

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 $u = v$ (*niewujemność*)
- $\forall u, v \in V : d(u, v) = d(v, u)$ (*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 .

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 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 $S^* = S$.

1.3 Skończenie wymiarowa przestrzeń Hilberta nad ciałem liczb zespolonych

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

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

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 funkcjonał 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 skończone 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 – zarówno takich, w których możemy znaleźć nieskończoną ale przeliczalną bazę ortonormalną (np. przestrzeń Hilberta rzeczywistych funkcji nieparzystych na odcinku $[-L; L]$ spełniających warunki Dirichleta, w której $f(x) = \sum_{i=1}^{\infty} a_i \sin \frac{i\pi x}{L}$), jak i w przypadku występującym np. w najprostszym zagadnieniu nierelatywistycznej cząstki swobodnej poruszającej się w jednym wymiarze, której funkcja falowa jest dana w postaci

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\Psi}(k) e^{i(kx - \omega t)} dk$$

gdzie wektor $\Psi(x, t)$ należący do przestrzeni Hilberta funkcji całkowalnych z kwadratem modułu jest wyrażony jako ciągła superpozycja wektorów „bazowych” $e^{i(kx - \omega t)}$ (które nie należą w ogóle do tej przestrzeni) ze współczynnikami danymi transformatą Fouriera $\tilde{\Psi}(k) = \mathcal{F}\{\Psi(x, 0)\}$.

1.4 Elementy teorii operatorów liniowych

- **Def.** *Operatorem liniowym* \mathbf{A} w przestrzeni \mathcal{H} nazywamy odwzorowanie liniowe

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

gdzie $D(\mathbf{A})$ jest podprzestrzenią wektorową przestrzeni \mathbb{V} .

- **Def.** *Sprzężeniem* operatora \mathbf{A} nazywamy operator $\mathbf{A}^\dagger : D(\mathbf{A}^\dagger) \mapsto D(\mathbf{A}^\dagger)$ taki, że

$$\forall \phi \in D(\mathbf{A}^\dagger) : \forall \psi \in D(\mathbf{A}) : \langle \phi | \mathbf{A} \psi \rangle = \langle \mathbf{A}^\dagger \phi | \psi \rangle$$

co możemy również zapisać jako

$$(\langle \psi | \mathbf{A}^\dagger | \phi \rangle)^* = \langle \phi | \mathbf{A} | \psi \rangle .$$

- **Def.** *Komutatorem* operatorów \mathbf{A}, \mathbf{B} o równych dziedzinach nazywamy 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.** *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.** Dla dowolnych operatorów $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$ zakładając odpowiednie dziedziny, zachodzi:

$$\begin{aligned} - [\mathbf{A} + \mathbf{B}, \mathbf{C}] &= [\mathbf{A}, \mathbf{C}] + [\mathbf{B}, \mathbf{C}] ; \\ - [\mathbf{A}\mathbf{B}, \mathbf{C}] &= \mathbf{A}[\mathbf{B}, \mathbf{C}] + [\mathbf{A}, \mathbf{C}]\mathbf{B} . \end{aligned}$$

- **Def.** *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.** Ślad operatora nie zależy od wyboru ortonormalnej bazy przestrzeni Hilberta.
- **Def.** 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

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

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

- **Def.** *Operatorem symetrycznym* nazywamy operator \mathbf{A} taki, że

$$\forall \psi, \phi \in D(\mathbf{A}) : \langle \psi | \mathbf{A} \phi \rangle = \langle \mathbf{A} \psi | \phi \rangle .$$

- **Def.** *Operatorem samosprężonym* nazywamy operator \mathbf{A} taki, że $\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger$. Samosprężoność nie pokrywa się z symetrycznością, gdyż równość operatorów oznacza z definicji równość ich dziedzin, co nie jest w ogólności prawdziwe dla dowolnego operatora symetrycznego. Oczywiście, jeśli operator jest samosprężony, to jest symetryczny.

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

- **Tw.** Wartości własne operatora samosprężonego są liczbami rzeczywistymi.
- **Tw.** Wektory własne operatora samosprężonego tworzą zbiór ortogonalny.
- **Tw.** Jeśli zbiór wartości własnych operatora samosprężonego jest zbiorem przeliczalnym, to zbiór wektorów własnych rozpiną przestrzeń \mathcal{H} .
- **Def.** 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

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

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

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

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.** 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 ważną 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. (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

– Jeśli $\lambda_1 < \lambda_2$ to

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

– Dla każdego λ $\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \mathbf{P}(\lambda + \epsilon) = \mathbf{P}(\lambda)$.

– $\lim_{\lambda \rightarrow -\infty} \mathbf{P}(\lambda) = \mathbf{0}$

– $\lim_{\lambda \rightarrow +\infty} \mathbf{P}(\lambda) = \mathbf{I}$

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

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 $[a; b]$.

W szczególnym przypadku, gdy operator samosprężony \mathbf{A} ma 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

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

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 odwzorowanie tego pytania na pewien operator rzutowy \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

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

Dla operatora rzutowego $|\Psi\rangle \langle \Psi|$ reprezentującego pytanie: *czy układ znajduje się w stanie Ψ ?*, prawdopodobieństwo odpowiedzi twierdzącej wynosi 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 w ogólności $\mathbf{H} = \mathbf{H}(t)$ jest operatorem Hamiltona danego 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 $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots$.

1.5.1 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 wielkości 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

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

Z powyższego mamy więc

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

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

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

Ostatecznie otrzymujemy więc

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

Powyższą nierówność nazywamy *uogólnioną zasadą nieoznaczoności*.

1.5.2 Twierdzenie Ehrenfesta

Niech A będzie pewną wielkością fizyczną reprezentowaną przez operator \mathbf{A} , wówczas zakładając obraz Schrödingera mamy

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

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

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

Powyższe równanie nazywamy *twierdzeniem Ehrenfesta*.

1.6 Kwantowe układy dwupoziomowe

Przedstawimy teraz ważną realizację abstrakcyjnej teorii kwantów – teorię układów dwupoziomowych, które stanowią podstawę teorii obliczeń kwantowych i kwantowej teorii informacji.

1.6.1 Macierze Pauliego

Macierze Pauliego definiujemy jako zespolone macierze 2×2

$$\sigma_x := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

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

$$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z),$$

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:

- $\det \sigma_x = \det \sigma_y = \det \sigma_z = -1$
- $\text{Tr } \sigma_x = \text{Tr } \sigma_y = \text{Tr } \sigma_z = 0$
- $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbf{I}$
- Iloczyn macierzy Pauliego spełniają związki

$$\begin{aligned} \sigma_x \sigma_y &= i\sigma_z = -\sigma_y \sigma_x \\ \sigma_y \sigma_z &= i\sigma_x = -\sigma_z \sigma_y \\ \sigma_z \sigma_x &= i\sigma_y = -\sigma_x \sigma_z \end{aligned}.$$

- Komutatory i antykomutatory macierzy Pauliego wynoszą

$$\begin{aligned} [\sigma_x, \sigma_y] &= 2i\sigma_z, & \{\sigma_x, \sigma_y\} &= \mathbf{0} \\ [\sigma_y, \sigma_z] &= 2i\sigma_x, & \{\sigma_y, \sigma_z\} &= \mathbf{0} \\ [\sigma_z, \sigma_x] &= 2i\sigma_y, & \{\sigma_z, \sigma_x\} &= \mathbf{0} \end{aligned}.$$

- 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

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

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

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

1.6.2 Operatory

Operatory w \mathcal{H} to w ogólności odwzorowania liniowe $\mathbf{A} : \mathbb{C}^2 \mapsto \mathbb{C}^2$, które, jak wiadomo, zawsze można reprezentować (dla przestrzeni skończone wymiarowych) przez macierze, której elementy są wyznaczone przez wartości odwzorowania \mathbf{A} na wektorach bazowych, tj. zakładając

$$\begin{aligned}\mathbf{A}|1\rangle &= a_{11}|1\rangle + a_{21}|2\rangle \\ \mathbf{A}|2\rangle &= a_{12}|1\rangle + a_{22}|2\rangle\end{aligned}\quad ,$$

macierz endomorfizmu \mathbf{A} możemy zapisać jako

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$$

dla $a_{ij} \in \mathbb{C}$.

- Ślad operatora \mathbf{A} w przestrzeni $(\mathbb{C}^2, \mathbb{C}, +, \cdot)$ jest dany przez sumę elementów diagonalnych macierzy \mathbf{A}

$$\text{Tr } \mathbf{A} = \langle 1 | \mathbf{A} | 1 \rangle + \langle 2 | \mathbf{A} | 2 \rangle = a_{11} + a_{22} .$$

- Sprzężeniem operatora reprezentowanego przez macierz

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$$

jest po prostu sprzężenie hermitowskie tej macierzy, tj.

$$\mathbf{A}^\dagger = \begin{pmatrix} a_{11}^* & a_{21}^* \\ a_{12}^* & a_{22}^* \end{pmatrix} .$$

- Operatory samosprężone to operatory \mathbf{A} , które spełniają równość

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}^* & a_{21}^* \\ a_{12}^* & a_{22}^* \end{pmatrix} = \mathbf{A}^\dagger ,$$

czyli $a_{11}, a_{22} \in \mathbb{R}$ i $a_{12} = a_{21}^*$. Są to zatem operatory reprezentowane przez macierze hermitowskie.

- Zauważmy, iż dowolną macierz hermitowską \mathbf{A} możemy przedstawić jako

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

dla $a_0 \in \mathbb{R}$ i rzeczywistego wektora $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^3$.

Zauważmy również, że bez straty ogólności zawsze możemy zakładać $a_0 = 0$. Istotnie, jeśli $|\Psi\rangle$ jest wektorem własnym operatora $\mathbf{A} = a_0 \mathbf{I} + \mathbf{a} \boldsymbol{\sigma}$ z wartością własną λ , tj. zachodzi

$$a_0 \mathbf{I} |\Psi\rangle + \mathbf{a} \boldsymbol{\sigma} |\Psi\rangle = \lambda |\Psi\rangle ,$$

to $|\Psi\rangle$ jest wektorem własnym operatora $\mathbf{A}' = \mathbf{a}\boldsymbol{\sigma}$ z wartością własną $\lambda - a_0$. Istotnie z założenia

$$\mathbf{a}\boldsymbol{\sigma}|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle - a_0\mathbf{I}|\Psi\rangle = (\lambda - a_0)|\Psi\rangle ,$$

czyli przyjmując $a_0 = 0$, przesuwamy jedynie widmo operatora o pewną stałą.

1.6.3 Sfera Blocha

Dowolny operator samosprężony \mathbf{A} możemy przedstawić w trójwymiarowej przestrzeni, korzystając z reprezentacji Pauliego

$$\mathbf{A} = \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}$$

dla $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^3$. Zauważmy również, iż w tej samej przestrzeni możemy przedstawić wektor stanu $|\Psi\rangle$. Istotnie operator rzutowy $|\Psi\rangle\langle\Psi|$ jest operatorem samosprężonym, więc istnieje para (r_0, \mathbf{r}) taka, że

$$|\Psi\rangle\langle\Psi| = \begin{pmatrix} \psi_1\psi_1^* & \psi_1\psi_2^* \\ \psi_1^*\psi_2 & \psi_2\psi_2^* \end{pmatrix} = r_0\mathbf{I} + \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\sigma} .$$

Ze względu na unormowanie $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$ mamy warunek $r_0 = \frac{1}{2}$, natomiast wartość wyznacznika nakłada dodatkowy warunek $\det|\Psi\rangle\langle\Psi| = 0 = r_0^2 - |\mathbf{r}|^2$. Dowolny wektor stanu $|\Psi\rangle$ możemy więc przedstawić w przestrzeni trójwymiarowej (x, y, z) jako

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

przy warunku $|\mathbf{r}|^2 = 1$, co określa punkt na sferze jednostkowej o środku w punkcie $(0, 0, 0)$, którą nazywamy *sferą Blocha*.

Możemy również wyprowadzić równanie ewolucji punktu $\mathbf{r}(t)$ na sferze Blocha dla układu opisywanego hamiltonianem $\mathbf{H} = \mathbf{h}(t) \cdot \boldsymbol{\sigma}$. Istotnie różniczkując operator rzutowy $\boldsymbol{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ mamy

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\boldsymbol{\rho} &= i\hbar(\partial_t|\Psi\rangle)\langle\Psi| + i\hbar|\Psi\rangle\partial_t\langle\Psi| \\ &= \mathbf{H}|\Psi\rangle\langle\Psi| + i\hbar|\Psi\rangle(\partial_t|\Psi\rangle)^\dagger \\ &= \mathbf{H}|\Psi\rangle\langle\Psi| + i\hbar|\Psi\rangle\left(\frac{1}{i\hbar}\mathbf{H}|\Psi\rangle\right)^\dagger \\ &= \mathbf{H}|\Psi\rangle\langle\Psi| - |\Psi\rangle\langle\Psi|\mathbf{H} = [\mathbf{H}, \boldsymbol{\rho}] , \end{aligned}$$

skąd, korzystając z tożsamości na iloczyn $\mathbf{a}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}\boldsymbol{\sigma}$, otrzymujemy równanie

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{1}{\hbar}(\mathbf{h}(t) \times \mathbf{r}) ,$$

które nazywamy *równaniem Blocha*. Ponieważ $|\mathbf{r}|^2 = 1$, więc wygodnie jest zapisać powyższe równanie w układzie współrzędnych sferycznych (r, θ, ϕ)

$$\begin{cases} r = 1 \\ \dot{\theta} = \frac{1}{\hbar} h_\phi(t) \\ \dot{\phi} = -\frac{1}{\hbar} h_\theta(t) \csc \theta \end{cases},$$

gdzie (h_r, h_θ, h_ϕ) są dane równaniem

$$\begin{pmatrix} h_r \\ h_\theta \\ h_\phi \end{pmatrix} = \frac{\partial(r, \theta, \phi)}{\partial(x, y, z)} \begin{pmatrix} h_x \\ h_y \\ h_z \end{pmatrix}.$$

Pozostaje jeszcze pokazać jak zapisać stan $|\Psi\rangle$ reprezentowany na sferze przez współrzędne (r, θ, ϕ) . Zauważmy wpierw, iż bez straty ogólności możemy przyjąć

$$|\Psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 e^{i\beta} \\ \alpha_2 \end{pmatrix},$$

dla $\alpha_1, \alpha_2, \beta \in \mathbb{R}$ (istotnie pamiętajmy, iż utożsamiamy wektory różniące się jedynie globalnym czynnikiem fazowym). W takim razie mamy

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \cos \theta} = \cos \frac{\theta}{2} \\ \alpha_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \cos \theta} = \sin \frac{\theta}{2} \\ \beta &= \phi \end{aligned},$$

skąd

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

1.6.4 Ewolucja układu dwupoziomowego

W przypadku hamiltonianu $\mathbf{H} = \mathbf{h}\boldsymbol{\sigma}$ niezależnego od czasu możemy podać ogólne rozwiązanie równania Schrödingera postaci

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= e^{-i\mathbf{h}\boldsymbol{\sigma}t/\hbar} |\Psi(0)\rangle \\ &= \left[\mathbf{I} \cos \left(\frac{|\mathbf{h}|}{\hbar} t \right) - i\hat{\mathbf{h}} \sin \left(\frac{|\mathbf{h}|}{\hbar} t \right) \right] |\Psi(0)\rangle. \end{aligned}$$

W przypadku hamiltonianów zależnych od czasu możemy znaleźć rozwiązanie przybliżone, korzystając z rachunku zaburzeń (najczęściej 1-go lub 2-go rzędu). Istnieje jednak ważny układ dwupoziomowy z hamiltonianem zależnym od czasu, dla którego istnieje ściśle rozwiązanie analityczne.

Oscylacje Rabiiego. Rozważmy układ opisany hamiltonianem

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{2}\gamma\hbar\mathbf{B}(t)\boldsymbol{\sigma},$$

gdzie

$$\mathbf{B}(t) = B_0(\sin\beta\cos\Omega t, \sin\beta\sin\Omega t, \cos\beta),$$

dla pewnych stałych $\gamma, B_0, \beta, \Omega$, który opisuje interakcję spinu z zewnętrznym polem magnetycznym. Chcemy rozwiązać równanie Schrödingera

$$\begin{pmatrix} \dot{\psi}_1 \\ \dot{\psi}_2 \end{pmatrix} = \frac{i\gamma B_0}{2} \begin{pmatrix} \cos\beta & e^{-i\Omega t}\sin\beta \\ e^{+i\Omega t}\sin\beta & \cos\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}.$$

Poszukajmy rozwiązań postaci

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_1 e^{-\frac{i}{2}\Omega t} \\ \phi_2 e^{+\frac{i}{2}\Omega t} \end{pmatrix},$$

skąd otrzymujemy

$$\begin{pmatrix} \dot{\phi}_1 \\ \dot{\phi}_2 \end{pmatrix} = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} \Omega + \omega_0 \cos\beta & \omega_0 \sin\beta \\ \omega_0 \sin\beta & -(\Omega + \omega_0 \cos\beta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix},$$

gdzie $\omega_0 := \gamma B_0$. Wartości własne powyższej macierzy to

$$\lambda = \pm \frac{i}{2} \sqrt{\omega_0^2 + \Omega^2 + 2\omega_0\Omega\cos\beta} = \pm \frac{i}{2}\Lambda,$$

natomiast wektory własne mają postać

$$\alpha_{\pm} \begin{pmatrix} -\omega_0 \sin\beta \\ \Omega + \omega_0 \cos\beta \mp \Lambda \end{pmatrix},$$

dla pewnych niezerowych stałych α_+, α_- . Rozwiązanie na wektor $|\phi(t)\rangle$ ma więc postać

$$\begin{aligned} |\phi(t)\rangle &= \alpha_+ \begin{pmatrix} -\omega_0 \sin\beta \\ \Omega + \omega_0 \cos\beta - \Lambda \end{pmatrix} e^{i\Lambda t/2} \\ &+ \alpha_- \begin{pmatrix} -\omega_0 \sin\beta \\ \Omega + \omega_0 \cos\beta + \Lambda \end{pmatrix} e^{-i\Lambda t/2}. \end{aligned}$$

Zakładając, iż w stanie początkowym $|\Psi(0)\rangle = |2\rangle$ możemy obliczyć prawdopodobieństwo przejścia do stanu $|1\rangle$

$$p_{2\rightarrow 1}(t) = |\langle 1|\Psi\rangle|^2 = \frac{\omega_0^2 \sin^2\beta}{\Lambda^2} \sin^2\left(\frac{\Lambda t}{2}\right).$$

Zauważmy, że prawdopodobieństwo przejścia oscyluje z amplitudą zależną od częstości wymuszenia

$$p_{\max}(\Omega) = \frac{\sin^2 \beta}{1 + \left(\frac{\Omega}{\gamma B_0}\right)^2 + 2 \left(\frac{\Omega}{\gamma B_0}\right) \cos \beta}.$$

Amplituda ta przyjmuje wartość maksymalną dla częstości wymuszenia równej $|\Omega_{\text{rez}}| = |\omega_0 \cos \beta|$. Zauważmy również, iż niezerowa szerokość połówkowa nie wynika z żadnych procesów dyssypatywnych, jak ma to miejsce w np. w przypadku klasycznego oscylatora harmonicznego z tłumieniem i wymuszeniem, tylko z samej teorii kwantowej.

1.7 OBLICZENIA KWANTOWE