

0.1 TEORIA KWANTÓW

0.1.1 Elementy przestrzeni Hilberta

- Przez $\mathbb{V} := (V, \mathbb{C}, +, \cdot)$ będziemy oznaczać przestrzeń wektorową nad ciałem liczb zespolonych.
- **Def.** 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.** Niech (V, d) będzie przestrzenią metryczną. Mówimy, iż dany ciąg (u_n) elementów zbioru V jest zbieżny do $g \in V$ tj. $\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = g$ iff $\lim_{n \rightarrow \infty} d(a_n, g) = 0$.
- **Def.** 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.

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

- **Tw.** Każdy ciąg zbieżny w przestrzeni metrycznej (V, d) jest ciągiem Cauchy'ego w tej przestrzeni.
- **Def.** 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.** 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.** Każda przestrzeń unitarna jest metryczna z metryką indukowaną przez iloczyn wewnętrzny $d(u, v) := \sqrt{\langle u - v | u - v \rangle}$.

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

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

- **Def.** 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.** Każda przestrzeń unitarna $(\mathbb{V}, \langle \cdot | \cdot \rangle)$ posiada bazę ortonormalną, tj. bazę, której wektory bazowe tworzą zbiór ortonormalny.
- **Def.** *Przestrzenią Hilberta* $\mathcal{H} = (\mathbb{V}, \langle \cdot | \cdot \rangle)$ nazwiemy *zupełną przestrzeń unitarną*.
- **Def.** Niech $\mathcal{H} = (\mathbb{V}, \langle \cdot | \cdot \rangle)$ będzie przestrzenią Hilberta. Odwzorowanie $F : V \mapsto \mathbb{C}$ nazwiemy *funkcjonałem liniowym* w przestrzeni \mathcal{H} iff

$$\begin{aligned} \forall u, v \in V : \forall \alpha, \beta \in \mathbb{C} : \\ F(\alpha u + \beta v) = \alpha F(u) + \beta F(v). \end{aligned}$$

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

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

jest przestrzenią wektorową, którą nazywamy *przestrzenią dualną*.

- **Tw.** (*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.** *Iloczynem tensorowym* przestrzeni Hilberta \mathcal{H}_1 i \mathcal{H}_2 o bazach ortonormalnych odpowiednio $\{\phi_i^{(1)}\}$ i $\{\phi_i^{(2)}\}$ nazwiemy przestrzeń Hilberta $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ taką, że

- Jej bazą ortonormalną jest zbiór $\{\phi_i^{(1)} \otimes \phi_j^{(2)}\}$, gdzie $\psi \otimes \phi$ to iloczyn Kroneckera wektorów, który dla reprezentacji wektorów jako macierzy kolumnowych o elementach będących współrzędnymi wektora w danej bazie jest zdefiniowany jako

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} a_1 \cdot \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \\ a_2 \cdot \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \\ \vdots \end{pmatrix}$$

- Iloczyn wewnętrzny w przestrzeni $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ jest zdefiniowany jako

$$\langle \phi_1 \otimes \phi_2 | \psi_1 \otimes \psi_2 \rangle := \langle \phi_1 | \psi_1 \rangle_1 \cdot \langle \phi_2 | \psi_2 \rangle_2 ,$$

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

0.1.2 Notacja Diraca

Niech \mathcal{H} będzie przestrzenią Hilberta. Wprowadzimy teraz kompaktową notację wektorów i funkcjonałów liniowych wymyśloną przez 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 utożsamiać $S^* = S$.

Iloczyn wewnętrzny wektorów ψ, ϕ tj. $\langle\psi|\phi\rangle$ będziemy teraz interpretować jako wartość funkcjonału liniowego $\langle\psi|$ (tj. funkcjonału liniowego odpowiadającego wektorowi ψ) dla argumentu $|\phi\rangle$.

0.1.3 Elementy 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 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:

$$- [\mathbf{A} + \mathbf{B}, \mathbf{C}] = [\mathbf{A}, \mathbf{C}] + [\mathbf{B}, \mathbf{C}] ;$$

$$- [\mathbf{A} \mathbf{B}, \mathbf{C}] = \mathbf{A} [\mathbf{B}, \mathbf{C}] + [\mathbf{A}, \mathbf{C}] \mathbf{B} .$$

- **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 rozpina 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

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

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 $\lambda \lim_{\epsilon \rightarrow 0+} \mathbf{P}(\lambda + \epsilon) = \mathbf{P}(\lambda)$.

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

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

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

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 $[a; b]$.

W szczególnym przypadku, gdy operator samosprzężony \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

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

0.1.4 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. Podane poniżej postulaty to nieco zmodyfikowane postulaty pochodzące z książki „Teoria kwantów. Mechanika falowa” I. Białynicki-Birula, M. Cieplak, J. Kamiński.

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} . Dwa pytania elementarne reprezentowane przez \mathbf{P}_1 i \mathbf{P}_2 można połączyć spójnikiem „LUB”, jeśli $\mathbf{P}_1 \mathbf{P}_2 = \mathbf{0}$ otrzymując pytanie reprezentowane przez $\mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2$ lub „I”, jeśli $[\mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2] = \mathbf{0}$ otrzymując pytanie reprezentowane przez $\mathbf{P}_1 \mathbf{P}_2$.

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. $|\Psi\rangle \equiv e^{i\alpha} |\Psi\rangle$ 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 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 $\mathbf{I} - \mathbf{P}_A(\lambda)$: *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

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

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 $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots$.

0.1.5 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

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

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

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

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*.

0.1.6 Twierdzenie Ehrenfesta

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

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

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 *uogólnionym twierdzeniem Ehrenfesta*.

0.2 Metody rozwiązywania równania Schrödingera

0.2.1 Hamiltonian niezależny od czasu

Jeśli \mathbf{H} jest niezależny od czasu, to można podać ogólne rozwiązanie równania Schrödingera

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

w postaci nieskończonego szeregu

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= e^{-i\mathbf{H}t/\hbar}|\Psi(0)\rangle \\ &= \left[\mathbf{I} - \frac{it}{\hbar} \cdot \mathbf{H} + \frac{t^2}{\hbar^2} \cdot \mathbf{H}^2 + \dots \right] |\Psi(0)\rangle. \end{aligned}$$

Operator $e^{-i\mathbf{H}t/\hbar}$ nazywamy *operatorem ewolucji*.

0.2.2 Rachunek zaburzeń z czasem

W poniższym akapicie założymy, iż operator \mathbf{H} ma niezdegenerowane widmo przeliczalne. Inną metodą rozwiązania równania Schrödingera w takim przypadku dla hamiltonianu niezależnego od czasu jest poszukiwanie rozwiązań w postaci

$$|\Psi(t)\rangle = |\psi_n\rangle e^{-i\lambda_n t/\hbar},$$

dla ustalonego, niezależnego od czasu wektora $|\psi_n\rangle$, co po podstawieniu daje równanie własne

$$\mathbf{H}|\psi_n\rangle = \lambda_n |\psi_n\rangle.$$

Jeśli widmo \mathbf{H} jest przeliczalne i niezdegenerowane, to rozwiązanie ogólne ma postać

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle e^{-i\lambda_n t/\hbar}$$

dla pewnych współczynników $c_n \in \mathbb{C}$, wyznaczonych przez warunek początkowy

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle.$$

Oczywiście, ponieważ \mathbf{H} jest samosprężony i ma przeliczalne widmo, więc $\{|\psi_n\rangle\}$ jest bazą ortonormalną danej przestrzeni, a zatem współczynniki c_n są jednoznacznie wyznaczone przez powyższe równanie.

Założmy teraz, iż hamiltonian ma postać

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \epsilon \mathbf{H}'(t),$$

gdzie \mathbf{H}_0 jest niezależnym od czasu hamiltonianem, natomiast ϵ jest wielkością małą. Poszukamy rozwiązań zależnego od czasu równania Schrödingera

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

w postaci

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\psi_n^0\rangle e^{-i\lambda_n^0 t/\hbar},$$

gdzie $\{\lambda_n^0\}$, $\{|\psi_n^0\rangle\}$ to wartości i wektory własne operatora \mathbf{H}_0 ($\{|\psi_n^0\rangle\}$ jest zatem bazą ortonormalną rozpatrywanej przestrzeni Hilberta), a $c_n : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{C}$ to funkcje o wartościach zespolonych. Podstawiając powyższy ansatz do równania Schrödingera otrzymujemy

$$\begin{aligned} &\sum_n c_n(t) e^{-i\lambda_n^0 t/\hbar} \mathbf{H} |\psi_n^0\rangle \\ &= i\hbar \sum_n \dot{c}_n(t) |\psi_n^0\rangle e^{-i\lambda_n^0 t/\hbar} \\ &+ \sum_n c_n(t) \lambda_n^0 |\psi_n^0\rangle e^{-i\lambda_n^0 t/\hbar}, \end{aligned}$$

ale $\mathbf{H}_0 |\psi_n^0\rangle = \lambda_n |\psi_n^0\rangle$, zatem otrzymujemy

$$\sum_n \epsilon c_n(t) e^{-i\lambda_n^0 t/\hbar} \mathbf{H}' |\psi_n^0\rangle = i\hbar \sum_n \dot{c}_n(t) e^{-i\lambda_n^0 t/\hbar} |\psi_n^0\rangle.$$

Zauważmy, iż działając na powyższe równanie kolejnymi funkcjonalami liniowymi $\langle \psi_m^0 |$ dla $m = 1, 2, \dots$, otrzymujemy układ równań postaci

$$\dot{c}_m(t) = -\frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_n c_n(t) e^{\frac{i}{\hbar}(\lambda_m^0 - \lambda_n^0)t} H'_{mn},$$

gdzie wprowadziliśmy uproszczony zapis $H'_{mn} := \langle \psi_m^0 | \mathbf{H}' | \psi_n^0 \rangle$, tj. H'_{mn} jest elementem (m, n) macierzy reprezentującej operator \mathbf{H}' w bazie $\{|\psi_n^0\rangle\}$.

Ponieważ założyliśmy, iż ϵ jest wielkością małą, więc do przybliżonego rozwiązania wyprowadzonego układu równań możemy wykorzystać metodę kolejnych przybliżeń. Istotnie założymy, iż $c_m(0) = \delta_{mN}$ dla ustalonego N . Wówczas w przybliżeniu 0-go rzędu całkowicie ignorujemy wyrażenie z ϵ , a zatem rozwiązanie 0-go rzędu ma postać

$$c_m^{(0)}(t) = c_m(0).$$

Aby uzyskać rozwiązanie 1-go, podstawiamy rozwiązanie 0-go rzędu do wyrażenia z ϵ uzyskując

$$\begin{aligned} \dot{c}_m^{(1)}(t) &= -\frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_n c_n^{(0)}(t) e^{\frac{i}{\hbar}(\lambda_m^0 - \lambda_n^0)t} H'_{mn} \\ &= -\frac{i\epsilon}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(\lambda_m^0 - \lambda_N^0)t} H'_{mN}, \end{aligned}$$

skąd uzyskujemy rozwiązanie 1-go rzędu całkując

$$c_m^{(1)}(t) = \begin{cases} -\frac{i\epsilon}{\hbar} \int_0^t e^{\frac{i}{\hbar}(\lambda_m^0 - \lambda_N^0)t'} H'_{mN} dt', & m \neq N \\ 1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} \int_0^t H'_{NN} dt', & m = N \end{cases}$$

Proces ten możemy kontynuować uzyskując rozwiązania 2-go i wyższych rzędów w rachunku zaburzeń.

0.3 Kwantowe układy dwupoziomowe

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

0.3.1 Model matematyczny

Modelem matematycznym teorii układów dwupoziomowych jest przestrzeń Hilberta

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

gdzie wektory $\Psi \in \mathbb{C}^2$ będziemy reprezentować w danej bazie ortonormalnej $B = \{|1\rangle, |2\rangle\}$ jako macierze kolumnowe o elementach zespolonych

$$|\Psi\rangle = \psi_1 |1\rangle + \psi_2 |2\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}.$$

Jest oczywiste, że struktura $(\mathbb{C}^2, \mathbb{C}, +, \cdot)$ jest przestrzenią wektorową. Iloczyn wewnętrzny wektorów Ψ, Φ w \mathcal{H} definiujemy jako

$$\langle \Phi | \Psi \rangle := \psi_1 \phi_1^* + \psi_2 \phi_2^*.$$

Z powyższej definicji widoczne jest, czym jest funkcjonal liniowy $\langle \Phi |$ odpowiadający (zgodnie z tw. Riesz) wektorowi $|\Phi\rangle$

$$\langle \Phi | = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}^\dagger = (\phi_1^* \quad \phi_2^*).$$

Są to zatem macierze wierszowe będące *sprzężeniami hermitowskimi* macierzy kolumnowych reprezentujących wektory.

0.3.2 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* σ

$$\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z),$$

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:

- $\det \sigma_x = \det \sigma_y = \det \sigma_z = -1$
- $\text{Tr } \sigma_x = \text{Tr } \sigma_y = \text{Tr } \sigma_z = 0$

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbf{I}$$

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

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

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

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

0.3.3 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 skończonego wymiaru) przez macierze, której elementy są wyznaczone przez wartości odwzorowania \mathbf{A} na wektorach bazowych, tj. zakładając

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

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 $\mathbf{A} = a_0 \mathbf{I} + \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ z wartością własną λ , tj. zachodzi

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

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

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

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

0.4 OBLICZENIA KWANTOWE