Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar

Kvantum-számításelmélet jegyzet (töredék)

Richard Józsa előadásai nyomán készítette:

Gilyén András

Budapest, 2014

1. Véges dimenziós kvantum mechanika és formalizmus

Ebben a szakaszban a kvantummechanika posztulátumait és a kapcsolódó alapvető lineáris algebrai fogalmakat tárgyaljuk röviden, valamint bevezetjük a kvantumfizikában használt Dirac-féle bra-ket jelölésrendszert.

1.1. Véges dimenziós Hilbert-terek

Egy n dimenziós H Hilbert tér egy n dimenziós komplex vektortér ellátva egy $\langle . | . \rangle : H \times H \to \mathbb{C}$ pozitív definit (belső) skalárszorzattal:

(i) $\langle \mathbf{w} | \mathbf{v} \rangle = \langle \mathbf{v} | \mathbf{w} \rangle^*$ (a * komplex konjugáltat jelöl)

(iia) $\langle \mathbf{w} | \alpha \mathbf{v_1} + \beta \mathbf{v_2} \rangle = \alpha \langle \mathbf{w} | \mathbf{v_1} \rangle + \beta \langle \mathbf{w} | \mathbf{v_2} \rangle$
(azaz lineáris a második változóban)

(iib) $\langle \gamma \mathbf{w_1} + \delta \mathbf{w_2} | \mathbf{v} \rangle = \gamma^* \langle \mathbf{w_1} | \mathbf{v} \rangle + \delta^* \langle \mathbf{w_2} | \mathbf{v} \rangle$
(avagy konjugált lineáris az első változóban)

(iii) $\langle \mathbf{v} | \mathbf{v} \rangle \in \mathbb{R}_0^+$ és $\langle \mathbf{v} | \mathbf{v} \rangle = 0 \iff \mathbf{v} = 0$ (pozitív definit)

További definíciók és tulajdonságok:

- Ha $\langle \mathbf{w}, \mathbf{v} \rangle = 0$, akkor a $\mathbf{w}$ és $\mathbf{v}$ vektorokat merőlegesnek (ortogonálisnak) nevezzük,
- Definiálható a vektorok normája: $\|\mathbf{v}\| = \sqrt{\langle \mathbf{v} | \mathbf{v} \rangle}$
- Teljesül a Cauchy-Schwartz egyenlőtlenség: $\langle \mathbf{w}, \mathbf{v} \rangle \leq \|\mathbf{w}\| \cdot \|\mathbf{v}\|$
- Van ONB (ortonormált bázis): $\mathbf{e_1}, \mathbf{e_2}, \ldots \mathbf{e_n} : \langle \mathbf{e_i} | \mathbf{e_j} \rangle = \delta_{ij}$
($\delta_{ij} = 1$ ha $i = j$ különben 0.)
- Kifejtés ONB-ban: $\mathbf{v} = \sum_{i=1}^{n} \langle \mathbf{e_i} | \mathbf{v} \rangle \mathbf{e_i}$

Példa: Legyen $H = \mathbb{C}^3$, és gondoljunk a vektorokra mint oszlopvektorokra. Ekkor a legtermészetesebb belső szorzat definíció a következő: $(\mathbf{w}, \mathbf{v} \in H)$ $\langle \mathbf{w} | \mathbf{v} \rangle := \mathbf{w}^{*T} \cdot \mathbf{v}$. (A ^{*T} az oszlopvektor elemenként vett komplex konjugáltjának a transzponáltját jelöli.)

$$\mathbf{w} = \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} \; \mathbf{v} = \begin{bmatrix} d \\ e \\ f \end{bmatrix} \quad \langle \mathbf{w} | \mathbf{v} \rangle = \begin{bmatrix} a^* \\ b^* \\ c^* \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} d \\ e \\ f \end{bmatrix} = a^* d + b^* e + c^* f$$

Ez a skalárszorzás definíció tulajdonképpen ekvivalens azzal, hogy ONB lesz a sztenderd koordináta bázis:

$$\left\{ \mathbf{e_1} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \mathbf{e_2} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \mathbf{e_3} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \right\}$$

De persze a sztenderd koordináta bázis mellett sok másik ONB is akad pl.:

$$\left\{ \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ e^i \end{bmatrix} \right\}$$

Ha a sztenderd koordináta bázis ONB, akkor a ^{*T} művelet megfelel az adjungálásnak. Az adjungálást † (dagger)-rel jelöljünk. Néhány fontos tulajdonsága: (ha ^{*T}-ként gondolunk rá, akkor könnyen látszanak)

- $\langle \mathbf{w} | \mathbf{v} \rangle = \mathbf{w}^\dagger \mathbf{v}$ és $(\mathbf{w}^\dagger)^\dagger = \mathbf{w}$
- $\langle \mathbf{w} | A\mathbf{v} \rangle = \langle \mathbf{w} A^\dagger | \mathbf{v} \rangle$ és $(A^\dagger)^\dagger = A$
- $(A\mathbf{v})^\dagger = \mathbf{v}^\dagger A^\dagger$ és $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$
- $(\lambda \mathbf{w})^\dagger = \lambda^* \mathbf{w}^\dagger$ és $(\lambda A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger$

A jegyzetben a vektorterek önmagukra menő lineáris leképezéseit egyszerűen csak (lineáris) operátoroknak fogjuk nevezni, de a lineáris jelzőt is lehagyjuk majd.

A legsűrűbben unitér operátorokkal fogunk majd foglalkozni. Definíció szerint az U operátor unitér, ha $U^{-1} = U^\dagger$, avagy $U^\dagger U = I$. Ezzel a definícióval ekvivalens, hogy mátrixának oszlopai (sorai) merőlegesek egymásra és bármely oszlopának (sorának) 1 a normája. Az unitér operátorok talán legfontosabb tulajdonsága, hogy megtartják a skaláris szorzat értékét: $\langle U\mathbf{w} | U\mathbf{v} \rangle = \langle \mathbf{w} | U^\dagger U \mathbf{v} \rangle = \langle \mathbf{w} | I\mathbf{v} \rangle = \langle \mathbf{w} | \mathbf{v} \rangle$

1.2. Vektorok és vektorterek tenzorszorzata

Legyen V és W egy n illetve m dimenziós vektortér és $\{\mathbf{e_1}, \mathbf{e_2}, \dots \mathbf{e_n}\}$ illetve $\{\mathbf{f_1}, \mathbf{f_2}, \dots \mathbf{f_m}\}$ a terek bázisai. Ekkor a V és W vektorterek tenzor szorzata egy $n \cdot m$ dimenziós vektortér, amit $V \otimes W$-el jelölünk. Ezt a vektorteret tekinthetünk úgy mint az $\mathbf{e_i} \otimes \mathbf{f_j}$ $(0 \leq i, j \leq n, m)$ „szimbólumokból” képzett $\left\{ \sum_{i,j}^{n,m} \gamma_{i,j} \cdot \mathbf{e_i} \otimes \mathbf{f_j} \middle| \gamma_{i,j} \in \mathbb{C} \right\}$ formális lineáris kombinációk által alkotott vektorteret. Ez utóbbit pedig azonosíthatjuk a $\mathbb{C}^{n \cdot m}$ oszlopvektorok terével.

Például ha $V = V = \mathbb{C}^2$, akkor az azonosítást az alábbi „lexikografikus” elrendezésben szokás megtenni:

$$\mathbf{e_1}\otimes\mathbf{f_1}\leftrightarrow\begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix},\mathbf{e_1}\otimes\mathbf{f_2}\leftrightarrow\begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\end{bmatrix},\mathbf{e_2}\otimes\mathbf{f_1}\leftrightarrow\begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\end{bmatrix},\mathbf{e_2}\otimes\mathbf{f_2}\leftrightarrow\begin{bmatrix}0\\0\\0\\1\end{bmatrix}$$

Vektorok tenzorszorzata alatt az alábbi $(.\,,.) : V \times W \mapsto V \otimes W$ bilineáris beágyazást értjük: $(V \ni \mathbf{v} := \sum_{i=1}^{n} a_i \cdot \mathbf{e_i}, W \ni \mathbf{w} := \sum_{j=1}^{n} b_j \cdot \mathbf{f_j})$

$$(\mathbf{v},\mathbf{w}) \to \mathbf{v}\otimes\mathbf{w} = \left(\sum_{i=1}^{n} a_i\cdot\mathbf{e_i}\right)\otimes\left(\sum_{j=1}^{m} b_j\cdot\mathbf{f_j}\right) := \sum_{i,j}^{n,m} a_i b_j\cdot\mathbf{e_i}\otimes\mathbf{f_j}$$

Tenzorszorzat az oszlopvektorok nyelvén az előbbi példával illusztrálva:

$$\begin{bmatrix}a_1\\a_2\end{bmatrix}\otimes\begin{bmatrix}b_1\\b_2\end{bmatrix}\to\begin{bmatrix}a_1\begin{bmatrix}b_1\\b_2\end{bmatrix}\\a_2\begin{bmatrix}b_1\\b_2\end{bmatrix}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}a_1b_1\\a_1b_2\\a_2b_1\\a_2b_2\end{bmatrix}$$

Megjegyzés: Sokszor hasznos a tenzorszorzatként kapott vektor együtthatóit táblázatos formában elképzelni:

$$\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}\otimes\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}\to\begin{matrix}1&0\\0&0\end{matrix}\qquad \text{Általánosan:}\begin{bmatrix}a_1\\a_2\end{bmatrix}\otimes\begin{bmatrix}b_1\\b_2\end{bmatrix}\to\begin{matrix}a_1b_1&a_1b_2\\a_2b_1&a_2b_2\end{matrix}$$

A fenti alak jól mutatja, hogy nem minden $V \otimes W$-beli vektor áll elő tenzorszorzatként. Azokat a vektorokat amelyek előállnak így, szorzatvektoroknak nevezzük, amelyek nem állnak elő azokat pedig összefonódott (angolul: entangled) vektoroknak. (Meggondolható, hogy pontosan azok a szorzatvektorok, amelyek fenti táblázatos alakban írt koordinátái 1 rangú együtthatómátrixot alkotnak.)

Ha V és W is Hilbert-tér, akkor ez a Hilbert-tér struktúra természetes módon átörökíthető $V \otimes W$-re. A szorzatvektorokon az alábbi módon definiálhatjuk a skaláris szorzást: (A $\langle .|.\rangle_{\_}$ alsó index azt jelöli, hogy mikor melyik tér belső szorzatáról van szó.)

$$\langle\mathbf{v_1}\otimes\mathbf{w_1}|\mathbf{v_2}\otimes\mathbf{w_2}\rangle_{V\otimes W} := \langle\mathbf{v_1}|\mathbf{v_2}\rangle_V\cdot\langle\mathbf{w_1}|\mathbf{w_2}\rangle_W$$

Így ha $\{\mathbf{e_1}, \mathbf{e_2}, \dots \mathbf{e_n}\}$ és $\{\mathbf{f_1}, \mathbf{f_2}, \dots \mathbf{f_m}\}$ ONB, akkor $\mathbf{e_i} \otimes \mathbf{f_j}$ is ONB lesz. Ezáltal pedig a definíció kiterjeszthető összefont vektorokra is: tetszőleges $\mathbf{z} \in V \otimes W$ vektort kifejthető $\sum_{i,j}^{n,m} \gamma_{i,j} \cdot \mathbf{e_i} \otimes \mathbf{f_j}$ alakban. Így definiálható

$$\langle \mathbf{z} | \mathbf{q} \rangle = \left\langle \sum_{i,j}^{n,m} \gamma_{i,j} \cdot \mathbf{e_i} \otimes \mathbf{f_j} \middle| \sum_{k,l}^{n,m} \beta_{k,l} \cdot \mathbf{e_k} \otimes \mathbf{f_l} \right\rangle := \sum_{i,j}^{n,m} \gamma_{i,j}^* \cdot \beta_{i,j}$$

1.3. *Operátorok (azaz lineáris leképezések) tenzorszorzata*

Legyen $A : V \to V$ és $B : W \to W$ lineáris leképezés (avagy operátor). Ekkor az $A \otimes B : V \otimes W \to V \otimes W$ operátor szorzatvektorokon legyen az alábbi módon definiálva:

$$A \otimes B(\mathbf{v} \otimes \mathbf{w}) := A(\mathbf{v}) \otimes B(\mathbf{w})$$

Hasonlóan mint az előbb a definíció lineárisan kiterjeszthető összefont vektortokra is, mivel az $\mathbf{e_i} \otimes \mathbf{f_j}$ bázison már definiálva van a leképezést.

Például legyen $A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}$ és $B = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix}$ ekkor $A \otimes B$ blokkmátrix alakú, azaz

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} a_{11} \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix} & a_{12} \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix} \\ a_{21} \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix} & a_{22} \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} & a_{12}b_{11} & a_{12}b_{12} \\ a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} & a_{12}b_{21} & a_{12}b_{22} \\ a_{21}b_{11} & a_{21}b_{12} & a_{22}b_{11} & a_{22}b_{12} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{21} & a_{22}b_{22} \end{bmatrix}$$

1.4. *Dirac-féle bra-ket jelölés*

Mostantól a H Hilbert-tér elemeit $\mathbf{v}$ helyett $|v\rangle$-vel fogjuk jelölni (ezek a Dirac-féle jelölés ket vektorai), és úgy fogunk rájuk gondolni mint egy ONB-ben felírt oszlopvektorra. A sztenderd bázis elemeit pedig $\mathbf{e_{i+1}}$ helyett egyszerűen $|i\rangle$-vel fogjuk jelölni. A $\mathbf{v}^\dagger$ adjungált (sor)vektor helyett pedig a $\langle v|$ bra vektor jelölést vezetjük be.

Például a $dim(H) = 2$ estben az új jelölés így váltja le a régit:

$$\mathbf{v} = a \cdot \mathbf{e_1} + b \cdot \mathbf{e_2} = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = a\,|0\rangle + b\,|1\rangle = |v\rangle$$

$$\mathbf{v}^\dagger = a^* \cdot \mathbf{e_1}^\dagger + b^* \cdot \mathbf{e_2}^\dagger = \begin{bmatrix} a^* & b^* \end{bmatrix} = a^*\,\langle 0| + b^*\,\langle 1| = \langle v|$$

Megjegyzés: A skalárok és operátorok kiemelésekor vigyázni kell, ugyanis míg $|\lambda v\rangle = \lambda\mathbf{v} = \lambda|v\rangle$ és $|Av\rangle = A\mathbf{v} = A|v\rangle$ addig a bra vektorokra $\langle\lambda v| = (\lambda\mathbf{v})^\dagger = \lambda^*\mathbf{v}^\dagger = \lambda^*\langle v|$ és $\langle Av| = (A\mathbf{v})^\dagger = \mathbf{v}^\dagger A^\dagger = \langle v| A^\dagger$.

A Dirac-féle jelölésrendszer szépségét az adja, hogy a skalárszorzat jelöléséhez tökéletesen illeszkedik, és így segít összevonni amit könnyen össze lehet:

$$\langle\mathbf{w}|\mathbf{v}\rangle = \mathbf{w}^\dagger \cdot \mathbf{v} = \langle w|\cdot|v\rangle$$

Kényelmesen tudunk operátorokat is definiálni az új jelölés segítségével. Például maradva a $dim(H) = 2$ esetnél:

$$|0\rangle\langle 0| = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}; |0\rangle\langle 1| = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \ldots$$

Így aztán tetszőleges M operátor kifejthető az $|i\rangle\langle j|$ mátrixelemek segíségével:

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

Hasonlóan megy a dolog általános vektorokra is: vegyük most a $|v\rangle\langle w|$ szorzatot, ami ugyebár egy operátor (diád-mátrix). Hogyan hat ez az operátor a $|z\rangle$ vektoron? A választ gondolkodás nélkül megadja a Dirac-féle jelölésrendszer:

$$(|v\rangle\langle w|)|z\rangle = |v\rangle\langle w||z\rangle = |v\rangle\langle w|z\rangle = \langle w|z\rangle|v\rangle$$

Fontos speciális eset amikor $\langle v|v\rangle = 1$, azaz $|v\rangle$ normált ($\|\mathbf{v}\| = 1$). Ilyenkor $|v\rangle\langle v| = \prod_v$ a $|v\rangle$-re való merőleges vetítés operátora. A Dirac-féle jelölés segítségével könnyű látni, hogy ez valóban egy vetítő operátor, avagy projektor: $\prod_v\prod_v = |v\rangle\langle v||v\rangle\langle v| = |v\rangle\underbrace{\langle v|v\rangle}_{=1}\langle v| = |v\rangle\langle v| = \prod_v$

Megjegyzés: A tenzorszorzat jelét a Dirac-féle bra-ket jelölésekből el szokás hagyni. Vagyis $\mathbf{v}\otimes\mathbf{w}$ ket vektoros jelölésére $|v\rangle\otimes|w\rangle$ helyett csak egyszerűen $|v\rangle|w\rangle$ fogunk írni legtöbbször. A sztenderd bázisvektorok jelölésekor $|i\rangle|j\rangle$ helyett pedig sokszor még egyszerűbben csak $|ij\rangle$-t fogunk írni.

1.5. A kvantummechanika posztulátumai

A mi esetünkben a vizsgált rendszereknek mindig véges sok szabadsági foka lesz, vagyis mi csak a véges dimenziós esettel fogunk foglalkozni.

(I) **Fizikai állapotok:** Egy izolált fizikai rendszer állapotait mindig leírhatjuk egy Hilbert-tér egységvektoraival. Két állapot akkor és csak akkor különböztethető meg teljes bizonyossággal, ha a megfelelő vektorok merőlegesek egymásra.

Qubitek: A két szabadsági fokú kvantumrendszereket qubiteknek fogjuk hívni. A megfelelő Hilbert-tér egy kitüntetett ONB-át számítási bázisnak fogjuk hívni elemeit pedig $\{|0\rangle, |1\rangle\}$-el fogjuk jelölni.

(II) **Összetett rendszerek:** Ha két kvantumrendszer egyikét a H_1 míg másikát a H_2 Hilber-tér írja le, akkor a két rendszer együttese által alkotott összetett rendszer lehetséges állapotait a $H_1 \otimes H_2$ tenzorszorzat egységvektorai írják le.

(III) **Időfejlődés:** A fizikai rendszer állapotainak véges idő alatt bekövetkező változását a Hilber-tér valamely unitér operátora írja le.

(IV) **Rendszer mérése:** A rendszert valamilyen ONB-ban tudjuk megmérni. Legyen például $B = \{|e_1\rangle, \ldots, |e_n\rangle\}$. Ekkor a $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} a_i |e_i\rangle$ állapotot a B ONB-ban mérve a mérés lehetséges eredményei: $1, \ldots, n$. Annak a valószínűségét, hogy a mérési eredmény k lesz a Born szabály mondja meg:

$$P(\text{eredmény} = k) = |\langle e_k|\psi\rangle|^2 = |a_k|^2$$

Ha a mérési eredmény k, akkor a rendszer a $|\psi\rangle$ állapotból „beugrik” az $|e_k\rangle$ állapota, vagyis a rendszer állapota végérvényesen megváltozik!

Részrendszer mérése (kiterjesztett Born szabály): Tegyük fel, hogy két rendszer együttes állapotát csak az egyik részrendszerben mérem meg. Ekkor a mérési valószínűségeket, és a mérés utáni állapotokat az úgynevezett részleges belső szorzat adja meg. Tegyük fel, hogy a másik részrendszerben $\{|f_1\rangle, |f_2\rangle, \ldots |f_m\rangle\}$ ONB. Legyen az összetett rendszerünk állapota $|\varphi\rangle = \sum_{i,j}^{n,m} \alpha_{i,j} \cdot |e_i\rangle |f_j\rangle$. Ekkor a mérési valószínűség és az új állapot:

$$P(\text{eredmény} = k) = \|\langle e_k|\varphi\rangle\|^2 = \sum_{j=1}^{m} |\alpha_{kj}|^2 \text{ ; új állapot: } |e_k\rangle \frac{\sum_{j=1}^{m} \alpha_{kj} \cdot |f_j\rangle}{\sqrt{\sum_{j=1}^{m} |\alpha_{kj}|^2}}$$

References

[1] Michael A. Nielsen, Isaac L. Chuang: Quantum Computation and Quantum Information, Cambridge University Press. (2000);

[2] Richard Jozsa: Quantum Computation lecture notes, Cambridge;

[3] Scott Aaronson: Complexity Zoo;