1. Quantum Theory

Vaughan Sohn

October 12, 2024

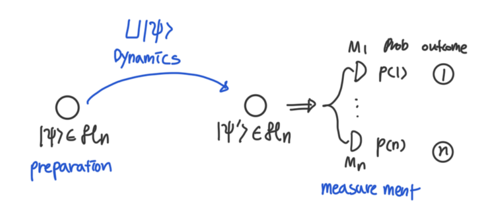
Contents

Overview of Quantum Theory

Overview of Quantum Theory

양자역학에서만 사용되는 *operation structure*:

- Preparation: $|\psi\rangle$으로 준비하는 과정
- Dynamics: 준비한 상태를 다른 상태로 변환하는 과정
- Measurement: 최종 상태를 측정하여 하나의 deterministic outcome을 얻는 것.



- 양자역학에서 두 실험이 완전히 동등하려면, 다음 조건을 만족해야한다.
  - 동일한 initializer를 사용한다.
  - 동일한 dynamics를 사용한다.
  - 동일한 measurement operator set을 사용한다.

$\Rightarrow$ 그러나, 양자역학은 동일한 structure를 사용한다고 하더라도 최종 결과로 얻게되는 outcome은 *probability*에 의하여 결정되기 때문에 다를 수 있다!

Components of quantum theory

양자역학은 다음의 4가지 component로 이루어진다.

- State $|\psi\rangle$
- Dynamics U
- Measurement $\{M_i\}$
- Observable O

State: unit vector in Hilbert space

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H}, \quad \langle\psi|\psi\rangle = 1.$$

Dynamics: unitary operator

$$|\psi_0\rangle \to |\psi_t\rangle = U_t |\psi_0\rangle ,$$

where unitary:

$$U^\dagger U = UU^\dagger = I \Leftrightarrow U^\dagger = U^{-1}.$$

Measurement: POVM(Positive Operator Value Measurement)

- POVM은 positive이며, completeness relation을 만족하는 measurement operator 들의 집합을 의미한다.

$$\left\{ M_i \ : \ M_i \geq 0, \ \sum_i M_i = I \right\}$$

- measurement probability: measurement outcome이 o_i일 확률은 다음과 같다.

$$p(i) = \langle \psi | M_i | \psi \rangle$$

✓ meaning: $|\{M_i\}|$개의 detector가 존재할 때, 측정결과가 각 detector M_i에서 감지될 확률 $p(i)$를 위와 같이 표현한다고 생각하자.

Components of quantum theory

Observable: Hermitian operator

- Observable은 각 measurement operator와 그 operator에 대응되는 측정결과[$*$]의 linear combination으로 정의된다.

$$O = \sum_i o_i M_i, \quad (o_i \in \mathbb{R})$$

where Hermitian[$*$]:

$$O^\dagger = O.$$

- Observable은 주어진 quantum state $|\psi\rangle$에서 해당 관측량 O에 대한 measurement를 진행했을 때 얻을 수 있는 outcome의 기댓값과 관계가 있다.

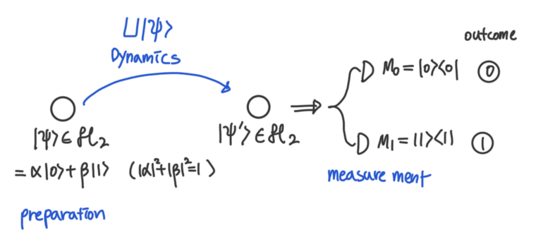
$$\underbrace{\langle o \rangle}_{empirical} = \sum_i o_i p(i) = \sum_i o_i \langle \psi | M_i | \psi \rangle = \langle \psi | O | \psi \rangle = \underbrace{\langle O \rangle_\psi}_{true}$$

Quantum experiment: Qubit

Overview of qubit system

앞으로 quantum experiment를 다룰 때는 양자역학에서 정보의 단위; qubit를 사용한다.

- Qubit는 마치 classical bit처럼 0, 1이라는 measurement outcome을 가진다.
- 그러나 qubit의 state (vector)는 *superposition* 상태를 가질 수 있다.
- Qubit system에서 사용하는 operation structure는 다음과 같다.
  - initializer: single qubit에 대해, 2차원 hilbert space $\mathcal{H}_2$
  - dynamics: 2×2 unitary matrix
  - bit detector: 0 또는 1을 감지 (projective measurement)



Qubit state

- 2차원 Hilbert space에서 computational basis $\{|0\rangle, |1\rangle\}$을 사용하면, state를 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \qquad \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

- 이때 각 복소수 계수는 complex exponential을 사용하여 나타낼 수 있다. $(\alpha = e^{ia}\cos\frac{\theta}{2}\ \beta = e^{ib}\sin\frac{\theta}{2})$
- *Global phase*: 다음 두 상태는 physically 동일하다.

$$|\psi\rangle = e^{i\phi}|\psi\rangle$$

$*$ Proof:

Definition 1 (Qubit state)

We define state of qubit is two-dimensional vector in the Hilbert space, and we denoted as

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle.$$

Qubit dynamics

주로 사용되는 single qubit dynamics(=gate)는 다음과 같다.

- Pauli matrices

$$X \triangleq \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad Y \triangleq \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad Z \triangleq \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

  또한, Pauli matrices는 spectral decomposition으로 표현할 수 있다.
  - $X = |+\rangle \langle +| - |-\rangle \langle -|$
  - $Y = |i\rangle \langle i| - |-i\rangle \langle -i|$
  - $Z = |0\rangle \langle 0| - |1\rangle \langle 1|$

- Hadamard gate

  Hadamard gate를 이용하면 X gate와 Z gate를 서로 전환할 수 있다.

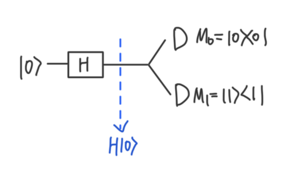
$$H \triangleq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

- Phase gate

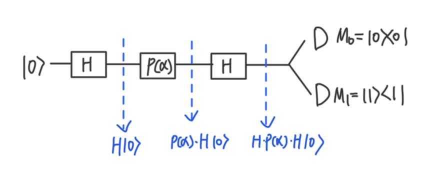
$$P(\alpha) \triangleq \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\alpha} \end{pmatrix}, \qquad (P(\pi) = S,\ P(\pi/8) = T)$$

다음 회로들에 대하여, 각 detector에 대한 확률 $p(0), p(1)$을 계산하라.

Example 1



Example 2



$\Rightarrow$

Mixed state

Prerequisites: trace

Definition 2 (trace)

Given matrix A, **trace** is a sum of diagonal matrix. On the other hand, it is also a sum of *eigenvalue*.

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}(A) &= \sum_i a_{ii} = \sum_i \langle i|A|i\rangle \\ &= \sum_i \lambda_i\end{aligned}$$

Theorem 3 (property of trace)

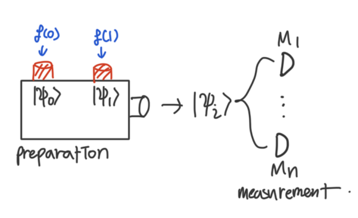
- $\mathrm{Tr}(AB) = \mathrm{Tr}(BA)$
- $\langle\psi|A|\psi\rangle = \mathrm{Tr}(A\,|\psi\rangle\langle\psi|)$

$*$ Proof:

$\Rightarrow$

Mixed state

- State를 preparation할 때, deterministic하게 결정하는 것이 아니라 특정한 확률에 따라서 state를 $|\psi_0\rangle$ 또는 $|\psi_1\rangle$로 준비하는 상황을 가정하자.



- 이렇게 결정된 임의의 state $|\psi_i\rangle$에 대하여 outcome이 o_i일 확률은 다음과 같다.

$$\tilde{p}(i) = q(0)\underbrace{\langle\psi_0|M_i|\psi_0\rangle}_{p(i|\psi_0)} + q(1)\underbrace{\langle\psi_1|M_i|\psi_1\rangle}_{p(i|\psi_1)}$$

by property of trace,

$$\begin{aligned}\tilde{p}(i) &= q(0)\,\mathrm{Tr}\left(M_i\,|\psi_0\rangle\langle\psi_0|\right) + q(1)\,\mathrm{Tr}\left(M_i\,|\psi_1\rangle\langle\psi_1|\right)\\ &= \mathrm{Tr}\left(M_i\Big(\underbrace{q(0)\,|\psi_0\rangle\langle\psi_0| + q(1)\,|\psi_1\rangle\langle\psi_1|}_{state}\Big)\right)\end{aligned}$$

Mixed state

- 따라서 이처럼 여러가지의 state 후보들이 non-deterministic하게 존재할 때, 그 state를 나타내기 위해서는 다른 표기법을 이용해야한다.
- Density matrix를 사용할 때는 measurement와 state의 곱에대한 trace를 계산하여 확률을 구할 수 있다.

$$p(i) = \mathrm{Tr}(M_i \cdot \rho)$$

Definition 4 (density matrix)

Density matrix is convex combination of pure states. We denoted as:

$$\rho = \sum_{i=0}^{n} q(i) \left|\psi_i\right\rangle \left\langle\psi_i\right|$$

where $\left|\psi_i\right\rangle \left\langle\psi_i\right|, \forall i$ are pure states.

Theorem 5 (condition of pure state)

If ρ is pure state, then if and only if $\mathrm{Tr}(\rho^2) = 1$

Quantum experiment: aspect of quantum physics

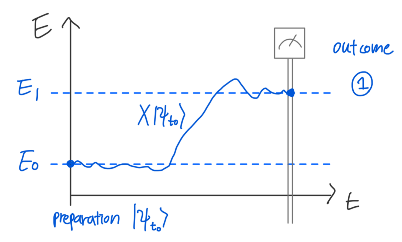
Preparation

- qubit의 computational basis $|0\rangle, |1\rangle$은 system의 energy level과 연관된다.
- 일반적으로 초기화에 사용하는 $|0\rangle$ state가 ground state에서의 energy이다.

$$|0\rangle \leftrightarrow E_0, \qquad |1\rangle \leftrightarrow E_1, \qquad (E_0 < E_1)$$

Dynamics

- state가 energy에 연관되어 있기 때문에, 계의 state를 변화시키기 위해서는 계의 에너지를 변화시켜야한다.
- 즉, dynamics는 계에 ΔE만큼의 energy변화를 야기시킨다.



Dynamics with Hamiltonian: Schrodinger equation

Quantum mechanics에서 **dynamics**는 Schrödinger equation으로부터 유도할 수 있다.

Theorem 6 (time-dependent Schrödinger equation)

Time-dependent Schrödinger equation:

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$$

where H is an observable, the Hamiltonian operator

time-dependent Schrödinger equation을 풀면, 시간의 변화에 따른 state의 변화를 다음과 같이 기술할 수 있다.

Corollary 7 (time-dependent state transition)

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iH(t-t_0)}|\psi(t_0)\rangle$$

✓ meaning: 즉, dynamics는 $e^{-iH(t-t_0)}$이다.

Dynamics with Hamiltonian: Schrodinger equation

- Hamiltonian 역시 operator이므로 eigenvalue E_k, 그리고 eigenvector $|\psi_k\rangle$가 존재하기 때문에, spectral decomposition을 할 수 있다.

$$H = \sum_k E_k |\phi_k\rangle \langle\phi_k| \tag{1}$$

- Hamiltonian의 eigenvector는 Hilbert space의 *eigenbasis*이므로 이를 이용하여 state를 표현할 수 있다.

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_k c_k |\phi_k\rangle \tag{2}$$

- Matrix exponential을 이용하여, dynamics를 다음과 같이 전개할 수 있다.

$$e^{-iH(t-t_0)} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(-i)^n H^n (t-t_0)^n \tag{3}$$

- 그렇다면, $|\psi(t_0)\rangle = |\phi_k\rangle$일 때, $|\psi(t)\rangle$는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle = e^{-iH(t-t_0)} |\phi_k\rangle &=^{(3)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(-i)^n (t-t_0)^n H^n |\phi_k\rangle \\ &=^{(1)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(-i)^n (t-t_0)^n E_k^n |\phi_k\rangle \\ &=^{(thr)} e^{-iE_k(t-t_0)} |\phi_k\rangle \end{aligned} \tag{4}$$

Dynamics with Hamiltonian: Schrodinger equation

Eq 2, 4를 이용하면, 어떤 arbitrary state $|\psi(t_0)\rangle$에 대한 state transition을 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-iH(t-t_0)} |\psi(t_0)\rangle \\ &= e^{-iH(t-t_0)} \sum_k c_k |\phi_k\rangle && \text{(by Eq.2)} \\ &= \sum_k c_k e^{-iH(t-t_0)} |\phi_k\rangle \\ &= \boxed{\sum_k c_k e^{-iE_k(t-t_0)} |\phi_k\rangle} && \text{(by Eq.4)} \end{aligned}$$

따라서 $|\psi(t)\rangle, |\psi(t_0)\rangle$ 모두 $\{\phi_k\}$들의 linear combination으로 표현되므로, 각 basis vector에 대한 coefficient를 변경시켜서 state transition을 만들 수 있다. 이 과정은 unitary matrix를 사용하여 표현된다. ($c_k \to c_k e^{-iE_k(t-t_0)}$)

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

where $U(t, t_0) = e^{-iHt}$

Quantum gate

Gate with Hamiltonian

- single qubit system에서 다음의 Hamiltonian을 사용한다고 하자.

$$|\psi\rangle = c_0 |0\rangle + c_1 |1\rangle, \quad H = \alpha I + \beta X$$

- Spectral decomposition으로 H를 표현하면, matrix exponential을 구할 수 있다.

$$\begin{aligned} H &= \alpha(|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|) + \beta(|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|) \\ &= (\alpha+\beta)|+\rangle\langle+| + (\alpha-\beta)|-\rangle\langle-| \end{aligned}$$

- 따라서 Hamiltonian에 exponential을 취하면 다음과 같다.

$$e^{-iHt} = e^{-i\alpha t}[e^{-i\beta t}|+\rangle\langle+| + e^{i\beta t}|-\rangle\langle-|]$$

- Time-dependent Schrödinger equation에 의해, $|\psi(t)\rangle$ state는 다음과 같다.

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-iHt}|\psi(0)\rangle = e^{-iHt}(c_0|0\rangle + c_1|1\rangle) \\ &= e^{-i\alpha t}[e^{-i\beta t}|+\rangle\langle+| + e^{i\beta t}|-\rangle\langle-|](c_0|0\rangle + c_1|1\rangle) \\ &= e^{-i\alpha t}\left[e^{-i\beta t}c_0\frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + e^{i\beta t}c_0\frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\beta t}c_1|+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\beta t}c_1|-\rangle\right] \end{aligned}$$

Controlled-Z gate

- method 1: Hamiltonian

$$H_{C(Z)} \triangleq E(I - Z) \otimes I - Z, \qquad (t = \frac{\pi}{4E})$$

- method 2: Controlled gate

$$C(Z) \triangleq |0\rangle \langle 0| \otimes I + |1\rangle \langle 1| \otimes Z$$

$*$ Proof:
$\Rightarrow$

Controlled-X gate by Hadamard gate,

$$\begin{aligned}(I \otimes H)C(Z)(I \otimes H)^{\dagger} &= |0\rangle \langle 0| \otimes HH^{\dagger} + |1\rangle \langle 1| \otimes HZH^{\dagger} \\ &= |0\rangle \langle 0| \otimes I + |1\rangle \langle 1| \otimes X = \boxed{C(X)}\end{aligned}$$

References

- Lecture notes for EE547: Introduction to Quantum Information Processing (Fall 2024)