

Spis treści

1	Abstrakcyjna teoria kwantów	1
1.1	Elementy teorii przestrzeni Hilberta	1
1.2	Elementy teorii operatorów liniowych	4
1.3	Postulaty teorii kwantów	9
1.4	Kwantowe układy dwupoziomowe	13
1.4.1	Macierze Pauliego	13
1.4.2	Sfera Blocha	14
1.4.3	Ewolucja układu dwupoziomowego	16
1.4.4	Obroty na sferze Blocha	17
1.4.5	Przykład – magnetyczny rezonans jądrowy	18
2	Obliczenia kwantowe	19

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. *Przestrzeń Hilberta* $\mathcal{H} = (\mathbb{V}, \langle \cdot | \cdot \rangle)$ nazwiemy zupełną przestrzenią 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 .

Notacja Diraca

Niech \mathcal{H} będzie przestrzenią Hilberta. Wprowadzimy teraz kompaktową notację 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 przestrzegać 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 utożsamić $S^* = S$.

Skończenie wymiarowa przestrzeń Hilberta nad \mathbb{C}

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

$$\langle \psi | \phi \rangle := \sum_{i=1}^n a_i^* b_i$$

dla

$$\psi = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}, \quad \phi = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}.$$

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.

1.2 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 skończenie 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 skończenia 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:

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

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

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

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 $\mathbf{A}^0 := \mathbf{1}$. 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 skończenia 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 nieskończenia 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 samosprężony

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

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

$$\sum_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| = \mathbf{1}.$$

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

$$\mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{U}^\dagger\mathbf{U} = \mathbf{1}.$$

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 samosprzężonego operatora liniowego \mathbf{A} w \mathcal{H} istnieje unikalna rodzina operatorów rzutowych $\mathbf{P}(\lambda)$ indeksowanych ciąglem parametrem $\lambda \in \mathbb{R}$ taka, że

- $\mathbf{P}(\lambda_1)\mathbf{P}(\lambda_2) = \mathbf{P}(\min(\lambda_1, \lambda_2))$
- $\forall \lambda : \lim_{\epsilon \rightarrow 0+} \mathbf{P}(\lambda + \epsilon) = \mathbf{P}(\lambda)$
- $\lim_{\lambda \rightarrow -\infty} \mathbf{P}(\lambda) = \mathbf{0}$
- $\lim_{\lambda \rightarrow +\infty} \mathbf{P}(\lambda) = \mathbf{1}$
- $\mathbf{A} = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d\mathbf{P}(\lambda)$

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

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

1.3 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 $\mathbf{1} - \mathbf{P}$, 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 wówczas $(\mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2)^2 = \mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2$).

III. **O stanach układu.** Stan układu fizycznego jest reprezentowany przez unormowany wektor $|\Psi\rangle$ w pewnej przestrzeni Hilberta \mathcal{H} , przy czym utożsamiamy ze sobą wektory różniące się jedynie globalnym czynnikiem fazowym tj. $|\Psi\rangle \sim e^{i\alpha} |\Psi\rangle$, $\alpha \in \mathbb{R}$.

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

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

V. **O wielkościach fizycznych.** Każda wielkość fizyczna A występująca w danej teorii kwantowej jest reprezentowana przez samosprzężony 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 $\mathbf{1} - \mathbf{P}_A(\lambda)$:

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

$$[\mathbf{1} - \mathbf{P}_A(\lambda_1)] \mathbf{P}_A(\lambda_2) = \mathbf{P}_A(\lambda_2) - \mathbf{P}_A(\lambda_1) .$$

Wartość oczekiwaną funkcji f wielkości A dla układu reprezentowanego przez Ψ obliczamy jako

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

VI. **O ewolucji układu w czasie.** Stan układu $|\Psi\rangle$ ewoluuje zgodnie z *równaniem Schrödingera*

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

gdzie \mathbf{H} jest specjalnym operatorem samosprzężonym reprezentującym hamiltonian układu, tworzonym wedle określonych reguł w danej realizacji teorii kwantów.

VII. **O kolapsie.** Po pomiarze układu w stanie $|\Psi\rangle$ zwracającego odpowiedź na pytanie \mathbf{P} stan układu zostaje natychmiastowo zredukowany do

$$|\Psi\rangle \rightarrow \frac{\mathbf{P}|\Psi\rangle}{\sqrt{\langle\Psi|\mathbf{P}|\Psi\rangle}}$$

jeśli pomiar dał odpowiedź pozytywną albo do

$$|\Psi\rangle \rightarrow \frac{(\mathbf{1} - \mathbf{P})|\Psi\rangle}{\sqrt{1 - \langle\Psi|\mathbf{P}|\Psi\rangle}}$$

w przeciwnym przypadku.

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

Zasady nieoznaczoności

Niech A będzie pewną wielkością fizyczną reprezentowaną przez operator \mathbf{A} . Zdefiniujemy odchylenie standardowe σ_A wielkości A dla układu w stanie Ψ jako

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

gdzie $\mathcal{A} := \mathbf{A} - \langle A \rangle$. Dla dowolnych dwóch wielkości fizycznych A i B w układzie reprezentowanym przez Ψ mamy z nierówności Cauchy'ego–Schwarza

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq |\langle\mathcal{A}\Psi|\mathcal{B}\Psi\rangle|^2.$$

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

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

skąd po prostych przekształceniach otrzymujemy

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

Powyższą nierówność nazywamy *zasadą nieoznaczoności Schrödingera*. W szczególności z powyższego wynika *zasada nieoznaczoności Robertsona*

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

która dla operatorów spełniających *kanoniczną relację komutacyjną* $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = i\hbar \mathbf{1}$ przyjmuje postać *zasady nieoznaczoności Heisenberga*

$$\sigma_A \sigma_B \geq \frac{\hbar}{2} \quad .$$

Zauważmy jednakże, iż w rozważanych przez nas n -wymiarowych przestrzeniach Hilberta nie istnieją operatory spełniające kanoniczną relację komutacyjną. Istotnie biorąc ślad z powyższego wyrażenia mamy

$$0 = \text{Tr } \mathbf{AB} - \text{Tr } \mathbf{BA} = i\hbar \neq 0 \quad .$$

Twierdzenie Ehrenfesta

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

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

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

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

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

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

Powyższe równanie nazywamy *twierdzeniem Ehrenfesta*.

Zasada nieoznaczoności energii–czasu

Z twierdzenia Ehrenfesta dla operatora \mathbf{A} niezależnego od czasu mamy

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

Jednocześnie z zasady nieoznaczoności Robertsona mamy

$$\sigma_H^2 \sigma_A^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle \Psi | [\mathbf{H}, \mathbf{A}] | \Psi \rangle \right)^2 \quad .$$

Podstawiając wyrażenie na wartość oczekiwaną komutatora otrzymujemy z powyższego

$$\sigma_H \sigma_A \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d\langle A \rangle}{dt} \right| \quad .$$

Jeśli wartość oczekiwana nie zmienia się w czasie to powyższa nierówność nie mówi nic odkrywczego. Jeśli jednak rozważymy pewien proces, podczas którego

wartość oczekiwana zmienia się w czasie Δt o ΔA to możemy dokonać przybliżenia

$$\frac{\sigma_A}{\left| \frac{d\langle A \rangle}{dt} \right|} \approx \frac{|\Delta A|}{|\Delta A|/\Delta t} = \Delta t,$$

a wówczas z powyższej nierówności otrzymujemy zależność

$$\sigma_H \Delta t \gtrsim \frac{\hbar}{2},$$

którą nazywamy *zasadą nieoznaczoności energii–czasu*.

1.4 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 .

1.4.1 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* σ

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

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

- $\det \mathbf{X} = \det \mathbf{Y} = \det \mathbf{Z} = -1$
- $\text{Tr } \mathbf{X} = \text{Tr } \mathbf{Y} = \text{Tr } \mathbf{Z} = 0$
- $\mathbf{X}^2 = \mathbf{Y}^2 = \mathbf{Z}^2 = \mathbf{1}$
- Iloczyn 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

$$\begin{aligned} (\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \cdot (\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}) &= (a_x \mathbf{X} + a_y \mathbf{Y} + a_z \mathbf{Z})(b_x \mathbf{X} + b_y \mathbf{Y} + b_z \mathbf{Z}) \\ &= (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})\mathbf{1} + i(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot \boldsymbol{\sigma}. \end{aligned}$$

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

$$\exp(i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{1} \cos |\mathbf{a}| + i \left(\frac{\mathbf{a}}{|\mathbf{a}|} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right) \sin |\mathbf{a}|.$$

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

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_0 + a_z & a_x - ia_y \\ a_x + ia_y & a_0 - a_z \end{bmatrix} = a_0 \mathbf{1} + \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma},$$

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.

1.4.2 Sfera Blocha

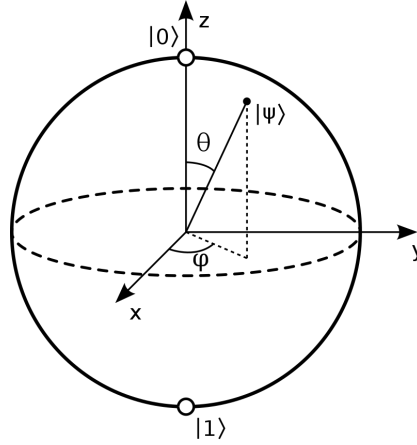
W trójwymiarowej przestrzeni możemy również przedstawić wektor stanu Ψ . Istotnie wektor stanu jest określony przez 2 zmienne zespolone

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

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 0). Zmienne ϕ, θ możemy interpretować odpowiednio jako kąt azymutalny



Rysunek 1: Sfera Blocha

i kąt zenitalny punktu na sferze jednostkowej, którą nazywamy *sferą Blocha*. Zauważmy, iż przy wybranej parametryzacji bieguny sfery określają odpowiednio stany $|0\rangle$ i $|1\rangle$.

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

$$|\Psi\rangle\langle\Psi| = s_0\mathbf{1} + \mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\sigma} ,$$

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

$$s_0\mathbf{1} + \mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\sigma} = (s_0^2 + |\mathbf{s}|^2)\mathbf{1} + 2s_0\mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\sigma} ,$$

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

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

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

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

1.4.3 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 $\rho = \frac{1}{2}(\mathbf{1} + \mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\sigma})$ i $\mathbf{H} = \mathbf{H} \cdot \boldsymbol{\sigma}$

$$\frac{\hbar}{2}\dot{\mathbf{s}} = \mathbf{H} \times \mathbf{s}$$

Przedstawienie geometryczne wektora stanu na sferze Blocha nie jest jedynie obserwacją matematyczną. Pozwala ono zwizualizować semi-klasyczną ewolucję wektorowej wielkości fizycznej \mathbf{S} , 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 $\mathbf{H} = \mathbf{H} \cdot \boldsymbol{\sigma}$

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

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.

1.4.4 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 $\hat{\mathbf{n}}$

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

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 nieskończenie mały obrót wektora \mathbf{s} wokół osi $\hat{\mathbf{n}}$ o kąt ϵ . Jak łatwo pokazać

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

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

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

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

$$\mathbf{U} = \mathbf{1} + i\epsilon\mathbf{A}, \quad \mathbf{U}^\dagger = \mathbf{1} - i\epsilon\mathbf{A}^\dagger,$$

gdzie \mathbf{A} jest operatorem samosprężonym 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 samosprężonego z operatorami Pauliego, które naśladują strukturę zwykłego trójwymiarowego iloczynu wektorowego. Z powyższego otrzymujemy zatem $\mathbf{a} = \frac{1}{2}\hat{\mathbf{n}}$, skąd

$$\mathbf{U} = \mathbf{1} + \frac{i\epsilon}{2}\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma}.$$

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

$$\mathbf{U}_{\hat{\mathbf{n}}}(\varphi) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\mathbf{1} + \frac{i\varphi}{2N} \hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right)^N = \exp \left\{ \frac{i}{2} \varphi \hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right\} = \mathbf{1} \cos \frac{\varphi}{2} + i(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \sin \frac{\varphi}{2}$$

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

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

1.4.5 Przykład – magnetyczny rezonans jądrowy

Rozpatrzmy cząstkę obdarzoną momentem magnetycznym μ o spinie połówkowym i nie posiadającą ładunku elektrycznego (neutron), która została umieszczona w wirującym z częstością radiową polu magnetycznym

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

Cząstka ta stanowi pewien układ dwupoziomowy, którego oddziaływanie z polem magnetycznym jest opisane hamiltonianem Pauliego

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

Równania ewolucji na amplitudy prawdopodobieństwa mają więc postać

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

gdzie wprowadziliśmy parametry $\omega_0 := \mu B_0 / \hbar$ i $n := B_{\text{rf}} / B_0$. Łatwo sprawdzić, iż rozwiązaniem powyższego układu równań jest

$$\begin{cases} \alpha(t) = (c_1 e^{+i\Omega t} + c_2 e^{-i\Omega t}) n e^{+i\omega t/2} \\ \beta(t) = (c_1 m_+ e^{+i\Omega t} + c_2 m_- e^{-i\Omega t}) e^{-i\omega t/2} \end{cases},$$

gdzie

$$m_{\pm} = \pm \sqrt{n^2 + \left(1 - \frac{\omega}{2\omega_0}\right)^2} - \left(1 - \frac{\omega}{2\omega_0}\right)$$

oraz

$$\Omega = \sqrt{n^2 \omega_0^2 + \left(\omega_0 - \frac{\omega}{2}\right)^2}.$$

Zdefiniowaną wielkość Ω nazywamy *częstością Rabiego*. Załóżmy, iż w chwili początkowej $\alpha = 0$ i $\beta = 1$, wówczas

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

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

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

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

$$\frac{1}{2} \left(\frac{n \omega_0}{\Omega} \right)^2 = \frac{n^2 \omega_0^2}{2} \frac{1}{(\omega_0 - \frac{1}{2} \omega)^2 + (n \omega_0)^2}$$

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).

2 Obliczenia kwantowe