Pauli–LCU-decompositie van een eenvoudig first-quantization Hamiltoniaan

1 Definieer een eenvoudig systeem

Neem één elektron ($N = 1$) en twee basisfuncties ($D = 2$), zodat de elektronische Hilbert-ruimte tweedimensionaal is. In first quantization schrijven we de Hamiltoniaan als

$$H = \sum_{p,q=0}^{1} h_{pq} \left|p\right\rangle \left\langle q\right| . \tag{1}$$

Hier is $\{\left|0\right\rangle, \left|1\right\rangle\}$ de (kleine) set basis-orbitalen. Stel dat de matrixelementen h_{pq} reëel en symmetrisch zijn; bijvoorbeeld

$$h_{00} = 1.0, \qquad h_{11} = 2.0, \qquad h_{01} = h_{10} = 0.5.$$

Dan is de (2×2)-matrix van H

$$H = \begin{pmatrix} 1.0 & 0.5 \\ 0.5 & 2.0 \end{pmatrix}. \tag{2}$$

2 Schrijf $|p\rangle\langle q|$ om in Pauli-operatoren

Voor een tweedimensionale Hilbert-ruimte gelden de standaardrelaties

$$\left|0\right\rangle \left\langle 0\right| = \tfrac{1}{2}(I + Z), \qquad \left|1\right\rangle \left\langle 1\right| = \tfrac{1}{2}(I - Z),$$
$$\left|0\right\rangle \left\langle 1\right| + \left|1\right\rangle \left\langle 0\right| = X, \qquad \left|0\right\rangle \left\langle 1\right| - \left|1\right\rangle \left\langle 0\right| = iY \quad \text{(hier niet nodig)}.$$

Omdat H reëel is, komt er geen Y-term in voor; de off-diagonale delen reduceren tot X. Voor de gekozen h_{pq} volgt

$$\begin{aligned} H &= h_{00} \left|0\right\rangle \left\langle 0\right| + h_{11} \left|1\right\rangle \left\langle 1\right| + h_{01}(\left|0\right\rangle \left\langle 1\right| + \left|1\right\rangle \left\langle 0\right|) \\ &= 1.0\, \tfrac{1}{2}(I + Z) + 2.0\, \tfrac{1}{2}(I - Z) + 0.5\, X \\ &= 1.5\, I - 0.5\, Z + 0.5\, X. \end{aligned}$$

3 Lineaire-combinatie-van-unitairen (LCU)

Voor qubitization schrijven we

$$H = \sum_{\alpha} \omega_\alpha U_\alpha, \tag{3}$$

waarbij de Pauli-matrices I, X, Z zelf unitair zijn. De negatieve coefficient -0.5 bij Z kan in het unitaire worden opgenomen, omdat $-Z$ eveneens unitair is. We kiezen

$$\begin{aligned} U_1 &= I, \quad \omega_1 = 1.5, \\ U_2 &= X, \quad \omega_2 = 0.5, \\ U_3 &= -Z, \quad \omega_3 = 0.5. \end{aligned}$$

De 1-norm (schaalfactor) bedraagt

$$\lambda = \sum_{\alpha} |\omega_\alpha| = 2.5. \tag{4}$$

4 Block-encoding en qubitization

- **Systeemregister**: 1 qubit volstaat voor de toestanden $|0\rangle$, $|1\rangle$.
- **SELECT**: een ancilla-register kiest welk U_α wordt toegepast.
- **PREP**: prepareer $\sum_\alpha \sqrt{\omega_\alpha/\lambda}\,|\alpha\rangle$ op datzelfde register.
- **Block-encoding**: de unitaire $U = \frac{1}{\lambda}\sum_\alpha \omega_\alpha U_\alpha \oplus \dots$ bevat H/λ in zijn linkerbovenblok.
- **QPE**: fase-estimatie op U geeft de eigenwaarden van H.

5 Conclusie

Dit mini-voorbeeld laat zien hoe een chemische Hamiltoniaan in first quantization wordt gedecomposeerd als lineaire som van Pauli-operatoren met positieve coëfficiënten, en hoe block-encoding plus qubitization spectrale informatie ontsluit. Voor realistische systemen vervang je $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ door $\{|p\rangle \mid p = 0, \dots, D-1\}$ en schaalt het schema mee met sparsity (QROAM) voor het geval $N \ll D$, zodat het qubitvoordeel behouden blijft.