιο απλή αναπαράσταση του τελεστή. Ας θυμηθούμε ότι το γεγονός ότι πίνακας $\mathbf{A}$ διαγωνιοποιείται σημαίνει ότι υπάρχει ένας διαγώνιος πίνακας $\mathbf{\Lambda}$ που περιέχει τα ιδιοδιανύσματα του $\mathbf{A}$ στην κύρια διαγώνιο του και ένας μοναδιαίος πίνακας $\mathbf{V}$ που περιέχει ως στήλες ιδιοδιανύσματα του $\mathbf{A}$ που είναι και ορθοκανονική βάση τέτοια ώστε,

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

Ας θυμηθούμε επίσης ότι ο πίνακας $\mathbf{A}$ δεν είναι ο μοναδικός πίνακας που περιγράφει το $\hat{A}$. Κάθε πίνακας της μορφής $\mathbf{R} \mathbf{A} \mathbf{R}^T$ μπορεί εξίσου να περιγράψει τον $\hat{A}$ σε μία ορθοκανονική βάση $|\phi_i\rangle = \mathbf{R}^T |\psi_i\rangle$. Ας θέσουμε $\mathbf{R} = \mathbf{V}$. Τότε:

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

Όπως είπαμε και πριν, η βάση καθορίζεται από την σχέση:

$$|\phi_i\rangle = \mathbf{R}^T |\psi_i\rangle = \mathbf{V}^T |\psi_i\rangle$$

Χρησιμοποιώντας τα στοιχεία Λ_{pq} του πίνακα $\mathbf{\Lambda}$ και την βάση $|\phi_i\rangle$ προκύπτει ότι ο τελεστής $\hat{A}$ μπορεί να γραφτεί ως εξής:

$$\hat{A} = \sum_{q=1}^N \sum_{p=1}^N \Lambda_{qp} |\phi_q\rangle \langle \phi_p|$$

Ωστόσο ας θυμηθούμε ότι ο πίνακας Λ είναι διαγώνιος, δηλαδή $\Lambda_{qp} = 0$ για $q \neq p$. Επίσης τα στοιχεία της κυρίας διαγωνίου είναι ίσα με τις ιδιοτιμές του τελεστή, $\Lambda_{qq} = \lambda_q$. Οπότε:

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

Η παραπάνω σχέση προκύπτει από την διαγωνιοποίηση του πίνακα $\mathbf{A}$ που περιγράφει τον τελεστή $\hat{A}$ και ως εκ τούτου συχνά αποκαλείται η *διαγωνιοποιημένη μορφή* του $\hat{A}$.

Παράδειγμα 1.15: Ο τελεστής $\hat{X}$ ως άθροισμα προβολών

Ας προσπαθήσουμε να γράψουμε τον τελεστή $\hat{X}$ που πραγματοποιεί την κβαντική πύλη NOT με την μορφή αθροίσματος προβολών α) στην βάση $|0\rangle$ και $|1\rangle$, β) στη βάση που προκύπτει από την διαγωνιοποίηση του τελεστή.

Αρχικά θυμίζουμε ότι εάν έχουμε μία κατάσταση: $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$, η πύλη NOT πραγματοποιεί το μετασχηματισμό

$$\hat{X}|\psi\rangle = b|0\rangle + a|1\rangle$$

Οπότε τα στοιχεία X_{pq} του πίνακα $\mathbf{X}$ που περιγράφει τον τελεστή στην βάση $|\psi_1\rangle = |0\rangle$ και $|\psi_2\rangle = |1\rangle$ έχουν ως εξής:

$$X_{pq} = \langle \psi_p | \hat{X} | \psi_q \rangle$$

Αντικαθιστώντας έχουμε:

$$X_{11} = \langle \psi_1 | \hat{X} | \psi_1 \rangle = \langle 0 | 1 \rangle = 0$$

$$X_{12} = \langle \psi_1 | \hat{X} | \psi_2 \rangle = \langle 0 | 0 \rangle = 1$$

$$X_{21} = \langle \psi_2 | \hat{X} | \psi_1 \rangle = \langle 1 | 1 \rangle = 1$$

$$X_{22} = \langle \psi_2 | \hat{X} | \psi_2 \rangle = \langle 1 | 0 \rangle = 0$$

Ο πίνακας που περιγράφει την πύλη είναι (όπως είχαμε δει και σε προηγούμενο παράδειγμα):

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

Από την παραπάνω σχέση προκύπτει εύκολα η αναπαράσταση του τελεστή στη βάση $|\psi_1\rangle = |0\rangle$ και $|\psi_2\rangle = |1\rangle$. Εφόσον στην βάση αυτή ξέρουμε τον πίνακα $\mathbf{X}$ η αναπαράσταση έχει ως εξής:

$$\hat{X} = \sum_{q=1}^2 \sum_{p=1}^2 X_{qp} |\psi_q\rangle \langle \psi_p| = |\psi_1\rangle \langle \psi_2| + |\psi_2\rangle \langle \psi_1| = |0\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 0|$$

Οι ιδιοτιμές του πίνακα $\mathbf{X}$ και επομένως και του τελεστή $\hat{X}$ προκύπτουν λύνοντας την εξίσωση $\det(\mathbf{X} - \lambda \mathbf{I}) = 0$. Έχουμε:

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

Καταλήγουμε ότι οι ιδιοτιμές του $\hat{X}$ πρέπει να είναι οι $\lambda_1 = 1$ και $\lambda_2 = -1$ όπως είχαμε βρει και σε προηγούμενο παράδειγμα που δεν είχαμε χρησιμοποιήσει καθόλου την αναπαράσταση του $\hat{X}$ σε πίνακα.

Έχει μία αξία να βρούμε και με αυτή τη μέθοδο τα ιδιοδιανύσματα $|\phi_1\rangle = a_1|0\rangle + b_1|1\rangle$ και $|\phi_2\rangle = a_2|0\rangle + b_2|1\rangle$. Έχουμε:

$$\mathbf{X} |\phi_i\rangle = \lambda_i |\phi_i\rangle$$

οπότε:

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_i \\ b_i \end{bmatrix} = \lambda_i \begin{bmatrix} a_i \\ b_i \end{bmatrix}$$

Στις παραπάνω σχέσεις ο δείκτης i παίρνει τις τιμές 1, 2. Βρίσκουμε ότι:

$$a_i = \lambda_i b_i$$

$$b_i = \lambda_i a_i$$

Από τις παραπάνω σχέσεις εύκολα προκύπτει ότι $a_i = \lambda_i^2 a_i$ και $b_i = \lambda_i^2 b_i$. Εφόσον $\lambda_i = \pm 1$ έπεται ότι $\lambda_i^2 = 1$ και ως εκ τούτου μπορούμε να επιλέξουμε αυθαίρετα τον συντελεστή a_i και να θέσουμε $b_i = \lambda_i a_i$. Σε κάθε όμως περίπτωση θα πρέπει να εξασφαλίζουμε ότι $|a_i|^2 + |b_i|^2 = 1$. Επιλέγουμε $a_i = 1/\sqrt{2}$ οπότε $b_i = \lambda_i/\sqrt{2}$ και εύκολα προκύπτει ότι $|a_i|^2 + |b_i|^2 = 1$. Βάσει αυτής της επιλογής τα ιδιοδιανύσματα για αυτή την επιλογή των συντελεστών είναι για την ιδιοτιμή $\lambda_1 = 1$:

$$|\phi_1\rangle = a_1 |0\rangle + b_1 |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle$$

$$|\phi_2\rangle = a_2 |0\rangle + b_2 |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle$$

Σύμφωνα με τα όσα είχαμε δει στην ενότητα αυτή, η διαγωνιοποίηση του $\hat{X}$ επιτρέπει να γράψουμε:

$$\hat{X} = \sum_{i=1}^N \lambda_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| = |\phi_1\rangle \langle \phi_1| - |\phi_2\rangle \langle \phi_2|$$

Μπορούμε να επαληθεύσουμε ότι οι δύο αναπαράστασεις ταυτίζονται. Έχουμε:

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

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

Αφαιρώντας την πρώτη από την δεύτερη εξίσωση έχουμε:

$$|\phi_1\rangle \langle \phi_1| - |\phi_2\rangle \langle \phi_2| = |0\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 0|$$

Δηλαδή καταλήξαμε στην ίδια έκφραση που πήραμε για την αναπαράσταση του $\hat{X}$ απευθείας από τα στοιχεία του πίνακα $\mathbf{X}$,

$$\hat{X} = |\phi_1\rangle \langle \phi_1| - |\phi_2\rangle \langle \phi_2| = |0\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 0|$$

1.28 Συναρτήσεις τελεστών

Είναι ενδιαφέρον να δούμε πως η διαγωνιοποίηση ενός τελεστή $\hat{A}$ μας δίνει έναν εύκολο τρόπο να υπολογίσουμε τους τελεστές που προκύπτουν ως συνάρτηση από άλλους τελεστές. Έστω για παράδειγμα ότι $\hat{B} = f(\hat{A})$ όπου η συνάρτηση f περιγράφει πως μετασχηματίζουμε τον τελεστή $\hat{A}$ για να πάρουμε τον τελεστή $\hat{B}$. Η f θα μπορούσε να προκύπτει από μία απλή συνάρτηση πραγματικών αριθμών, για παράδειγμα αν θεωρήσουμε την $f(x) = x^2$ τότε θα μπορούσαμε να ορίσουμε την f στην περίπτωση των τελεστών $f(\hat{A}) = \hat{A}^2$. Η συγκεκριμένη f σημαίνει ότι εφαρμόζουμε τον $\hat{A}$ στο αποτέλεσμα του $\hat{A}$,

$$\hat{B}|\psi\rangle = f(\hat{A})|\psi\rangle = \hat{A}^2|\psi\rangle = \hat{A}(\hat{A}|\psi\rangle)$$

Για αυτή την επιλογή της f είναι προφανές πως μεταφέρουμε την f όταν την ορίζουμε στο πεδίο των πραγματικών αριθμών στην περίπτωση των τελεστών. Τι γίνεται όμως όταν η $f(x)$ είναι πιο πολύπλοκη; για παράδειγμα εάν $f(x) = e^x$ τι ακριβώς σημαίνει $f(\hat{A}) = e^{\hat{A}}$; Πως υπολογίζουμε το εκθετικό ενός τελεστή;

Στην περίπτωση όπου η f αναπτύσσεται σε σειρά Taylor για τους πραγματικούς αριθμούς, μπορούμε να κάνουμε την γενίκευση ως εξής: Ξεκινάμε από την σειρά Taylor της $f(x)$,

$$f(x) = f(0) + f'(0)x + \frac{f''(0)}{2!}x^2 + \dots$$

Η σειρά έχει άπειρους όρους και γράφεται και με τον εξής συμβολισμό:

$$f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{f^{(i)}(0)}{i!} x^i$$

όπου $f^{(i)}(x)$ είναι η i παράγωγος της $f(x)$ και για $i = 0$ ορίζουμε απλά $f^{(0)}(x) = f(x)$. Στην περίπτωση του εκθετικού e^x οι παράγωγοι είναι πάλι ίσες με e^x οπότε έχουμε $f^{(i)}(0) = e^0 = 1$ και:

$$e^x = 1 + x + \frac{1}{2!}x^2 + \cdots = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{x^i}{i!}$$

Θα μπορούσαμε να ορίσουμε τον τελεστή $\hat{B} = e^{\hat{A}}$ ως εξής:

$$\hat{B} = e^{\hat{A}} = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^i}{i!}$$

Η δράση $\hat{B}|\psi\rangle$ του τελεστή προκύπτει θεωρώντας την δράση του $\hat{A}^i|\psi\rangle$, διαιρώντας το αποτέλεσμα με $i!$ και αθροίζοντας τα αποτελέσματα για όλα τα i .

Γενικότερα θα μπορούσαμε να χρησιμοποιήσουμε το ανάπτυγμα Taylor για να υπολογίσουμε οποιαδήποτε συνάρτηση τελεστών,

$$\hat{B} = f(\hat{A}) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{f^{(i)}(0)}{i!} \hat{A}^i$$

Θα δείξουμε τώρα ότι η διαγωνιοποίηση μας παρέχει έναν εύκολο τρόπο για τον υπολογισμό των συναρτήσεων των πινάκων. Αν γράψουμε τον $\hat{A}$ σε διαγωνιοποιημένη μορφή,

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

όπου λ_i οι ιδιοτιμές του $\hat{A}$ και $|\psi_i\rangle$ τα ιδιοδιανύσματα, τότε μπορούμε να δείξουμε ότι:

$$\begin{aligned} \hat{A}^2 &= \sum_{i=1}^N \lambda_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \sum_{k=1}^N \lambda_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \\ \hat{A}^2 &= \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^N \lambda_i \lambda_k |\psi_i\rangle \langle \psi_i | \psi_k \rangle \langle \psi_k| \end{aligned}$$

Όπως και πολλές φορές στα προηγούμενα χρησιμοποιούμε το ότι $\langle \psi_i | \psi_k \rangle = 0$ όταν $i \neq k$ και $\langle \psi_i | \psi_k \rangle = 1$ όταν $i = k$ για να απαλείψουμε το ένα άθροισμα,

$$\hat{A}^2 = \sum_{i=1}^N \lambda_i^2 |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$$

Με τον ίδιο τρόπο μπορούμε να δείξουμε ότι όταν υπολογίζουμε την $n^{\text{οστή}}$ δύναμη $\hat{A}^n$ του $\hat{A}$ τότε στην διαγωνιοποιημένη μορφή απλά χρησιμοποιούμε τις $n^{\text{οστές}}$ δυνάμεις των ιδιοτιμών,

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

Θα χρησιμοποιήσουμε τώρα αυτή τη σχέση σε συνδυασμό με την σειρά Taylor για να δείξουμε ότι ο υπολογισμός της συνάρτησης ενός τελεστή που διαγωνιοποιείται, ισοδυναμεί με τον υπολογισμό της συνάρτησης στις ιδιοτιμές του τελεστή.

$$f(\hat{A}) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{f^{(i)}(0)}{i!} \hat{A}^i = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{f^{(i)}(0)}{i!} \sum_{q=1}^N \lambda_q^i |\psi_q\rangle \langle \psi_q| = \sum_{q=1}^N \left(\sum_{i=0}^{\infty} \frac{f^{(i)}(0)}{i!} \lambda_q^i \right) |\psi_q\rangle \langle \psi_q|$$

Το εσωτερικό άθροισμα όμως είναι η σειρά Taylor της συνάρτησης f υπολογισμένη στο εκάστοτε λ_q ,

$$f(\lambda_q) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{f^{(i)}(0)}{i!} \lambda_q^i$$

Η έκφραση για το $f(\hat{A})$ γράφεται ως εξής:

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

Αποτέλεσμα 1.12: Συναρτήσεις τελεστή μέσω διαγωνιοποίησης

Για έναν τελεστή $\hat{A}$ ο οποίος διαγωνιοποιείται ως εξής

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

όπου λ_q είναι οι ιδιοτιμές του $\hat{A}$ και ψ_q μία βάση που φτιάχνεται από τα ιδιοδιανύσματα του, τότε ο πιο απλός τρόπος να υπολογίσουμε μία συνάρτηση του τελεστή $f(\hat{A})$ όπου η $f(x)$ είναι μία συνάρτηση που ορίζεται για τους μιγαδικούς αριθμούς είναι να εφαρμόσουμε την f στις ιδιοτιμές του $\hat{A}$ και να χρησιμοποιήσουμε ένα παρόμοιο ανάπτυγμα,

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

Παράδειγμα 1.16: Υπολογισμός του $e^{j\alpha\hat{X}}$

Ας υπολογίσουμε τον τελεστή $\hat{B} = \exp(j\alpha\hat{X})$ όπου $\hat{X}$ ο τελεστής που υλοποιεί την κβαντική NOT και α μία πραγματική σταθερά.

Έχουμε δει στα προηγούμενα παραδείγματα ότι οι ιδιοτιμές του $\hat{X}$ είναι οι $\lambda_1 = 1$ και $\lambda_2 = -1$ ενώ τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα είναι τα

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

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

Στην περίπτωση μας, $f(x) = e^{j\alpha x}$ οπότε ξεκινώντας από το ανάπτυγμα:

$$\hat{X} = 1 \cdot |\phi_1\rangle \langle \phi_1| + (-1) \cdot |\phi_2\rangle \langle \phi_2|$$

θα έχουμε:

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

Η παραπάνω σχέση μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να υπολογίσουμε τον τελεστή $\hat{B} = e^{j\alpha\hat{X}}$ πάνω σε οποιαδήποτε κυματοσυνάρτηση: $|\psi\rangle$,

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

Παράδειγμα 1.17: Εφαρμογή του $e^{j\pi/4 \hat{X}}$ σε μία κατάσταση

Ας υπολογίσουμε το αποτέλεσμα της δράσης του τελεστή $e^{j\pi/4 \hat{X}}$ στη κυματοσυνάρτηση

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle - \frac{j}{\sqrt{2}} |1\rangle$$

Από το προηγούμενο παράδειγμα είδαμε ότι για $f = e^{j\alpha \hat{X}}$ έχουμε

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

όπου

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

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

ενώ στην περίπτωση μας $\alpha = \pi/4$. Για να υπολογίσουμε το αποτέλεσμα της $e^{j\pi/4 \hat{X}}$ στο $|\psi\rangle$ έχουμε:

$$f(\hat{X}) |\psi\rangle = e^{j\pi/4} |\phi_1\rangle \langle \phi_1|\psi\rangle + e^{-j\pi/4} |\phi_2\rangle \langle \phi_2|\psi\rangle$$

Υπολογίζουμε τα εσωτερικά γινόμενα:

$$\langle \phi_1|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{j}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{1-j}{2}$$

$$\langle \phi_2|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{j}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{1+j}{2}$$

Επομένως:

$$f(\hat{X}) |\psi\rangle = e^{j\pi/4} \frac{1-j}{2} |\phi_1\rangle + e^{-j\pi/4} \frac{1+j}{2} |\phi_2\rangle$$

Αν λάβουμε υπόψη μας ότι $e^{j\pi/4} = \cos(\pi/4) + j \sin(\pi/4)$ προκύπτει ότι $e^{j\pi/4} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1+j)$. Οπότε:

$$e^{j\pi/4} \frac{1-j}{2} = \frac{1+j}{\sqrt{2}} \frac{1-j}{2} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$e^{-j\pi/4} \frac{1+j}{2} = \frac{1-j}{\sqrt{2}} \frac{1+j}{2} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Τελικά:

$$f(\hat{X}) |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\phi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |\phi_2\rangle = |0\rangle$$

1.29 Συναρτήσεις πινάκων

Είναι ενδιαφέρον ότι ακριβώς με τον ίδιο τρόπο μπορούμε να ορίσουμε τις συναρτήσεις πινάκων. Αν ο πίνακας A διαγωνιοποιείται ως:

$$A = V^T \Lambda V$$

τότε

$$A^2 = V^T \Lambda V V^T \Lambda V$$

Επειδή όμως ο V είναι μοναδιαίος θα έχουμε $V V^T = I$, οπότε:

$$A^2 = V^T \Lambda \Lambda V = V^T \Lambda^2 V$$

Ο πίνακας $\mathbf{\Lambda}$ είναι διαγώνιος και περιέχει στην κύρια διαγώνιο του τις ιδιοτιμές του $\mathbf{A}$,

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_N \end{bmatrix}$$

Είναι εύκολο να δούμε ότι:

$$\mathbf{\Lambda}^2 = \begin{bmatrix} \lambda_1^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_N^2 \end{bmatrix}$$

Οπότε στην περίπτωση όπου ο $\mathbf{A}$ διαγωνιοποιείται, για να υπολογίσουμε τον $\mathbf{A}^2$ απλά υπολογίζουμε τα τετράγωνα των ιδιοτιμών του από τα οποία προκύπτει ο πίνακας $\mathbf{\Lambda}^2$. Ο $\mathbf{A}^2$ υπολογίζεται χρησιμοποιώντας την σχέση $\mathbf{A}^2 = \mathbf{V}^T \mathbf{\Lambda}^2 \mathbf{V}$.

Γενικότερα ο πίνακας $\mathbf{\Lambda}^n$ υπολογίζεται από τις $n^{\text{οστές}}$ δυνάμεις των ιδιοτιμών,

$$\mathbf{\Lambda}^n = \begin{bmatrix} \lambda_1^n & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2^n & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_N^n \end{bmatrix}$$

ενώ είναι εύκολο να δείξουμε ότι:

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

Όπως και στην περίπτωση των τελεστών το επόμενο βήμα είναι να υπολογίσουμε μία συνάρτηση $f(\mathbf{A})$ που είναι ορισμένη στους πραγματικούς αριθμούς και αναπτύσσεται σε σειρά Taylor,

$$f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{f^{(i)}(0)}{i!} x^i$$

Εύκολα μπορούμε να δούμε ότι:

$$f(\mathbf{A}) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{f^{(i)}(0)}{i!} \mathbf{A}^i$$

οπότε:

$$f(\mathbf{A}) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{f^{(i)}(0)}{i!} \mathbf{V}^T \mathbf{\Lambda}^i \mathbf{V} = \mathbf{V}^T \left(\sum_{i=0}^{\infty} \frac{f^{(i)}(0)}{i!} \mathbf{\Lambda}^i \right) \mathbf{V}$$

Εύκολα βλέπουμε ότι:

$$f(\mathbf{\Lambda}) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{f^{(i)}(0)}{i!} \mathbf{\Lambda}^i = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{f^{(i)}(0)}{i!} \begin{bmatrix} \lambda_1^i & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2^i & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_N^i \end{bmatrix}$$

Παρατηρούμε ότι κάθε στοιχείο της διαγωνίου του πίνακα λ_μ υψώνεται σε όλες τις δυνάμεις i , πολλαπλασιάζεται με τους συντελεστές $f^{(i)}(0)/i!$ και στη συνέχεια όλοι οι όροι αθροίζονται κάτι που θα μας δώσει την συνάρτηση f υπολογισμένη στο λ_μ ,

$$\sum_{i=0}^{\infty} \frac{f^{(i)}(0)}{i!} \lambda_\mu^i = f(\lambda_\mu)$$

Τελικά

$$f(\mathbf{\Lambda}) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{f^{(i)}(0)}{i!} \mathbf{\Lambda}^i = \begin{bmatrix} f(\lambda_1) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & f(\lambda_2) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & f(\lambda_N) \end{bmatrix}$$

Αποτέλεσμα 1.13: Συναρτήσεις πίνακα μέσω διαγωνιοποίησης

Έστω ότι ο πίνακας $\mathbf{A}$ διαγωνιοποιείται ως εξής:

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

Τότε για οποιαδήποτε συνάρτηση $f(x)$ που ορίζεται για τους πραγματικούς αριθμούς και αναπτύσσεται σε σειρά Taylor μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την παρακάτω σχέση για να υπολογίσουμε το $f(\mathbf{A})$,

$$f(\mathbf{A}) = \mathbf{V} f(\mathbf{\Lambda}) \mathbf{V}^T$$

όπου το $f(\mathbf{\Lambda})$ προκύπτει από την εφαρμογή της f στα διαγώνια στοιχεία του $\mathbf{\Lambda}$,

$$f(\mathbf{\Lambda}) = \begin{bmatrix} f(\lambda_1) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & f(\lambda_2) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & f(\lambda_N) \end{bmatrix}$$

Παράδειγμα 1.18: Η συνάρτηση $f(\mathbf{X}) = e^{j\alpha \mathbf{X}}$

Στην περίπτωση του πίνακα:

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

ας υπολογίσουμε το $f(\mathbf{X})$ όταν $f(x) = e^{j\alpha x}$.

Καταρχήν πρέπει να διαγωνιοποιήσουμε τον $\mathbf{X}$. Για το σκοπό αυτό βρίσκουμε τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα του. Οι ιδιοτιμές υπολογίζονται λύνοντας την εξίσωση:

$$\det(\mathbf{X} - \lambda \mathbf{I}) = 0$$

Έχουμε:

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

Οπότε οι ιδιοτιμές του $\mathbf{X}$ είναι οι $\lambda_1 = 1$ και $\lambda_2 = -1$. Για να βρούμε το ιδιοδιάνυσμα $|\psi_i\rangle = a_i |0\rangle + b_i |1\rangle$ που αντιστοιχούν στην ιδιοτιμή λ_i , θα πρέπει να λύσουμε την εξίσωση:

$$\mathbf{X} |\psi_i\rangle = \lambda_i |\psi_i\rangle$$

Η παραπάνω σχέση μας δίνει:

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_i \\ b_i \end{bmatrix} = \lambda_i \begin{bmatrix} a_i \\ b_i \end{bmatrix}$$

οπότε

$$a_i = \lambda_i b_i$$

$$b_i = \lambda_i a_i$$

Όπως και στα προηγούμενα επομένως προκύπτει ότι $a_i = \lambda_i^2 a_i$ και επομένως για να έχουμε λύση θα πρέπει $\lambda_i^2 = 1$ οπότε $\lambda_1 = 1$ και $\lambda_2 = -1$. Αν επιλέξουμε $a_i = 1/\sqrt{2}$ τότε $b_i = \lambda_i/\sqrt{2}$ οπότε $a_1 = b_1$ και $a_2 = -b_2$ και τα ιδιοδιανύσματα προκύπτουν ως εξής:

$$|\psi_1\rangle = a_1 |0\rangle + b_1 |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$|\psi_2\rangle = a_2 |0\rangle + b_2 |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

Ο πίνακας $\mathbf{V}$ έχει ως στήλες τα ιδιοδιανύσματα του $\mathbf{X}$ και ως εκ τούτου:

$$\mathbf{V} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

ενώ ο $\mathbf{\Lambda}$ είναι διαγώνιος με στοιχεία τις αντίστοιχες ιδιοτιμές

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Εφαρμόζοντας τώρα την συνάρτηση $f(x) = e^{j\alpha x}$ στα στοιχεία της διαγωνίου θα έχουμε:

$$f(\mathbf{\Lambda}) = \begin{bmatrix} e^{j\alpha\lambda_1} & 0 \\ 0 & e^{j\alpha\lambda_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{j\alpha} & 0 \\ 0 & e^{-j\alpha} \end{bmatrix}$$

Οπότε:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{A}) &= \mathbf{V} f(\mathbf{\Lambda}) \mathbf{V}^T = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{j\alpha} & 0 \\ 0 & e^{-j\alpha} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} = \\ &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} e^{j\alpha} & e^{-j\alpha} \\ e^{j\alpha} & -e^{-j\alpha} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} e^{j\alpha} + e^{-j\alpha} & e^{j\alpha} - e^{-j\alpha} \\ e^{j\alpha} - e^{-j\alpha} & e^{j\alpha} + e^{-j\alpha} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \alpha & j \sin \alpha \\ j \sin \alpha & \cos \alpha \end{bmatrix} \end{aligned}$$

όπου έχουμε χρησιμοποιήσει το γεγονός $e^{j\alpha} = \cos \alpha + j \sin \alpha$, οπότε $\cos \alpha = \frac{1}{2}(e^{j\alpha} + e^{-j\alpha})$ και $\sin \alpha = \frac{1}{2j}(e^{j\alpha} - e^{-j\alpha})$.

1.30 Τελεστές που αντιστοιχούν στους πίνακες Pauli $\mathbf{X}$, $\mathbf{Y}$, $\mathbf{Z}$

Ο τελεστής $\hat{X}$ που πραγματοποιεί την κβαντική NOT είδαμε ότι στη βάση $|0\rangle$ και $|1\rangle$ περιγράφεται από τον πίνακα

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

τον λεγόμενο πίνακα Pauli $\mathbf{X}$. Με τον ίδιο τρόπο ορίζουμε τους τελεστές $\hat{Y}$ και $\hat{Z}$ που πραγματοποιούν τη δράση που περιγράφεται από τους πίνακες Pauli $\mathbf{Y}$ και $\mathbf{Z}$ στη βάση $|0\rangle$ και $|1\rangle$. Εφόσον

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} 0 & -j \\ j & 0 \end{bmatrix}$$

βλέπουμε ότι εάν $|\psi\rangle = a |0\rangle + b |1\rangle$, ο τελεστής $\hat{Y}$ δρα ως εξής:

$$\hat{Y} |\psi\rangle = -jb |0\rangle + ja |1\rangle$$

Με τον ίδιο τρόπο εφόσον:

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

βλέπουμε ότι

$$\hat{Z}|\psi\rangle = a|0\rangle - b|1\rangle$$

Μπορούμε να δείξουμε ότι

$$\hat{X}^2|\psi\rangle = \hat{X}\hat{X}|\psi\rangle = \hat{X}\hat{X}(a|0\rangle + b|1\rangle) = \hat{X}(b|0\rangle + a|1\rangle) = a|0\rangle + b|1\rangle = |\psi\rangle$$

επομένως:

$$\hat{X}^2 = \hat{X}\hat{X} = \hat{I}$$

όπου ο $\hat{I}$ είναι ο ταυτοτικός τελεστής. Η παραπάνω σχέση σημαίνει ότι η κβαντική NOT αντιστρέφεται από τον εαυτό της. Με τον ίδιο τρόπο μπορούμε να δείξουμε ότι

$$\hat{Y}^2 = \hat{Z}^2 = \hat{I}$$

Δηλαδή αν σκεφτούμε ότι όπως και ο $\hat{X}$ έτσι και τα $\hat{Y}$ και $\hat{Z}$ πραγματοποιούν βασικούς μετασχηματισμούς σε ένα qubit $|\psi\rangle$, οπότε αποτελούν βασικές κβαντικές πύλες ενός qubit, τότε αντιστρέφουν τον εαυτό τους. Προφανώς αυτή η ιδιότητα προκύπτει και από τους πίνακες που περιγράφουν τις πύλες. Για παράδειγμα

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

Με τον ίδιο τρόπο δείχνουμε ότι:

$$\mathbf{Y}^2 = \mathbf{Z}^2 = \mathbf{I}$$

Μπορούμε να ορίσουμε έναν

1.31 Τελεστές προβολών και πιθανότητες μέτρησης

Μία χρήση που έχουν οι τελεστές προβολών είναι στον υπολογισμό των πιθανοτήτων των αποτελεσμάτων της μέτρησης. Για παράδειγμα αν υποθέσουμε ότι έχουμε ένα qubit που αποθηκεύεται στο spin ενός ηλεκτρονίου έτσι ώστε το $|0\rangle$ να αντιστοιχεί στο ιδιοδιάνυσμα $|-z\rangle$ (δηλαδή να έχουμε spin $-\frac{\hbar}{2}$ στον άξονα των z) και το $|1\rangle$ να αντιστοιχεί στο ιδιοδιάνυσμα $|+z\rangle$ (δηλαδή να έχουμε spin $+\frac{\hbar}{2}$ στον άξονα των z) τότε στην κατάσταση υπέρθεσης $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ η πιθανότητα να μετρήσουμε το $|0\rangle$ θα είναι $|a|^2$ και το $|1\rangle$ θα είναι $|b|^2$.

Οι πιθανότητες αυτές μπορούν να εκφραστούν με την βοήθεια των τελεστών προβολών. Για παράδειγμα μπορούμε να δείξουμε ότι:

$$|a|^2 = a^*a = \langle 0|\psi\rangle \langle \psi|0\rangle = \langle 0|(|\psi\rangle \langle \psi|)|0\rangle$$

Δηλαδή η πιθανότητα $|a|^2$ το αποτέλεσμα την μέτρησης να μας φέρει στην κατάσταση $|0\rangle$, υπολογίζεται πολλαπλασιάζοντας τον τελεστή $|\psi\rangle \langle \psi|$ αριστερά και δεξιά με $\langle 0|$ και $|0\rangle$ αντίστοιχα.

Εναλλακτικά βέβαια θα μπορούσαμε να γράψουμε:

$$|a|^2 = a^*a = \langle \psi|0\rangle \langle 0|\psi\rangle = \langle \psi|(|0\rangle \langle 0|)|\psi\rangle$$

Δηλαδή η πιθανότητα $|a|^2$ το αποτέλεσμα την μέτρησης να μας φέρει στην κατάσταση $|0\rangle$, μπορεί επίσης να υπολογιστεί πολλαπλασιάζοντας τον πίνακα $|0\rangle \langle 0|$ αριστερά και δεξιά με $\langle \psi|$ και $|\psi\rangle$ αντίστοιχα.

Γενικότερα είναι σχετικά εύκολο να δείξουμε ότι εάν η κυματοσυνάρτηση $|\psi\rangle$ γραφτεί ως γραμμικός συνδυασμός των ιδιοδιανυσμάτων ενός Ερμιτιανού πίνακα $\mathbf{H}$ που περιγράφει το μέγεθος που θέλουμε να μετρήσουμε,

$$|\psi\rangle = \sum_i a_i |\psi_i\rangle$$

τότε είναι εύκολο να δείξουμε ότι

$$a_i = \langle \psi_i|\psi\rangle$$

Η πιθανότητα με την μέτρηση να καταλήξουμε στην κατάσταση $|\psi_i\rangle$ είναι κατ' αναλογία με την περίπτωση του qubit, $|a_i|^2$. Οπότε μπορούμε να γράψουμε:

$$|a_i|^2 = |\langle\psi_i|\psi\rangle|^2 = \langle\psi|\psi_i\rangle \langle\psi_i|\psi\rangle$$

Οπότε η πιθανότητα εμφάνισης του $|\psi_i\rangle$ υπολογίζεται πολλαπλασιάζοντας τον πίνακα προβολής $|\psi_i\rangle \langle\psi_i|$ αριστερά και δεξιά με $\langle\psi|$ και $|\psi\rangle$ αντίστοιχα.

Παράδειγμα 1.19: Πιθανότητες μέτρησης της κατάστασης $|-y\rangle$

Ας δούμε πως θα μπορούσαμε να εφαρμόσουμε τους τελεστές προβολής για να υπολογίσουμε τις πιθανότητες εμφάνισης P_0 και P_1 των $|0\rangle$ και $|1\rangle$ αντίστοιχα στην κατάσταση

$$|-y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{j}{\sqrt{2}}|1\rangle$$

Σύμφωνα με αυτά που είδαμε ως τώρα:

$$P_0 = \langle -y|0\rangle \langle 0| - y\rangle$$

$$P_1 = \langle -y|1\rangle \langle 1| - y\rangle$$

Μπορούμε να υπολογίσουμε τις παραπάνω πιθανότητες με διάφορους τρόπους. Ίσως ο πιο απλός είναι να υπολογίσουμε τα $\langle i| - y\rangle$ και $\langle -y|i\rangle$ όπου $i = 0, 1$.

$$\langle 0| - y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad , \quad \langle 1| - y\rangle = -\frac{j}{\sqrt{2}}$$

$$\langle -y|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad , \quad \langle -y|1\rangle = \frac{j}{\sqrt{2}}$$

Οπότε

$$P_0 = \langle -y|0\rangle \langle 0| - y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \times \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2}$$

$$P_1 = \langle -y|1\rangle \langle 1| - y\rangle = \frac{j}{\sqrt{2}} \times \frac{-j}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2}$$

Εναλλακτικά θα μπορούσαμε να χρησιμοποιήσουμε το γεγονός ότι:

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

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

Οπότε

$$P_0 = \langle -y|0\rangle \langle 0| - y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -j \end{bmatrix} = \frac{1}{2}$$

$$P_1 = \langle -y|1\rangle \langle 1| - y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -j \end{bmatrix} = \frac{1}{2}$$

1.32 Μέσες τιμές μεγεθών

Είδαμε ότι οι Ερμιτιανοί τελεστές $\hat{H}$ συνδέονται άμεσα με την διαδικασία της μέτρησης στην κβαντική υπολογιστική: οι ιδιοτιμές τους αποτελούν τα πιθανά αποτελέσματα μέτρησης ενώ αν το σύστημα πριν την μέτρηση περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση $|\psi\rangle$ τότε τα ιδιοδιανύσματα $|\psi_i\rangle$ του $\hat{H}$ αποτελούν τις πιθανές τελικές καταστάσεις μετά την μέτρηση.

Αν συμβολίσουμε με H το μέγεθος που πάμε να μετρήσουμε τότε το H είναι μία τυχαία μεταβλητή. Στην

προηγούμενη ενότητα είδαμε ότι οι πιθανότητες εμφάνισης $P_i = \Pr \{H = \lambda_i\}$ της ιδιοτιμής λ_i που αντιστοιχεί στο ιδιοδιάνυσμα $|\psi_i\rangle$ μπορεί να υπολογιστεί από την σχέση:

$$P_i = \langle \psi | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \psi \rangle$$

δηλαδή εφαρμόζουμε το $|\psi\rangle$ και το $\langle \psi|$ δεξιά και αριστερά από τον τελεστή προβολής $|\psi_i\rangle \langle \psi_i|$. Ας θυμηθούμε τώρα πως το $\hat{H}$ γράφεται με την βοήθεια της διαγωνιοποίησης ως εξής:

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

Ας δούμε τώρα τι θα γίνει αν υπολογίσουμε το $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$. Θα έχουμε:

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

Το τελευταίο μέρος της παραπάνω σχέσης είναι το άθροισμα των γινομένων $P_i \lambda_i$ δηλαδή των πιθανοτήτων εμφάνισης P_i επί των αντίστοιχων τιμών του μεγέθους προς μέτρηση. Αυτό είναι η μέση τιμή του μεγέθους που μετράμε την οποία μπορούμε να συμβολίσουμε ως $\mathbb{E} \{H\}$,

$$\mathbb{E} \{H\} = \sum_{i=1}^N \lambda_i \Pr \{H = \lambda_i\} = \sum_{i=1}^N \lambda_i P_i$$

Επομένως καταλήγουμε σε μία συμπαγή έκφραση για την μέση τιμή,

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

Είδαμε επίσης ότι το τετράγωνο του τελεστή $\hat{A}$ γράφεται ως εξής:

$$\hat{H}^2 = \sum_{i=1}^N \lambda_i^2 |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$$

Τα λ_i^2 είναι οι τιμές του μεγέθους H^2 . Οπότε πάλι μπορούμε να γράψουμε

$$\mathbb{E} \{H^2\} = \sum_{i=1}^N \lambda_i^2 P_i = \langle \psi | \hat{H}^2 | \psi \rangle$$

Αν υποθέσουμε τώρα ότι το $|\psi\rangle$ γράφεται ως γραμμικός συνδυασμός

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N a_i |\psi_i\rangle$$

Σε αυτή την περίπτωση θα έχουμε:

$$\mathbb{E} \{H\} = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \sum_{p=1}^N \sum_{q=1}^N a_p^* a_q \langle \psi_p | \hat{H} | \psi_q \rangle = \sum_{p=1}^N \sum_{q=1}^N a_p^* a_q H_{pq}$$

όπου τα H_{pq} είναι τα στοιχεία του πίνακα $\mathbf{H}$ που περιγράφει τον $\hat{H}$. Είναι εύκολο να δούμε ότι η παραπάνω έκφραση είναι το γινόμενο $\langle \psi | \mathbf{H} | \psi \rangle$ που προκύπτει αν πολλαπλασιάσουμε τον πίνακα $\mathbf{H}$ με τα διανύσματα $\langle \psi|$ και $|\psi\rangle$ από αριστερά και δεξιά αντίστοιχα. Οπότε μπορούμε να γράψουμε:

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

Γενικότερα εάν θέλουμε να υπολογίσουμε την μέση τιμή μίας συνάρτησης $f(H)$ ενός μεγέθους H τότε είναι εύκολο να δούμε ότι:

$$\mathbb{E} \{f(H)\} = \sum_{i=1}^N f(\lambda_i) P_i = \langle \psi | f(\hat{H}) | \psi \rangle = \langle \psi | f(\mathbf{H}) | \psi \rangle$$

Παράδειγμα 1.20: Μέση τιμή του spin s_y

Ας υπολογίσουμε την μέση τιμή του spin s_y ως προς τον άξονα του y όταν η κατάσταση του συστήματος περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση,

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

Για να μετρήσουμε το spin στον άξονα του y πρέπει να χρησιμοποιήσουμε τον τελεστή $\hat{H}_y$ που περιγράφεται από τον πίνακα:

$$\mathbf{H}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -j \\ j & 0 \end{bmatrix}$$

Είναι εύκολο να επιβεβαιώσουμε ότι το πίνακας $\mathbf{H}_y$ είναι Ερμιτιανός. Σύμφωνα με τα παραπάνω η μέση τιμή του spin s_y θα είναι:

$$\bar{s}_y = \langle\psi|\mathbf{H}_y|\psi\rangle$$

Έχουμε:

$$\mathbf{H}_y|\psi\rangle = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -j \\ j & 0 \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} -j \\ j \end{bmatrix} = \frac{j\hbar}{2\sqrt{2}} \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Πολλαπλασιάζοντας αριστερά με $\langle\psi|$ θα έχουμε:

$$\bar{s}_y = \langle\psi|\mathbf{H}_y|\psi\rangle = \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} (-1 + 1) = 0$$

Σύνοψη Ενότητας

Σε αυτή την ενότητα γνωρίσαμε τα βασικά «εργαλεία» της κβαντικής θεωρίας μέσα από το παράδειγμα του spin ενός ηλεκτρονίου. Συνοπτικά:

- Ένα qubit, σε αντίθεση με το κλασικό bit, περιγράφεται από μία κυματοσυνάρτηση $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ σε υπέρθεση των δύο βασικών καταστάσεων, με $|a|^2$ και $|b|^2$ τις πιθανότητες των δύο πιθανών αποτελεσμάτων μιας μέτρησης.
- Οι κβαντικές καταστάσεις είναι kets $|\psi\rangle$ σε ένα διανυσματικό χώρο, με το εσωτερικό γινόμενο $\langle\phi|\psi\rangle$ να ορίζεται μέσω των bras $\langle\phi|$ και να ικανοποιεί $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, ενώ ορθοκανονικές βάσεις όπως τα $|0\rangle, |1\rangle$ μας επιτρέπουν να αναπαραστήσουμε κάθε $|\psi\rangle$ ως διάνυσμα-στήλη.
- Η επεξεργασία ενός qubit (κβαντικές πύλες) γίνεται με μοναδιαίους πίνακες $\mathbf{U}$, οι οποίοι διατηρούν τη νόρμα και άρα τη συνολική πιθανότητα.
- Η μέτρηση ενός μεγέθους αντιστοιχεί σε έναν Ερμιτιανό πίνακα $\mathbf{H}$: οι ιδιοτιμές του είναι τα δυνατά αποτελέσματα και τα ιδιοδιανύσματα του οι καταστάσεις μετά τη μέτρηση, όπως είδαμε μετρώντας το spin στους άξονες x, y και z .
- Κάθε κανονικός πίνακας διαγωνιοποιείται σε μία ορθοκανονική βάση ιδιοδιανυσμάτων, και μέσω των πινάκων προβολής $\mathbf{P}_n = |\psi_n\rangle\langle\psi_n|$ μπορούμε να γράψουμε $\mathbf{A} = \sum_n \lambda_n \mathbf{P}_n$ και να ορίσουμε συναρτήσεις πινάκων $f(\mathbf{A})$.
- Η γενίκευση των πινάκων σε τελεστές $\hat{A}$ μας απελευθέρωσε από τη συγκεκριμένη βάση αναπαράστασης: κάθε τελεστής περιγράφεται από διαφορετικό πίνακα ανάλογα με τη βάση που επιλέγουμε, όπως είδαμε και με τους τελεστές $\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z}$ που αντιστοιχούν στους πίνακες Pauli.
- Οι πιθανότητες μέτρησης και οι μέσες τιμές μεγεθών εκφράζονται φυσικά μέσω των τελεστών προβολής, $P_n = \langle\psi|\hat{P}_n|\psi\rangle$ και $\mathbb{E}\{f(A)\} = \langle\psi|f(\hat{A})|\psi\rangle$.