

1 Abstrakcyjna teoria kwantów

1.1 Elementy teorii przestrzeni Hilberta

Przez $\mathbb{V} := (V, \mathbb{C}, +, \cdot)$ będziemy oznaczać przestrzeń wektorową nad ciałem liczb zespolonych.

Def 1.1. Odwzorowanie $d : V \times V \mapsto \mathbb{R}$ będziemy nazywać *metryką* w zbiorze $V \neq \emptyset$ iff

- $\forall u, v \in V : d(u, v) \geq 0$, przy czym równość zachodzi iff $u = v$ (*nieujemność*)
- $\forall u, v \in V : d(u, v) = d(v, u)$ (*symetria*)
- $\forall u, v, w \in V : d(u, v) + d(v, w) \geq d(u, w)$ (*nierówność trójkąta*)

Parę $(V, d(\cdot, \cdot))$ będziemy nazywać *przestrzenią metryczną*.

Def 1.2. Niech (V, d) będzie przestrzenią metryczną. Mówimy, iż dany ciąg (u_n) elementów zbioru V jest zbieżny do $g \in V$ tj. $u_n \rightarrow g$ przy $n \rightarrow \infty$ iff $d(u_n, g) \rightarrow 0$ przy $n \rightarrow \infty$.

Def 1.3. Ciąg (u_n) elementów $u_n \in V$ będziemy nazywać *ciągą Cauchy'ego* w przestrzeni metrycznej $(V, d(\cdot, \cdot))$ iff spełnia on kryterium Cauchy'ego tj.

$$\forall \epsilon > 0 : \exists N : \forall n, m > N : d(u_n, u_m) < \epsilon.$$

Tw 1.1. Każdy ciąg zbieżny w przestrzeni metrycznej (V, d) jest ciągiem Cauchy'ego w tej przestrzeni.

Def 1.4. Przestrzeń metryczną $(V, d(\cdot, \cdot))$ nazwiemy *zupełną* iff każdy ciąg Cauchy'ego (u_n) elementów $u_n \in V$ jest zbieżny do granicy $g \in V$.

Def 1.5. Niech \mathbb{V} będzie przestrzenią wektorową. Odwzorowanie $\langle \cdot | \cdot \rangle : V \times V \mapsto \mathbb{C}$ nazwiemy *iloczynem wewnętrznym* wektorów iff

- $\forall u, v \in V : \langle u | v \rangle^* = \langle v | u \rangle$
- $\forall u, v_1, v_2 \in V : \forall \alpha, \beta \in \mathbb{C} : \langle u | \alpha v_1 + \beta v_2 \rangle = \alpha \langle u | v_1 \rangle + \beta \langle u | v_2 \rangle$
- $\forall u \in V : \langle u | u \rangle \geq 0$, przy czym równość zachodzi iff $u = 0$. Zauważmy tutaj, iż z pierwszego aksjomatu $\langle u | u \rangle \in \mathbb{R}$, gdyż $\langle u | u \rangle = \langle u | u \rangle^* \implies \text{Im}\{\langle u | u \rangle\} = 0$.

Parę $(\mathbb{V}, \langle \cdot | \cdot \rangle)$ będziemy nazywać *przestrzenią unitarną*.

Tw 1.2. Każda przestrzeń unitarna jest metryczna z metryką indukowaną przez iloczyn wewnętrzny $d(u, v) := \|u - v\| = \sqrt{\langle u - v | u - v \rangle}$.

Tw 1.3 (*Nierówność Cauchy’ego–Schwarza*). Niech $(\mathbb{V}, \langle \cdot | \cdot \rangle)$ – przestrzeń unitarna. Wówczas

$$\forall u, v \in V : |\langle u | v \rangle|^2 \leq \langle u | u \rangle \langle v | v \rangle .$$

Def 1.6. Przeliczalny zbiór wektorów $\{v_1, \dots, v_n\}$ nazwiemy *ortogonalnym* iff

$$\forall i \neq j; i, j \in \{1, \dots, n\} : \langle v_i | v_j \rangle = 0 .$$

Ten sam zbiór wektorów nazwiemy *ortonormalnym* iff

$$\forall i, j \in \{1, \dots, n\} : \langle v_i | v_j \rangle = \delta_{ij} ,$$

gdzie δ_{ij} jest deltą Kroneckera.

Tw 1.4. Każda przestrzeń unitarna $(\mathbb{V}, \langle \cdot | \cdot \rangle)$ posiada bazę ortonormalną, tj. bazę, której wektory bazowe tworzą zbiór ortonormalny.

Def 1.7. *Przestrzenią Hilberta* $\mathcal{H} = (\mathbb{V}, \langle \cdot | \cdot \rangle)$ nazwiemy zupełną przestrzeń unitarną.

Def 1.8. Niech $\mathcal{H} = (\mathbb{V}, \langle \cdot | \cdot \rangle)$ będzie przestrzenią Hilberta. Odwzorowanie liniowe $F : V \mapsto \mathbb{C}$ nazwiemy *funkcjonałem liniowym* w przestrzeni \mathcal{H} .

Tw 1.5. Niech V^* oznacza zbiór wszystkich funkcyjonałów liniowych $F : V \mapsto \mathbb{C}$. Wówczas $\mathbb{V}^* := (V^*, \mathbb{C}, +, \cdot)$, gdzie

- $\forall F_1, F_2 \in V^* : \forall v \in V : (F_1 + F_2)(v) = F_1(v) + F_2(v)$
- $\forall F \in V^* : \forall \alpha \in \mathbb{C} : \forall v \in V : (\alpha \cdot F)(v) = \alpha F(v)$

jest przestrzenią wektorową, którą nazywamy *przestrzenią dualną*.

Tw 1.6 (*Riesza*). Niech $\mathcal{H} = (\mathbb{V}, \langle \cdot | \cdot \rangle)$ będzie przestrzenią Hilberta, a \mathbb{V}^* jej przestrzenią dualną. Wówczas istnieje wzajemnie jednoznaczne odwzorowanie wektorów $v \in V$ na funkcyjonały liniowe $F \in V^*$. Dodatkowo dla każdego funkcyjonału F istnieje dokładnie jeden wektor $u \in V$ taki, że

$$\forall v \in V : F(v) = \langle u | v \rangle .$$

Def 1.9. *Iloczynem Kroneckera* macierzy $\mathbf{A} = [a_{ij}]_{n \times m}$ i $\mathbf{B} = [b_{ij}]_{n' \times m'}$ nazywamy macierz wymiaru $nn' \times mm'$ postaci

$$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nm} \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} b_{11} & \cdots & b_{1m'} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n'1} & \cdots & b_{n'm'} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11}\mathbf{B} & \cdots & a_{1m}\mathbf{B} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1}\mathbf{B} & \cdots & a_{nm}\mathbf{B} \end{bmatrix}$$

Def 1.10. *Iloczynem tensorowym* przestrzeni Hilberta \mathcal{H}_1 i \mathcal{H}_2 o bazach ortonormalnych odpowiednio $\{\phi_i^{(1)}\}$ i $\{\phi_j^{(2)}\}$ nazywamy przestrzeń Hilberta $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ taką, że:

- Jej bazą ortonormalną jest zbiór $\{\phi_i^{(1)} \otimes \phi_j^{(2)}\}$.
- Iloczyn wewnętrzny w przestrzeni $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ jest zdefiniowany jako

$$\langle \chi_1 \otimes \chi_2 | \psi_1 \otimes \psi_2 \rangle := \langle \chi_1 | \psi_1 \rangle_1 \cdot \langle \chi_2 | \psi_2 \rangle_2 ,$$

gdzie $\chi_i, \psi_i \in \mathcal{H}_i$ to pewne wektory, a $\langle \cdot | \cdot \rangle_i$ to iloczyn wewnętrzny w \mathcal{H}_i .

1.2 Notacja Diraca

Niech \mathcal{H} będzie przestrzenią Hilberta. Wprowadzimy teraz kompaktową notacją wektorów i funkcjonałów liniowych wymyśloną przez P.A.M. Diraca. Aby uprościć zapis, będziemy mówili o wektorach należących do przestrzeni \mathcal{H} (używając nawet symbolu należenia $\in \mathcal{H}$), mając oczywiście formalnie na myśli wektory należące do zbioru V .

Wektory należące do \mathcal{H} będziemy oznaczać jako

$$|\psi\rangle, |\phi\rangle, \dots,$$

przy czym $|\cdot\rangle$ to tzw. *ket* i formalnie jest to odwzorowanie $|\cdot\rangle : S \mapsto V$, gdzie S jest zbiorem znaków, których używamy do oznaczenia konkretnych wektorów ze zbioru V . Nie będziemy jednak przestrzegali tego formalnego znaczenia, utożsamiając dla wygody również sam symbol z wektorem.

Funkcjonały liniowe należące do przestrzeni dualnej będziemy oznaczać jako

$$\langle\psi|, \langle\phi|, \dots,$$

przy czym $\langle\cdot|$ to tzw. *bra* i formalnie jest to odwzorowanie $\langle\cdot| : S^* \mapsto V^*$, gdzie S^* jest zbiorem znaków, których używamy do oznaczenia konkretnych funkcjonałów ze zbioru V^* . Ponieważ z tw. Riesz istnieje wzajemnie jednoznaczne odwzorowanie funkcjonałów liniowych na wektory, więc możemy utożsamiać $S^* = S$.

1.3 Skończenie wymiarowa przestrzeń Hilberta nad ciałem liczb zespolonych

Rozważymy teraz konstrukcję skończenia wymiarowej przestrzeni Hilberta złożonej ze skończenia wymiarowej przestrzeni wektorowej $V = (\mathbb{C}^n, \mathbb{C}, +, \cdot)$, której

elementy będziemy w danej bazie *ortonormalnej* $\{\phi_1, \dots, \phi_n\}$ zapisywać jako

$$\mathbb{V} \ni |\psi\rangle = \sum_{i=1}^n a_i |\phi_i\rangle = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix},$$

gdzie $a_i = \langle \phi_i | \psi \rangle \in \mathbb{C}$ oraz iloczynu wewnętrznego zdefiniowanego jako

$$\left\langle \sum_{i=1}^n a_i |\phi_i\rangle \left| \sum_{i=1}^n b_i |\phi_i\rangle \right. \right\rangle := \sum_{i=1}^n a_i^* b_i.$$

Powstała w ten sposób skończenie wymiarowa przestrzeń unitarna jest trywialnie zupełna, a zatem skonstruowaliśmy skończenie wymiarową przestrzeń Hilberta. Wektor w tej przestrzeni możemy utożsamić (poprzez iloczyn wewnętrzny) z macierzą kolumnową jego współrzędnych w danej bazie ortonormalnej. Jasne jest również czym jest funkcjonal liniowy stowarzyszony z danym wektorem

$$\langle \psi | = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}^\dagger = [a_1^* \quad \dots \quad a_n^*],$$

gdzie \dagger oznacza *sprzężenie hermitowskie* macierzy, tj. sprzężoną macierz transponowaną. W dalszej części skupimy się głównie na skończeniu wymiarowych przestrzeniach Hilberta $((\mathbb{C}^n, \mathbb{C}, +, \cdot), \langle \cdot | \cdot \rangle)$, gdyż stanowią one podstawę opisu teorii obliczeń kwantowych i kwantowej teorii informacji. Należy zdawać sobie jednak sprawę, iż stanowi to duże uproszczenie w stosunku do wymagań pełnoprawnych teorii fizycznych (mechanika falowa, kwantowa teoria pola), w których niezbędna jest teoria nieskończenie wymiarowych przestrzeni Hilberta.

1.4 Elementy teorii operatorów liniowych

Def 1.11. *Operatorem liniowym* \mathbf{A} w przestrzeni $\mathcal{H} = (\mathbb{V}, \langle \cdot | \cdot \rangle)$ nazywamy odwzorowanie liniowe

$$\mathbf{A} : D(\mathbf{A}) \mapsto D(\mathbf{A}),$$

gdzie $D(\mathbf{A})$ jest pewną podprzestrzenią wektorową przestrzeni \mathbb{V} . Dodatkowo zakładamy, iż dziedziny operatorów są gęste, to znaczy ich domknięcia są równe \mathcal{H} .

Zgodnie z wcześniejszymi komentarzami nie będziemy wnikali w subtelne problemy wynikające z faktu, iż w nieskończenie wymiarowej przestrzeni Hilberta pojęcie operatora liniowego jest nieodłącznie związane z pojęciem dziedziny tego

operatora, który w ogólności nie jest określony na całej przestrzeni Hilberta, a tylko na pewnym jej podzbiorze. Komplikacje te nie występują w skończone wymiarowych przestrzeniach Hilberta wymiaru n , w których operatory liniowe możemy utożsamiać z *endomorfizmami* tej przestrzeni

$$\mathbf{A} : V \mapsto V .$$

Jak wiadomo z elementarnej algebry w przypadku n -wymiarowej przestrzeni wektorowej każdemu endomorfizmowi \mathbf{A} możemy przyporządkować macierz wymiaru $n \times n$, której elementy w danej bazie ortonormalnej $\{\phi_1, \dots, \phi_n\}$ są dane przez wartości \mathbf{A} na wektorach bazowych

$$\begin{aligned} \mathbf{A} |\phi_1\rangle &= A_{11} |\phi_1\rangle + A_{21} |\phi_2\rangle + \dots + A_{n1} |\phi_n\rangle \\ &\vdots \\ \mathbf{A} |\phi_n\rangle &= A_{1n} |\phi_1\rangle + A_{2n} |\phi_2\rangle + \dots + A_{nn} |\phi_n\rangle \end{aligned} ,$$

skąd element A_{ij} macierzy \mathbf{A} w bazie ortonormalnej $\{\phi_i\}$ jest dany przez

$$A_{ij} = \langle \phi_i | \mathbf{A} | \phi_j \rangle .$$

Def 1.12. *Sprzężeniem* operatora \mathbf{A} nazywamy operator \mathbf{A}^\dagger zdefiniowany (pomijając wszelkie problemy związane z określeniem dziedzin operatorów) przez równanie

$$\forall \psi, \phi \in \mathcal{H} : \langle \psi | \mathbf{A}^\dagger | \phi \rangle = \langle \phi | \mathbf{A} | \psi \rangle^* .$$

Podstawiając w miejsce wektorów ψ, ϕ wektory bazy otrzymujemy (w przypadku skończone wymiarowych przestrzeni Hilberta) zależność między macierzą \mathbf{A} i jej sprzężeniem hermitowskim \mathbf{A}^\dagger

$$A_{ij}^\dagger = A_{ji}^* .$$

Def 1.13. *Komutatorem* operatorów \mathbf{A}, \mathbf{B} operator $[\mathbf{A}, \mathbf{B}]$ zdefiniowany jako

$$\forall \psi \in D : [\mathbf{A}, \mathbf{B}] \psi = \mathbf{A} \mathbf{B} \psi - \mathbf{B} \mathbf{A} \psi .$$

Jeśli $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{0}$ (gdzie $\mathbf{0}$ oznacza *operator zerowy* $\mathbf{0} \psi = 0$), to mówimy, że operatory \mathbf{A}, \mathbf{B} *komutują*.

Def 1.14. *Antykomutatorem* operatorów \mathbf{A}, \mathbf{B} nazywamy operator $\{\mathbf{A}, \mathbf{B}\}$ zdefiniowany jako

$$\{\mathbf{A}, \mathbf{B}\} \psi := \mathbf{A} \mathbf{B} \psi + \mathbf{B} \mathbf{A} \psi .$$

Tw 1.7. Dla dowolnych operatorów $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$ zakładając odpowiednie dziedziny, zachodzi:

- $[\mathbf{A} + \mathbf{B}, \mathbf{C}] = [\mathbf{A}, \mathbf{C}] + [\mathbf{B}, \mathbf{C}]$;
- $[\mathbf{AB}, \mathbf{C}] = \mathbf{A}[\mathbf{B}, \mathbf{C}] + [\mathbf{A}, \mathbf{C}]\mathbf{B}$.
- $[[\mathbf{A}, \mathbf{B}], \mathbf{C}] + [[\mathbf{B}, \mathbf{C}], \mathbf{A}] + [[\mathbf{C}, \mathbf{A}], \mathbf{B}] = \mathbf{0}$ (*tożsamość Jacobiego*)

Def 1.15. Ślad operatora \mathbf{A} definiujemy jako liczbę $\text{Tr } \mathbf{A} \in \mathbb{C}$ równą

$$\text{Tr } \mathbf{A} := \sum_i \langle \phi_i | \mathbf{A} | \phi_i \rangle ,$$

gdzie $\{\phi_i\}$ jest dowolną ortonormalną bazą przestrzeni \mathcal{H} .

Tw 1.8. Ślad operatora nie zależy od wyboru ortonormalnej bazy przestrzeni Hilberta.

Tw 1.9. Podstawowe własności śladu.

- Operacja wzięcia śladu operatora jest liniowa tj.

$$\text{Tr}(\alpha \mathbf{A} + \beta \mathbf{B}) = \alpha \text{Tr}(\mathbf{A}) + \beta \text{Tr}(\mathbf{B}) .$$

- Dla dowolnych operatorów $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$ zachodzi

$$\text{Tr } \mathbf{ABC} = \text{Tr } \mathbf{BCA} = \text{Tr } \mathbf{CAB} .$$

- $\text{Tr } \mathbf{A} = (\text{Tr } \mathbf{A}^\dagger)^*$
- $\det\{e^{\mathbf{A}}\} = e^{\text{Tr } \mathbf{A}}$

Def 1.16 (*Funkcja operatora*). Niech $f(x) : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}$ będzie funkcją zmiennej rzeczywistej taką, że istnieje szereg potęgowy

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{n!} x^n ,$$

który jest zbieżny jednostajnie na \mathbb{R} do f . Wówczas funkcję operatora $f(\mathbf{A})$ definiujemy jako

$$f(\mathbf{A}) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{n!} \mathbf{A}^n ,$$

gdzie przyjmujemy $\mathbf{A}^0 := \mathbf{I}$. W szczególności mamy

- $\exp(\mathbf{A}) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \mathbf{A}^n$

- $\sin(\mathbf{A}) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \mathbf{A}^{2n+1}$
- $\cos(\mathbf{A}) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!} \mathbf{A}^{2n}$

W teorii kwantowej główną rolę odgrywają trzy rodziny operatorów: operatory samosprężone, rzutowe i unitarne.

Def 1.17. *Operatorem samosprężonym* (pomijając wszelkie problemy związane z określeniem dziedzin operatorów) nazywamy operator \mathbf{A} , dla którego $\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger$.

W przypadku skończone wymiarowych przestrzeni Hilberta definicja ta jest pełna, a operatory samosprężone możemy utożsamiać z macierzami hermitowskimi tj. macierzami, których elementy spełniają związek

$$A_{ij} = A_{ji}^*.$$

W przypadku nieskończone wymiarowych przestrzeni Hilberta definicja ta jest niepełna gdyż trzeba mieć świadomość, iż równość operatorów oznacza z definicji równość ich dziedzin, co wymaga wprowadzenia rozróżnienia między operatorami jedynie *symetrycznymi* (tj. spełniającymi równość $\langle \psi | \mathbf{A} | \phi \rangle = \langle \phi | \mathbf{A} | \psi \rangle^*$ dla dowolnych $\psi, \phi \in D(\mathbf{A})$), a operatorami samosprężonymi.

Operatory samosprężone odgrywają wyróżnioną rolę w teorii kwantowej ze względu na trzy twierdzenia, które są dla nich spełnione.

Tw 1.10. Wartości własne operatora samosprężonego są liczbami rzeczywistymi.

Tw 1.11. Zbiór wektorów własnych operatora samosprężonego rozpiną przestrzeń \mathcal{H} .

Tw 1.12. Jeśli widmo operatora samosprężonego nie jest zdegenerowane, to wektory własne tworzą zbiór ortogonalny.

Def 1.18. *Operatorem rzutowym* nazywamy operator \mathbf{P} taki, że $\mathbf{P} = \mathbf{P}^\dagger$ (samosprężoność) i $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$ (idempotentność).

Ważnym przykładem operatora rzutowego jest operator rzutowania na jednowymiarową podprzestrzeń rozpiętą na unormowanym wektorze $|\phi\rangle$ (rzutowanie na kierunek wektora ϕ), który w notacji Diraca możemy zapisać jako $\mathbf{P} = |\phi\rangle \langle \phi|$ tj. $\forall \psi : \mathbf{P}(\psi) = \langle \phi | \psi \rangle \phi$. Jest to oczywiście operator liniowy, gdyż dla dowolnych wektorów $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ i skalarów α, β mamy

$$\begin{aligned} |\phi\rangle \langle \phi| (\alpha |\psi_1\rangle + \beta |\psi_2\rangle) &= |\phi\rangle \langle \phi | \alpha \psi_1 + \beta \psi_2 \rangle \\ &= \alpha |\phi\rangle \langle \phi | \psi_1 \rangle + \beta |\phi\rangle \langle \phi | \psi_2 \rangle. \end{aligned}$$

Jest również idempotentny, gdyż

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

z założenia $\langle\phi|\phi\rangle = 1$ oraz samosprzężony

$$(\langle\psi_1|\phi\rangle \langle\phi|\psi_2\rangle)^* = \langle\psi_1|\phi\rangle^* \langle\phi|\psi_2\rangle^* = \langle\phi|\psi_1\rangle \langle\psi_2|\phi\rangle = \langle\psi_2|\phi\rangle \langle\phi|\psi_1\rangle .$$

Łatwo pokazać również, iż jeśli $\{\phi_i\}$ jest ortonormalnym zbiorem wektorów, to

$$\mathbf{P} = \sum_i |\phi_i\rangle \langle\phi_i|$$

jest operatorem rzutowym. W szczególności, jeśli $\{\phi_i\}$ jest ortonormalną bazą przestrzeni \mathcal{H} , to

$$\sum_i |\phi_i\rangle \langle\phi_i| = \mathbf{I} .$$

Def 1.19. *Operatorem unitarnym* nazywamy operator \mathbf{U} taki, że

$$\mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{U}^\dagger\mathbf{U} = \mathbf{I} .$$

Przekształcenia unitarne reprezentowane przez operatory unitarne mają użyteczną własność polegającą na zachowywaniu wartości iloczynu wewnętrznego dwóch wektorów, a zatem w szczególności normy wektora

$$\langle\mathbf{U}\psi|\mathbf{U}\phi\rangle = \langle\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U}\psi|\phi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle .$$

Tw 1.13 (*spektralne*). Niech \mathcal{H} będzie przestrzenią Hilberta. Dla każdego samosprężonego operatora liniowego \mathbf{A} w \mathcal{H} istnieje unikalna rodzina operatorów rzutowych $\mathbf{P}(\lambda)$ indeksowanych ciągłym parametrem $\lambda \in \mathbb{R}$ taka, że

- $\mathbf{P}(\lambda_1)\mathbf{P}(\lambda_2) = \mathbf{P}(\min(\lambda_1, \lambda_2))$
- $\forall \lambda : \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \mathbf{P}(\lambda + \epsilon) = \mathbf{P}(\lambda)$
- $\lim_{\lambda \rightarrow -\infty} \mathbf{P}(\lambda) = \mathbf{0}$
- $\lim_{\lambda \rightarrow +\infty} \mathbf{P}(\lambda) = \mathbf{I}$
- $\mathbf{A} = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d\mathbf{P}(\lambda)$

gdzie ostatnia całka to tzw. *całka Riemanna–Stieltjesa* względem miary operatorowej zdefiniowana jako

$$\int_a^b f(x) d\sigma(x) := \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^n f(x_k) [\sigma(x_k) - \sigma(x_{k-1})] ,$$

dla

$$f : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}, \quad \sigma : \mathbb{R} \mapsto X ,$$

gdzie $[a; b] = \bigcup_{k=1}^n [x_{k-1}; x_k]$ jest podziałem normalnym odcinka $[a; b]$. Dodatkowo dla dowolnej funkcji operatora f zachodzi

$$f(\mathbf{A}) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\lambda) d\mathbf{P}(\lambda) .$$

W szczególnym przypadku, gdy operator samosprężony \mathbf{A} ma niezdegenerowane widmo $\{\lambda_i\}$ będące zbiorem przeliczalnym, wiemy, że zbiór unormowanych wektorów własnych $\{\phi_i\}$ jest bazą ortonormalną przestrzeni \mathcal{H} , czyli dla dowolnego wektora $\psi \in \mathcal{H}$ możemy zapisać

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\phi_i\rangle = \sum_i \langle \phi_i | \psi \rangle |\phi_i\rangle ,$$

gdzie $c_i = \langle \phi_i | \psi \rangle \in \mathbb{C}$ to współrzędne wektora w zadanej bazie. Działając operatorem \mathbf{A} na wektor ψ mamy

$$\mathbf{A}|\psi\rangle = \sum_i \langle \phi_i | \psi \rangle \mathbf{A}|\phi_i\rangle = \sum_i \langle \phi_i | \psi \rangle \lambda_i |\phi_i\rangle = \left(\sum_i \lambda_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| \right) |\psi\rangle .$$

Całka Stieltjesa z twierdzenia spektralnego przechodzi więc w tym przypadku w sumę (być może nieskończoną) operatorów rzutowych rzutujących na jednowymiarowe podprzestrzenie rozpięte na kolejnych wektorach własnych operatora

$$\mathbf{A} = \sum_i \lambda_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| .$$

1.5 Postulaty teorii kwantów

Poniżej przedstawiono postulaty ogólnej, abstrakcyjnej teorii kwantów. Postulaty te obowiązują we wszystkich realizacjach teorii kwantów np. mechanice falowej, czy kwantowej teorii pola, jednak ze względu na swój ogólny charakter same w sobie nie dostarczają narzędzi do rozwiązywania żadnych konkretnych problemów fizycznych. Nie należy ich również traktować jako podstaw do aksjomatyzacji teorii kwantowej. Stanowią one raczej sposób uporządkowania w spójną strukturę wiedzy dotyczącej konkretnych realizacji teorii kwantów

- I. **O modelu matematycznym.** Modelem matematycznym teorii kwantów jest teoria przestrzeni Hilberta nad ciałem liczb zespolonych i teoria operatorów liniowych działających w tej przestrzeni.
- II. **O pytaniach elementarnych.** Pytaniem elementarnym nazwiemy pytanie, na które odpowiedź może brzmieć jedynie „TAK” lub „NIE”. Pytanie elementarne nazwiemy rozstrzygalnym w obrębie danej teorii kwantowej iff istnieje wzajemnie jednoznaczne przyporządkowanie tego pytania do pewnego operatora rzutowego \mathbf{P} . Będziemy wówczas mówili, iż dane pytanie elementarne jest reprezentowane przez \mathbf{P} . Każde pytanie elementarne reprezentowane przez \mathbf{P} można zanegować otrzymując pytanie reprezentowane przez $\mathbf{I} - \mathbf{P}$ (zauważmy, że $(\mathbf{I} - \mathbf{P})^2 = \mathbf{I} - \mathbf{P}$), natomiast dwa pytania elementarne reprezentowane przez \mathbf{P}_1 i \mathbf{P}_2 można połączyć spójnikiem
 - „I”; otrzymując pytanie reprezentowane przez $\mathbf{P}_1 \mathbf{P}_2$, przy czym z oczywistych względów musi zachodzić $[\mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2] = \mathbf{0}$
 - „LUB”; otrzymując pytanie reprezentowane przez $\mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2$, przy czym musi zachodzić $\mathbf{P}_1 \mathbf{P}_2 = \mathbf{0}$ (istotnie $(\mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2)^2 = \mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2$).

- III. **O stanach układu.** Stan prostego układu fizycznego jest reprezentowany przez unormowany wektor $|\Psi\rangle$ w abstrakcyjnej przestrzeni Hilberta $\mathcal{H} = (\mathbb{V}, \langle \cdot | \cdot \rangle)$, przy czym utożsamiamy ze sobą wektory różniące się jedynie globalnym czynnikiem fazowym tj. $|\Psi\rangle \cong e^{i\alpha} |\Psi\rangle$ dla $\alpha \in \mathbb{R}$.
- IV. **O prawdopodobieństwach.** Teoria kwantowa dostarcza jedynie probabilistycznych odpowiedzi na rozstrzygalne pytania elementarne. Prawdopodobieństwo p , iż odpowiedź na pytanie elementarne reprezentowane przez \mathbf{P} jest twierdząca, dla układu reprezentowanego przez Ψ wynosi

$$p = \langle \Psi | \mathbf{P} | \Psi \rangle .$$

Zauważmy, iż trywialnie $p \in \mathbb{R}$ oraz z nierówności Cauchy'ego–Schwarza mamy

$$p^2 \leq \langle \Psi | \Psi \rangle \langle \mathbf{P} \Psi | \mathbf{P} \Psi \rangle = \langle \Psi | \mathbf{P}^2 | \Psi \rangle = p ,$$

skąd $p(p - 1) \leq 0$, czyli $p \in [0; 1]$.

- V. **O wielkościach fizycznych.** Każda wielkość fizyczna A występująca w danej teorii kwantowej jest reprezentowana przez samosprężony operator liniowy \mathbf{A} i stowarzyszoną z nim na mocy twierdzenia spektralnego rodzinę operatorów rzutowych $\mathbf{P}_A(\lambda)$. Operator rzutowy $\mathbf{P}_A(\lambda)$ reprezentuje pytanie: *czy wielkość fizyczna A ma wartość nie większą od λ ?*, natomiast operator rzutowy $\mathbf{I} - \mathbf{P}_A(\lambda)$: *czy wielkość fizyczna A ma wartość większą od λ ?* Na mocy postulatu drugiego możemy skonstruować pytanie: *czy wielkość fizyczna A ma wartość z przedziału $(\lambda_1; \lambda_2]$?*, reprezentowane przez operator

$$(\mathbf{I} - \mathbf{P}_A(\lambda_1))\mathbf{P}_A(\lambda_2) = \mathbf{P}_A(\lambda_2) - \mathbf{P}_A(\lambda_1) .$$

Wartość oczekiwaną wielkości A dla układu reprezentowanego przez Ψ obliczamy jako

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | \mathbf{A} | \Psi \rangle .$$

- VI. **O ewolucji układu w czasie.** Prawdopodobieństwo p odpowiedzi twierdzącej na pytanie \mathbf{P} dla układu reprezentowanego przez Ψ ewoluuje w czasie zgodnie z

$$p(t) = \langle \Psi(t) | \mathbf{P} | \Psi(t) \rangle ,$$

gdzie wektory stanu $|\Psi\rangle$ ewoluują zgodnie z *równaniem Schrödingera*

$$\mathbf{H} |\Psi\rangle = i\hbar \partial_t |\Psi\rangle ,$$

gdzie $\mathbf{H}(t)$ jest specjalnym operatorem samosprężonym (zwanym operatorem Hamiltona lub po prostu hamiltonianem) reprezentującym hamiltonian

układu, tworzonym wedle określonych reguł w danej realizacji teorii kwantów, natomiast \hbar to stała fizyczna o wymiarze działania

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054571817 \dots \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

zwana *zredukowaną stałą Plancka*.

VII. **O układach złożonych.** Przestrzeń Hilberta \mathcal{H} układu złożonego ma strukturę iloczynu tensorowego przestrzeni Hilberta układów prostych wchodzących w jego skład $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_n$.

1.6 Zasada nieoznaczoności

Niech A będzie pewną wielkością fizyczną reprezentowaną przez operator \mathbf{A} . Zdefiniujmy odchylenie standardowe $\sigma_A \geq 0$ wielkości A dla układu w stanie Ψ jako

$$\sigma_A^2 := \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle (\mathbf{A} - a)\Psi | (\mathbf{A} - a)\Psi \rangle ,$$

gdzie $a = \langle A \rangle$ jest wartością oczekiwaną wielkości A . Dla dowolnych dwóch wielkość fizycznych A i B w układzie reprezentowanym przez Ψ mamy z nierówności Cauchy'ego–Schwarza

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq |\langle (\mathbf{A} - a)\Psi | (\mathbf{B} - b)\Psi \rangle|^2 .$$

Jednocześnie dla dowolnego $z = x + iy \in \mathbb{C}$ mamy

$$|z|^2 = x^2 + y^2 = \left(\frac{z + z^*}{2} \right)^2 + \left(\frac{z - z^*}{2i} \right)^2 .$$

Z powyższego mamy więc

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left[\frac{1}{2i} (\langle \mathbf{A}\Psi | \mathbf{B}\Psi \rangle - \langle \mathbf{B}\Psi | \mathbf{A}\Psi \rangle) \right]^2 + \left[\frac{1}{2} (\langle \mathbf{A}\Psi | \mathbf{B}\Psi \rangle + \langle \mathbf{B}\Psi | \mathbf{A}\Psi \rangle) \right]^2 ,$$

gdzie $\mathbf{A} := \mathbf{A} - a$, $\mathbf{B} := \mathbf{B} - b$. Jednocześnie

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{A}\Psi | \mathbf{B}\Psi \rangle - \langle \mathbf{B}\Psi | \mathbf{A}\Psi \rangle &= \langle \Psi | (\mathbf{A}\mathbf{B} | \Psi) - \mathbf{B}\mathbf{A} | \Psi \rangle = \\ \langle \Psi | [\mathbf{A}, \mathbf{B}] | \Psi \rangle &= \langle \Psi | [\mathbf{A}, \mathbf{B}] | \Psi \rangle . \end{aligned}$$

oraz

$$\langle \mathbf{A}\Psi | \mathbf{B}\Psi \rangle + \langle \mathbf{B}\Psi | \mathbf{A}\Psi \rangle = \langle \Psi | \{ \mathbf{A}, \mathbf{B} \} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \{ \mathbf{A}, \mathbf{B} \} | \Psi \rangle - 2 \langle A \rangle \langle B \rangle$$

Ostatecznie otrzymujemy więc

$$\boxed{\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle \Psi | [\mathbf{A}, \mathbf{B}] | \Psi \rangle \right)^2 + \left(\frac{1}{2} \langle \Psi | \{ \mathbf{A}, \mathbf{B} \} | \Psi \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle \right)^2} .$$

Powyższą nierówność nazywamy *uogólnioną zasadą nieoznaczoności*.

1.7 Twierdzenie Ehrenfesta

Niech A będzie pewną wielkością fizyczną reprezentowaną przez operator \mathbf{A} , wówczas

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{d}{dt} \langle \Psi | \mathbf{A} \Psi \rangle = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial t} \middle| \mathbf{A} \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \middle| \mathbf{A} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle + \left\langle \Psi \middle| \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \Psi \right\rangle .$$

Jednocześnie z równania Schrödingera mamy $\mathbf{H}\Psi = i\hbar\partial_t\Psi$, skąd

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle \mathbf{H}\Psi | \mathbf{A} \Psi \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | \mathbf{A} \mathbf{H}\Psi \rangle + \langle \Psi | \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} | \Psi \rangle ,$$

ale ze względu na fakt, iż \mathbf{H} jest operatorem samosprzężonym mamy

$$\boxed{\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \langle \Psi | \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} | \Psi \rangle + \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | [\mathbf{H}, \mathbf{A}] | \Psi \rangle} .$$

Powyższe równanie nazywamy *twierdzeniem Ehrenfesta*.

1.8 Kwantowe układy dwupoziomowe

Przedstawimy teraz ważną realizację abstrakcyjnej teorii kwantów – teorię układów dwupoziomowych, które stanowią podstawę teorii obliczeń kwantowych i kwantowej teorii informacji. Modelem matematycznym tej teorii jest skończenie wymiarowa przestrzeń Hilberta

$$\mathcal{H} = ((\mathbb{C}^2, \mathbb{C}, +, \cdot), \langle \cdot | \cdot \rangle)$$

i teoria operatorów liniowych w tej przestrzeni, które możemy utożsamiać z zespolonymi macierzami 2×2 .

1.8.1 Macierze Pauliego

Macierze Pauliego definiujemy jako zespolone macierze 2×2

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

Przydatne jest zdefiniowanie *wektora macierzy Pauliego* $\boldsymbol{\sigma}$

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

dzięki któremu możemy łatwo zapisać sumę przeskalowanych macierzy Pauliego jako $\mathbf{c} \cdot \boldsymbol{\sigma}$, gdzie $\mathbf{c} \in \mathbb{C}^3$ jest pewnym wektorem o elementach zespolonych. Wybrane własności macierzy Pauliego:

- $\det \mathbf{X} = \det \mathbf{Y} = \det \mathbf{Z} = -1$
- $\text{Tr } \mathbf{X} = \text{Tr } \mathbf{Y} = \text{Tr } \mathbf{Z} = 0$
- $\mathbf{X}^2 = \mathbf{Y}^2 = \mathbf{Z}^2 = \mathbf{I}$
- Iloczyny macierzy Pauliego spełniają związki

$$\begin{aligned}\mathbf{XY} &= i\mathbf{Z} = -\mathbf{YX} \\ \mathbf{YZ} &= i\mathbf{X} = -\mathbf{ZY} \\ \mathbf{ZX} &= i\mathbf{Y} = -\mathbf{XZ}\end{aligned}.$$

- Komutatory i antykomutatory macierzy Pauliego wynoszą

$$\begin{aligned}[\mathbf{X}, \mathbf{Y}] &= 2i\mathbf{Z}, & \{\mathbf{X}, \mathbf{Y}\} &= \mathbf{0} \\ [\mathbf{Y}, \mathbf{Z}] &= 2i\mathbf{X}, & \{\mathbf{Y}, \mathbf{Z}\} &= \mathbf{0} \\ [\mathbf{Z}, \mathbf{X}] &= 2i\mathbf{Y}, & \{\mathbf{Z}, \mathbf{X}\} &= \mathbf{0}\end{aligned}.$$

- Iloczyn $(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \cdot (\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma})$ dla $\mathbf{a} = (a_x, a_y, a_z)$, $\mathbf{b} = (b_x, b_y, b_z)$ wynosi

$$\begin{aligned}(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \cdot (\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}) &= (a_x \mathbf{X} + a_y \mathbf{Y} + a_z \mathbf{Z})(b_x \mathbf{X} + b_y \mathbf{Y} + b_z \mathbf{Z}) \\ &= (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})\mathbf{I} + i(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot \boldsymbol{\sigma}.\end{aligned}$$

- Wielkość $\exp(i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma})$ wynosi

$$\exp(i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{I} \cos |\mathbf{a}| + i \left(\frac{\mathbf{a}}{|\mathbf{a}|} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right) \sin |\mathbf{a}|.$$

Zauważmy, że dowolny operator samosprężony \mathbf{A} w rozpatrywanej przestrzeni \mathcal{H} ma postać

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_0 + a_z & a_x - ia_y \\ a_x + ia_y & a_0 - a_z \end{bmatrix} = a_0 \mathbf{I} + \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma},$$

gdzie $a_0, a_x, a_y, a_z \in \mathbb{R}$. Jednocześnie bez straty ogólności możemy przyjąć $a_0 = 0$, gdyż stała ta przesunęła jedynie widmo operatora \mathbf{A} o ustaloną wartość, co pozwala przedstawić dowolny operator samosprężony jako wektor \mathbf{a} w trójwymiarowej przestrzeni.

1.8.2 Sfera Blocha

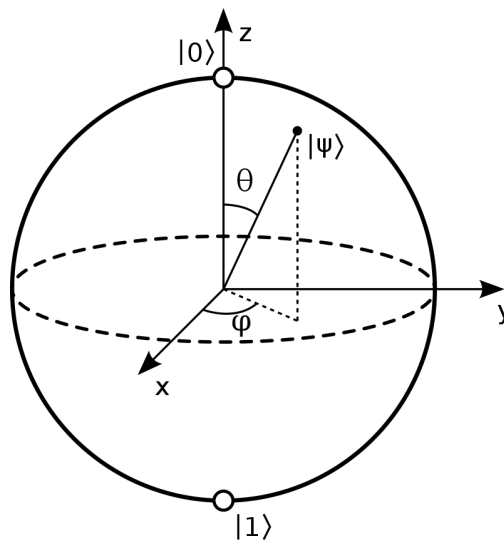
W trójwymiarowej przestrzeni możemy również przedstawić wektor stanu Ψ . Istotnie wektor stanu jest określony przez 2 zmienne zespolone

$$|\Psi\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix},$$

czyli 4 zmienne rzeczywiste, ale ze względu na warunek unormowania $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ mamy tylko 3 zmienne niezależne. Dodatkowo pamiętając, iż globalna faza wektora stanu nie ma znaczenia możemy wyeliminować jeszcze jedną zmienną i zapisać wektor Ψ jako

$$|\Psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle$$

dla pewnych parametrów $\phi, \theta \in \mathbb{R}$. Powyżej wektory bazy ortonormalnej oznaczyliśmy jako $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ zgodnie z oznaczeniami stosowanymi w teorii obliczeń kwantowych (w szczególności $|0\rangle$ *nie oznacza* w powyższej notacji wektora zerowego $\mathbf{0}$). Zmienne ϕ, θ możemy interpretować odpowiednio jako kąt azymutalny i kąt zenitalny punktu na sferze jednostkowej, którą nazywamy *sferą Blocha*. Zauważmy, iż przy wybranej parametryzacji bieguny sfery określają odpowiednio stany $|0\rangle$ i $|1\rangle$.



Rysunek 1: Sfera Blocha

Możemy połączyć oba przedstawienia tj. przedstawienia operatora i wektora stanu jeśli tylko zamiast wektora stanu użyjemy operatora rzutowania na stan Ψ .

Możemy rozłożyć go wówczas (jak każdy operator samosprężony) na macierze Pauliego

$$|\Psi\rangle\langle\Psi| = s_0\mathbf{I} + \mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\sigma},$$

przy czym parametry s_0, s_x, s_y, s_z muszą spełniać

$$|\Psi\rangle\langle\Psi|\Psi\rangle\langle\Psi| = |\Psi\rangle\langle\Psi|,$$

czyli

$$s_0\mathbf{I} + \mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\sigma} = (s_0^2 + |\mathbf{s}|^2)\mathbf{I} + 2s_0\mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\sigma},$$

skąd $s_0 = |\mathbf{s}| = 1/2$. Operator rzutowania $|\Psi\rangle\langle\Psi|$ możemy zatem w ogólności rozłożyć na macierze Pauliego w następujący sposób

$$|\Psi\rangle\langle\Psi| = \frac{1}{2}(\mathbf{I} + \mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\sigma}),$$

gdzie przeskalowaliśmy zmienne s_x, s_y, s_z tak, że teraz $|\mathbf{s}| = 1$.

Widzimy więc, iż stan Ψ możemy reprezentować jako wektor \mathbf{s} określający punkt na sferze jednostkowej w trójwymiarowej przestrzeni, a operator samosprężony jako dowolny wektor \mathbf{a} w tej przestrzeni. Przejście od rzeczywistego wektora \mathbf{s} do abstrakcyjnego wektora stanu $|\Psi\rangle$ odbywa się poprzez określenie współrzędnych sferycznych (θ, ϕ) wektora \mathbf{s} i zmapowanie ich zgodnie z przepisem

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

1.8.3 Ewolucja układu dwupoziomowego

Dla układów dwupoziomowych ogólne równania ewolucji amplitud prawdopodobieństwa wektora stanu

$$|\Psi\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$$

dla hamiltonianu postaci

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} H_{11}(t) & H_{12}(t) \\ H_{21}(t) & H_{22}(t) \end{bmatrix}$$

mają postać

$$\begin{cases} i\hbar\dot{\alpha} = H_{11}(t)\alpha + H_{12}(t)\beta \\ i\hbar\dot{\beta} = H_{21}(t)\alpha + H_{22}(t)\beta \end{cases}$$

Równanie ewolucji możemy zapisać również wykorzystując przedstawienie geometryczne wektorów stanu i operatorów na sferze Blocha. Istotnie różniczkując

operator rzutowy $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ mamy

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho}{\partial t} &= \left|\dot{\Psi}\right\rangle\langle\Psi| + |\Psi\rangle\left\langle\dot{\Psi}\right| = \frac{1}{i\hbar}|\mathbf{H}\Psi\rangle\langle\Psi| - \frac{1}{i\hbar}|\Psi\rangle\langle\mathbf{H}\Psi| \\ &= \frac{1}{i\hbar}(\mathbf{H}\rho - \rho\mathbf{H}) = \frac{1}{i\hbar}[\mathbf{H}, \rho].\end{aligned}$$

Z powyższego mamy więc dla $\rho = \frac{1}{2}(\mathbf{I} + \mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\sigma})$ i $\mathbf{H} = \mathbf{H}(t) \cdot \boldsymbol{\sigma}$

$$\boxed{\frac{\hbar}{2}\dot{\mathbf{s}} = \mathbf{H}(t) \times \mathbf{s}}$$

Przedstawienie geometryczne wektora stanu na sferze Blocha nie jest jedynie obserwacją matematyczną. Pozwala ono zwizualizować semi-klasyczną ewolucję wektorowej wielkości fizycznej \mathbf{S} ¹, której składowe S_x, S_y, S_z są w przestrzeni \mathcal{H} reprezentowane przez samosprężone operatory Pauliego $\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z}$. Istotnie zgodnie z twierdzeniem Ehrenfesta

$$\frac{d\langle\mathbf{S}\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle\Psi|[\mathbf{H}, \boldsymbol{\sigma}]|\Psi\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle\Psi|([\mathbf{H}, \mathbf{X}], [\mathbf{H}, \mathbf{Y}], [\mathbf{H}, \mathbf{Z}])|\Psi\rangle.$$

Jednocześnie dla $\mathbf{H} = \mathbf{H} \cdot \boldsymbol{\sigma}$

$$\boxed{\begin{aligned}[\mathbf{H}, \mathbf{X}] &= -2iH_y\mathbf{Z} + 2iH_z\mathbf{Y} \\ [\mathbf{H}, \mathbf{Y}] &= -2iH_z\mathbf{X} + 2iH_x\mathbf{Z} \\ [\mathbf{H}, \mathbf{Z}] &= -2iH_x\mathbf{Y} + 2iH_y\mathbf{X}\end{aligned}},$$

skąd

$$\frac{\hbar}{2}\frac{d\langle\mathbf{S}\rangle}{dt} = \mathbf{H} \times \langle\mathbf{S}\rangle.$$

Widzimy zatem, iż ruch wektora \mathbf{s} po sferze Blocha odpowiada ewolucji wartości oczekiwanej wielkości fizycznej \mathbf{S} , którą to ewolucję możemy w przybliżeniu semi-klasycznym traktować jako faktyczną ewolucję tych wielkości.

1.8.4 Obroty na sferze Blocha

Powyższe rozważania pokazują, iż w przedstawieniu geometrycznym stan Ψ reprezentowany przez jednostkowy wektor \mathbf{s} na sferze Blocha ewoluuje w taki sposób, iż efektywnie jego położenie na sferze Blocha w czasie t można przedstawić jako obrót wektora położenia w czasie t_0 o pewien kąt φ wokół ustalonej osi $\hat{\mathbf{n}}$

$$\mathbf{s}(t) = \overleftrightarrow{\mathbf{R}}_{\hat{\mathbf{n}}}(\varphi)\mathbf{s}(t_0).$$

¹W mechanice kwantowej wielkość $\boldsymbol{\mu} \propto \mathbf{S}$ jest spinowym momentem magnetycznym cząstki kwantowej.

W ujęciu abstrakcyjnego wektora $|\Psi\rangle$ przekształcenie to odpowiada oczywiście pewnemu przekształceniu unitarnemu \mathbf{U} , tj.

$$|\Psi(t)\rangle = \mathbf{U} |\Psi(t_0)\rangle .$$

Warte zbadania wydaje się więc wyznaczenie operatora \mathbf{U} , który odpowiada obrotowi na sferze Blocha. Aby wyznaczyć jawny wzór na operator \mathbf{U} rozważmy infinitezymalny obrót wektora \mathbf{s} wokół osi $\hat{\mathbf{n}}$ o kąt ϵ . Jak łatwo pokazać

$$\mathbf{s}' = \overrightarrow{\mathbf{R}}_{\hat{\mathbf{n}}}(\epsilon)\mathbf{s} = \mathbf{s} + \epsilon(\mathbf{s} \times \hat{\mathbf{n}})$$

w przybliżeniu do wyrazów liniowych względem ϵ . Wektor rzeczywisty \mathbf{s} najłatwiej powiązać z abstrakcyjnym wektorem $|\Psi\rangle$ poprzez operator rzutowy $\boldsymbol{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ dla którego zachodzi

$$|\mathbf{U}\Psi\rangle\langle\mathbf{U}\Psi| = \mathbf{U}\boldsymbol{\rho}\mathbf{U}^\dagger = \frac{1}{2}(\mathbf{I} + \mathbf{s}' \cdot \boldsymbol{\sigma}) ,$$

skąd

$$\mathbf{s} \cdot \mathbf{U}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{U}^\dagger = (\mathbf{s} + \epsilon(\mathbf{s} \times \hat{\mathbf{n}})) \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{s} \cdot (\boldsymbol{\sigma} + \epsilon(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\sigma})) .$$

Otrzymujemy zatem równanie

$$\mathbf{U}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{U}^\dagger = \boldsymbol{\sigma} + \epsilon(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\sigma}) .$$

Poszukajmy \mathbf{U} spełniających to równanie postaci

$$\mathbf{U} = \mathbf{I} + i\epsilon\mathbf{A} , \quad \mathbf{U}^\dagger = \mathbf{I} - i\epsilon\mathbf{A}^\dagger ,$$

gdzie \mathbf{A} jest operatorem samosprzężonym postaci $\mathbf{A} = \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}$. Zauważmy, iż tak zdefiniowany \mathbf{U} jest unitarny w przybliżeniu do wyrazów liniowych względem ϵ . Podstawiając powyższe wzory na \mathbf{U} oraz \mathbf{U}^\dagger i ograniczając się do wyrazów liniowych względem ϵ otrzymujemy

$$i\epsilon[\mathbf{A}, \boldsymbol{\sigma}] = \epsilon(\hat{\mathbf{n}} \times \boldsymbol{\sigma}) .$$

Widzimy zatem, iż taki, a nie inny strzał na postać operatora \mathbf{U} był podyktowany wyprowadzonymi wcześniej wzorami na komutatory operatora samosprzężonego z operatorami Pauliego, które naśladują strukturę zwykłego trójwymiarowego iloczynu wektorowego. Z powyższego otrzymujemy zatem $\mathbf{a} = \frac{1}{2}\hat{\mathbf{n}}$, skąd

$$\boxed{\mathbf{U} = \mathbf{I} + \frac{i\epsilon}{2}\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma}} .$$

Stąd łatwo możemy już uzyskać operator unitarny $\mathbf{U}_{\hat{\mathbf{n}}}(\varphi)$ odpowiadający obrotowi o kąt φ wokół osi $\hat{\mathbf{n}}$

$$\boxed{\mathbf{U}_{\hat{\mathbf{n}}}(\varphi) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\mathbf{I} + \frac{i\varphi}{2N}\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right)^N = \exp\left\{ \frac{i}{2}\varphi\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right\} = \mathbf{I} \cos \frac{\varphi}{2} + i(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \sin \frac{\varphi}{2}}$$

W szczególności dla obrotów wokół osi x , y , z mamy odpowiednio

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_{\hat{x}}(\varphi) &= \begin{bmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} & i \sin \frac{\varphi}{2} \\ i \sin \frac{\varphi}{2} & \cos \frac{\varphi}{2} \end{bmatrix} \\ \mathbf{U}_{\hat{y}}(\varphi) &= \begin{bmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} & \sin \frac{\varphi}{2} \\ -\sin \frac{\varphi}{2} & \cos \frac{\varphi}{2} \end{bmatrix} \\ \mathbf{U}_{\hat{z}}(\varphi) &= \begin{bmatrix} e^{+i\varphi/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi/2} \end{bmatrix} \end{aligned} .$$

1.8.5 Przykłady

Magnetyczny rezonans jądrowy. Rozważmy teraz zjawisko rezonansu magnetycznego mające liczne zastosowania w wielu działach fizyki współczesnej. Rozpatrzmy cząstkę obdarzoną momentem magnetycznym μ , lecz nie posiadającą ładunku elektrycznego (przypadek neutronu), która została umieszczona w wirującym z częstością radiową polu magnetycznym

$$\mathbf{B}(t) = B_{\text{rf}} \cos(\omega t) \hat{x} - B_{\text{rf}} \sin(\omega t) \hat{y} + B_0 \hat{z} .$$

Hamiltonian interesującego nas układu dwupoziomowego ma postać

$$\mathbf{H} = -\mu \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma} = -\mu \begin{bmatrix} B_0 & B_{\text{rf}} e^{+i\omega t} \\ B_{\text{rf}} e^{-i\omega t} & -B_0 \end{bmatrix} .$$

Równania ewolucji na amplitudy prawdopodobieństwa mają więc postać

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\omega_0} \dot{\alpha} &= \eta e^{+i\omega t} \beta + \alpha \\ \frac{1}{i\omega_0} \dot{\beta} &= \eta e^{-i\omega t} \alpha - \beta \end{aligned} ,$$

gdzie wprowadziliśmy parametry $\omega_0 := \mu B_0 / \hbar$ i $\eta := B_{\text{rf}} / B_0$. Poszukajmy rozwiązań postaci

$$\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_1(t) e^{+i\omega t/2} \\ \phi_2(t) e^{-i\omega t/2} \end{bmatrix} .$$

Po podstawieniu otrzymujemy układ równań

$$\frac{1}{i\omega_0} \begin{bmatrix} \dot{\phi}_1 \\ \dot{\phi}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \xi & \eta \\ \eta & -\xi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{bmatrix} ,$$

gdzie $\xi = 1 - \frac{\omega}{2\omega_0}$. Powyższy układ równań możemy łatwo rozwiązać poszukując rozwiązań postaci

$$\begin{bmatrix} \phi_1(t) \\ \phi_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \end{bmatrix} e^{i\omega_0 \lambda t} ,$$

co po podstawieniu prowadzi do zagadnienia własnego

$$\begin{bmatrix} \xi & \eta \\ \eta & -\xi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \end{bmatrix}.$$

Łatwo sprawdzić, iż wartości i wektory własne wynoszą odpowiednio

$$\lambda_{\pm} = \pm \sqrt{\xi^2 + \eta^2}, \quad \begin{bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \end{bmatrix} = a_{\pm} \begin{bmatrix} \frac{\eta}{\lambda_{\pm} - \xi} \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Rozwiązanie ma zatem postać

$$\begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{bmatrix} = a_+ \begin{bmatrix} \frac{\eta}{\lambda_+ - \xi} \\ 1 \end{bmatrix} e^{+i\Omega t} + a_- \begin{bmatrix} \frac{\eta}{\lambda_- - \xi} \\ 1 \end{bmatrix} e^{-i\Omega t},$$

gdzie $\Omega := \sqrt{\left(\omega_0 - \frac{1}{2}\omega\right)^2 + \left(\frac{\omega_0 B_{\text{rf}}}{B_0}\right)^2}$ to tzw. *częstość Rabiego*. Załóżmy, iż w chwili początkowej $\alpha = 0$ i $\beta = 1$, wówczas

$$a_+ = \frac{\lambda_+ - \xi}{\lambda_+ - \lambda_-}, \quad a_- = 1 - a_+ = \frac{-\lambda_- + \xi}{\lambda_+ - \lambda_-},$$

skąd

$$\begin{aligned} \alpha(t) &= \frac{i\omega_0 B_{\text{rf}}}{\Omega B_0} \sin(\Omega t) e^{+i\omega t/2} \\ \beta(t) &= \left\{ \cos(\Omega t) + \frac{i}{\Omega} \left(\frac{1}{2}\omega - \omega_0 \right) \sin(\Omega t) \right\} e^{-i\omega t/2}. \end{aligned}$$

Z powyższego prawdopodobieństwo $p_{1 \rightarrow 0}$ znalezienia układu w stanie $|0\rangle$ wynosi

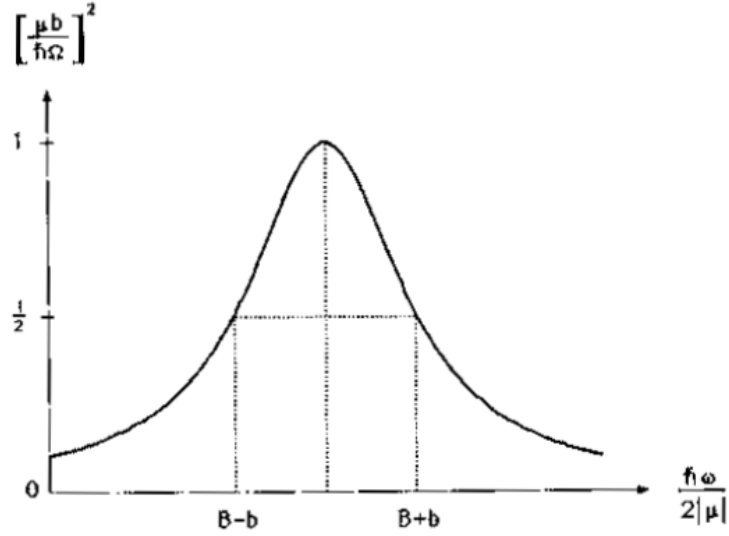
$$p_{1 \rightarrow 0}(t) = |\alpha|^2 = \left(\frac{\omega_0 B_{\text{rf}}}{\Omega B_0} \right)^2 \sin^2(\Omega t) = \frac{1}{2} \left(\frac{\omega_0 B_{\text{rf}}}{\Omega B_0} \right)^2 (1 - \cos(2\Omega t)).$$

Natomiast prawdopodobieństwo $p_{1 \rightarrow 1}$ znalezienia układu w stanie $|1\rangle$ wynosi

$$p_{1 \rightarrow 1}(t) = |\beta|^2 = \cos^2(\Omega t) + \left(\frac{\omega_0 - \frac{1}{2}\omega}{\Omega} \right)^2 \sin^2(\Omega t) = 1 - p_{1 \rightarrow 0}(t).$$

Prawdopodobieństwa oscylują w czasie z częstością równą podwojonej częstości Rabiego. Amplituda tych oscylacji wynosi

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\omega_0 B_{\text{rf}}}{\Omega B_0} \right)^2 = \frac{\omega_0^2 B_{\text{rf}}^2}{2B_0^2} \frac{1}{\left(\omega_0 - \frac{1}{2}\omega\right)^2 + \left(\frac{\omega_0 B_{\text{rf}}}{B_0}\right)^2}$$



Rysunek 2: Wykres podwojonej amplitudy oscylacji Rabiego w funkcji częstości pola magnetycznego. Na powyższym wykresie $b = B_{\text{rf}}$ i $B = B_0$

i przyjmuje wartość maksymalną, gdy spełniony jest *warunek rezonansu* postaci

$$\hbar\omega = 2\mu B_0$$

Zauważmy, iż opisane zjawisko stanowi podstawę do manipulacji qbitami. Istotnie w stanie rezonansu wektor stanu ewoluuje zgodnie z

$$|\Psi(t)\rangle = \alpha(t)|0\rangle + \beta(t)|1\rangle = i\sin(\Omega t)e^{+i\omega_0 t}|0\rangle + \cos(\Omega t)e^{-i\omega_0 t}|1\rangle$$

Poprzez dostosowanie czasu t przez jaki układ dwupoziomowy oddziałuje z wirowym polem możemy sterować stanem Ψ w jakim się znajduje, przykładowo jeśli początkowo układ był w stanie $|1\rangle$ to włączając wirowe pole magnetyczne na czas $t = \pi/2\Omega$ układ przechodzi do stanu $|0\rangle$ (pomijając nieistotny globalny czynnik fazowy).

Precesja momentu magnetycznego. Rozważmy ponownie cząstkę obdarzoną momentem magnetycznym, ale nie obdarzoną ładunkiem elektrycznym, która została umieszczona w jednorodnym polu magnetycznym $\mathbf{B} = B(t)\hat{\mathbf{z}}$. Równania ewolucji składowych wektora na sferze Blocha mają postać

$$\frac{\hbar}{2}\dot{s}_x = +\mu B s_y, \quad \frac{\hbar}{2}\dot{s}_y = -\mu B s_x, \quad \frac{\hbar}{2}\dot{s}_z = 0$$

skąd $s_z = \text{const.}$ natomiast sprzężone równania na s_x i s_y możemy rozdzielić wprowadzając zmienne zespolone

$$\xi = s_x + i s_y, \quad \eta = s_x - i s_y = \xi^*,$$

dla których zachodzi

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{2} \dot{\xi} &= \mu B s_y - i \mu B s_x = -i \mu B \xi \\ \frac{\hbar}{2} \dot{\eta} &= \mu B s_y + i \mu B s_x = +i \mu B \eta \end{aligned},$$

skąd

$$\begin{aligned} \xi(t) &= a \exp \left(-\frac{2i\mu}{\hbar} \int_0^t B(t') dt' - i\delta \right) \\ \eta(t) &= a \exp \left(+\frac{2i\mu}{\hbar} \int_0^t B(t') dt' + i\delta \right) \end{aligned},$$

Z powyższego mamy więc

$$\begin{aligned} s_x &= \frac{\xi + \eta}{2} = a \cos \left(\frac{2\mu}{\hbar} \int_0^t B(t') dt' + \delta \right) \\ s_y &= \frac{\xi - \eta}{2i} = -a \sin \left(\frac{2\mu}{\hbar} \int_0^t B(t') dt' + \delta \right) \\ s_z &= \text{const.} \end{aligned}.$$

Równania te opisują precesję wektora \mathbf{s} wokół osi z z zależną od czasu częstością. W szczególnym przypadku $B(t) = B_0$ mamy

$$s_x = a \cos(\omega_L t + \delta), \quad s_y = -a \sin(\omega_L t + \delta), \quad s_z = \text{const.},$$

gdzie $\boxed{\omega_L = 2\mu B_0 / \hbar}$ to tzw. *częstość Larmora*.

1.9 Twierdzenie adiabatyczne

Tw 1.14 (*adiabatyczne*). Niech $\mathbf{H}(t)$ będzie hamiltonianem (o dyskretnym i niezdegenerowanym spektrum) pewnego układu kwantowego, który zmienia się *bardzo powoli* (adiabatycznie) $\mathbf{H}(t_i) \rightarrow \mathbf{H}(t_f)$ w czasie $\Delta t = t_f - t_i$. Wówczas jeśli układ w chwili początkowej t_i znajdował się w n -tym stanie własnym hamiltonianu $\mathbf{H}(t_i)$ to po adiabatycznej ewolucji w chwili końcowej t_f będzie znajdował się w n -tym stanie własnym hamiltonianu $\mathbf{H}(t_f)$.

Niech $\{\psi_n(t)\}$ będzie zbiorem wektorów własnych hamiltonianu $\mathbf{H}(t)$. Funkcję falową Ψ w chwili t możemy zatem zapisać jako

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\psi_n(t)\rangle$$

gdzie $\mathbf{H}(t) |\psi_n(t)\rangle = \lambda_n(t) |\psi_n(t)\rangle$. Jednocześnie z równania Schrödingera mamy

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(t) |\Psi(t)\rangle &= \sum_n c_n(t) \lambda_n(t) |\psi_n(t)\rangle = i\hbar \partial_t |\Psi(t)\rangle \\ &= i\hbar \sum_n \left(\dot{c}_n(t) |\psi_n(t)\rangle + c_n(t) |\dot{\psi}_n(t)\rangle \right) \end{aligned}$$

Działając na powyższe równanie $\langle \psi_m(t) |$ otrzymujemy

$$\lambda_m(t) c_m(t) = i\hbar \dot{c}_m(t) + i\hbar \sum_n c_n(t) \langle \psi_m(t) | \dot{\psi}_n(t) \rangle.$$

Różniczkując równanie własne mamy natomiast

$$\dot{\mathbf{H}}(t) |\psi_n(t)\rangle + \mathbf{H}(t) |\dot{\psi}_n(t)\rangle = \dot{\lambda}_n(t) |\psi_n(t)\rangle + \lambda_n(t) |\dot{\psi}_n(t)\rangle.$$

Działając na to równanie $\langle \psi_m(t) |$ oraz pamiętając, iż z tw. spektralnego

$$\mathbf{H}(t) = \sum_n \lambda_n(t) |\psi_n(t)\rangle \langle \psi_n(t)|$$

otrzymujemy

$$\begin{aligned} &\langle \psi_m(t) | \dot{\mathbf{H}}(t) |\psi_n(t)\rangle + \lambda_m(t) \langle \psi_m(t) | \dot{\psi}_n(t) \rangle \\ &= \dot{\lambda}_n(t) \langle \psi_m(t) | \psi_n(t) \rangle + \lambda_n(t) \langle \psi_m(t) | \dot{\psi}_n(t) \rangle \end{aligned}$$

Dla $m \neq n$ mamy więc

$$\langle \psi_m(t) | \dot{\psi}_n(t) \rangle = \frac{\langle \psi_m(t) | \dot{\mathbf{H}}(t) |\psi_n(t)\rangle}{\lambda_n(t) - \lambda_m(t)}.$$

Możemy zatem zapisać równanie ewolucji na współczynniki c_m jako

$$-\dot{c}_m(t) = \left[\frac{i}{\hbar} \lambda_m(t) + \langle \psi_m(t) | \dot{\psi}_m(t) \rangle \right] c_m(t) + \sum_{n \neq m} c_n(t) \frac{\langle \psi_m(t) | \dot{\mathbf{H}}(t) |\psi_n(t)\rangle}{\lambda_n(t) - \lambda_m(t)}$$

Przybliżenie adiabatyczne polega na pominięciu drugiego członu po prawej stronie tj. zakładamy że w każdej chwili t widmo hamiltonianu jest niezdegenerowane czyli

$\forall t : \forall n \neq m : \lambda_n(t) \neq \lambda_m(t)$ oraz zakładamy, iż pochodna hamiltonianu jest bardzo mała. Wówczas mamy

$$\dot{c}_m(t) \approx i \left[-\frac{1}{\hbar} \lambda_m(t) + i \left\langle \psi_m(t) \left| \dot{\psi}_m(t) \right\rangle \right] c_m(t)$$

skąd rozwiązanie to

$$c_m(t) = c_m(0) e^{i\theta_m(t)} e^{i\gamma_m(t)},$$

gdzie

$$\theta_m(t) := -\frac{1}{\hbar} \int_0^t \lambda_m(t') dt' \in \mathbb{R}$$

to tzw. *faza dynamiczna*, a

$$\gamma_m(t) := i \int_0^t \left\langle \psi_m(t') \left| \dot{\psi}_m(t') \right\rangle dt' \in \mathbb{R}$$

to tzw. *faza geometryczna*. Aby przekonać się, iż $\gamma_m \in \mathbb{R}$ wystarczy zróżniczkować warunek unormowania

$$0 = \frac{d \langle \psi_m | \psi_m \rangle}{dt} = \left\langle \psi_m \left| \dot{\psi}_m \right\rangle^* + \left\langle \psi_m \left| \dot{\psi}_m \right\rangle = 2 \operatorname{Re} \left\{ \left\langle \psi_m \left| \dot{\psi}_m \right\rangle \right\}.$$

2 Obliczenia kwantowe