

Задание 1

Выпишите операторы проекции и оператор квадрата орбитального углового момента в декартовых и сферических координатах. Какая система координат естественна для задачи ротатора? Как выглядят собственные функции проекции на ось z и квадрата оператора орбитального момента в сферических координатах. Какие два квантовых числа определяют собственные функции оператора квадрата орбитального движения? Используя справочник (программные библиотеки) постройте (визуализируйте) на компьютере собственные функции оператора квадрата момента импульса с $l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$.

Решение:

1. Операторы проекции и оператор квадрата орбитального углового момента в декартовых и сферических координатах:

Для начала распишем операторы проекции в декартовых координатах:

$$\hat{l}_x = -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y})$$

$$\hat{l}_y = i\hbar(x\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial x})$$

$$\hat{l}_z = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x})$$

Далее выпишем операторы проекции в сферических координатах:

$$\hat{l}_x = i\hbar(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cos\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi})$$

$$\hat{l}_y = -i\hbar(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi})$$

$$\hat{l}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

Выпишем оператор квадрата орбитального углового момента в декартовых координатах:

$$\hat{l}^2 = -\hbar^2((y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y})^2 + (x\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial x})^2 + (x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x})^2)$$

Распишем оператор квадрата орбитального углового момента в полярных координатах:

$$\hat{l}^2 = -\hbar^2(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2})$$

Какая система координат естественна для задачи ротатора:

Сферическая система координат является естественной для задачи ротатора в квантовой механике, потому что она обладает симметрией вращения вокруг оси z, которая совпадает с осью вращения ротатора.

В этой системе координат волновая функция ротатора зависит только от угла θ , который задает угол между осью z и радиус-вектором точки на поверхности сферы, а также от угла ϕ , который задает угол поворота вокруг оси z на поперечном сечении ротатора. Использование сферической системы координат для задачи ротатора в квантовой механике позволяет упростить решение уравнения Шредингера и получить аналитические выражения для энергетических уровней и волновых функций ротатора.

Кроме того, сферическая система координат позволяет естественным образом учитывать симметрию ротатора и связанные с ней законы сохранения, такие как сохранение момента импульса и его проекций на оси координат. Это позволяет более эффективно и точно описывать квантовые явления, связанные с вращательной симметрией ротатора, например, спектры поглощения и испускания молекул.

Как выглядят собственные функции проекции на ось z и квадрата оператора орбитального момента в сферических координатах:

Сначала можно рассмотреть уравнение для проекции на ось z:

$$\hat{l}_z \psi = l_z \psi$$
$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \phi} = l_z \psi$$

Здесь l_z это константа, а решение уравнение будет представлять из себя:

$$\psi = C(r, \theta) e^{\frac{il_z}{\hbar} \phi}, l_z = m\hbar, m \in Z$$

$C(r, \theta)$ – радиальная часть собственной функции, находится из уравнения Шредингера.

Собственные функции оператора квадрата орбитального углового момента:

$$\psi = Y_l^m(\theta, \phi)$$

Вторая часть уравнения выше – это сферическая функция, имеющая вид:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}$$

Какие два квантовых числа определяют собственные функции оператора квадрата орбитального движения?

l – это орбитальное квантовое число, которое определяет ее орбитальный момент импульса и описывает форму орбиты, $l = 0, 1, 2$, и так далее

m – это магнитное квантовое число, определяет составляющую орбитального момента импульса, который лежит вдоль заданной оси.

Используя справочник (программные библиотеки) постройте (визуализируйте) на компьютере собственные функции оператора квадрата момента импульса с $l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$:

Код:

```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
from scipy.special import sph_harm

n_max = 3
cmap = sns.color_palette("coolwarm", as_cmap=True)

x = np.linspace(-np.pi, np.pi, 200)
y = np.linspace(-np.pi/2, np.pi/2, 200)
xi, yi = np.meshgrid(x, y)

phi = x.copy()
phi[x < 0] = 2 * np.pi + x[x < 0]
theta = np.pi/2 - y
phii, thetai = np.meshgrid(phi, theta)

fig, axs = plt.subplots(n_max + 1, n_max + 1,
                        subplot_kw=dict(projection='hammer'),
                        figsize=(1.5*n_max*7, n_max*7))

xticks = [-(np.pi - np.pi/3), -np.pi/3, 0.0, np.pi/3, np.pi - np.pi/3]
yticks = [-np.pi/2+np.pi/12, -np.pi/3, -np.pi/6, 0.0, np.pi/6, np.pi/3,
np.pi/2 - np.pi/12]

images = []
for i in range(n_max + 1):
    for j in range(i + 1):
        sh_sp = sph_harm(j, i, phii, thetai).real * (-1)**j
        images.append(axs[i, j].pcolormesh(xi, yi, sh_sp, cmap=cmap))
        axs[i, j].grid(color='k', alpha=0.25)
        axs[i, j].set_yticks(yticks, minor=False)
        axs[i, j].tick_params(axis='both', labelsize=n_max*7)
        axs[i, j].set_xticks(xticks, minor=False)
        axs[i, j].set_title('l = ' + str(i) + ', m = ' + str(j),
fontsize=12 + n_max*7)
        axs[i, j].set_xlabel(r'$\phi$', fontsize=16 + n_max*7)
        axs[i, j].set_ylabel(r'$\theta$', fontsize=16 + n_max*7)

vmin = min(image.get_array().min() for image in images)
vmax = max(image.get_array().max() for image in images)
norm = plt.Normalize(vmin=vmin, vmax=vmax)
for im in images:
```

```

im.set_norm(norm)

for ax in axs[np.triu_indices_from(axs, k=1)]:
    ax.remove()

fig.tight_layout()

plt.show()

```

И где $m < 0$:

```

import numpy as np
from scipy.special import sph_harm
import matplotlib.pyplot as plt
import seaborn as sns

n_max = 3
cmap = sns.color_palette("coolwarm", as_cmap=True)

x = np.linspace(-np.pi, np.pi, 200)
y = np.linspace(-np.pi/2, np.pi/2, 200)
xi, yi = np.meshgrid(x, y)

phi = x.copy()
phi[x < 0] = 2 * np.pi + x[x < 0]
theta = np.pi/2 - y
phii, thetai = np.meshgrid(phi, theta)

fig, axs = plt.subplots(n_max, n_max, figsize=(1.5*n_max*7, n_max*7),
subplot_kw=dict(projection='hammer'))

xticks = [-(np.pi - np.pi/3), -np.pi/3, 0.0, np.pi/3, np.pi - np.pi/3]
yticks = [-np.pi/2+np.pi/12, -np.pi/3, -np.pi/6, 0.0, np.pi/6, np.pi/3,
np.pi/2 - np.pi/12]

images = []
for i in range(1, n_max + 1):
    for j in range(-i, 0):
        sh_sp = sph_harm(j, i, phii, thetai).real * (-1)**j
        images.append(axs[i - 1, j + i].pcolormesh(xi, yi, sh_sp,
cmap=cmap))
        axs[i - 1, j + i].grid(color='k', alpha=0.25)
        axs[i - 1, j + i].set_yticks(yticks, minor=False)
        axs[i - 1, j + i].tick_params(axis='both', labelsize=n_max*7)
        axs[i - 1, j + i].set_xticks(xticks, minor=False)
        axs[i - 1, j + i].set_title('l = ' + str(i) + ', m = ' + str(j),
fontsize=12 + n_max*7)
        axs[i - 1, j + i].set_xlabel(r'$\phi$', fontsize=16 + n_max*7)
        axs[i - 1, j + i].set_ylabel(r'$\theta$', fontsize=16 + n_max*7)

vmin = min(image.get_array().min() for image in images)

```

```

vmax = max(image.get_array().max() for image in images)
norm = colors.Normalize(vmin=vmin, vmax=vmax)
for im in images:
    im.set_norm(norm)

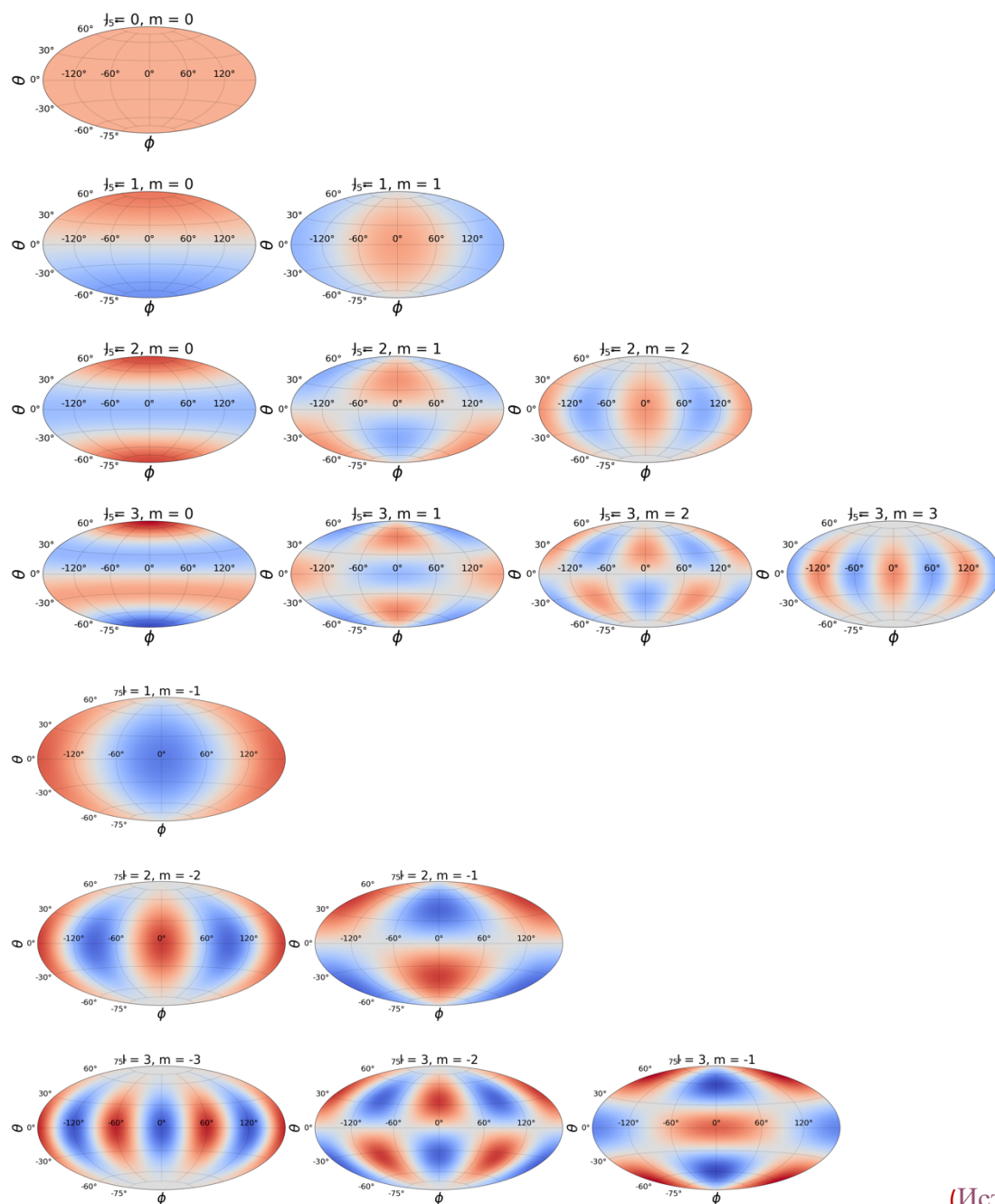
for ax in axs[np.triu_indices_from(axs, k=1)]:
    ax.remove()

fig.tight_layout()

fig.savefig('sph harmonics n max ' + str(n_max) + '.png', dpi=100)

```

Графики функций:



(Источник)

Задание 2

Среди величин r , p , L , L^2 найти пары совместно измеримых. Для совместно неизмеримых записать соотношения неопределённостей.

Решение:

Совместная неизмеримость величин r и p вытекает из соотношения неопределённостей Гейзенберга:

$$\Delta r \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Если мы говорим про остальные пары величин, то они являются совместно измеримыми, хотя если мы говорим про ортогональные компоненты оператора углового момента, следовательно:

$$\Delta L_i \Delta L_j \geq \frac{\hbar}{2} |\langle L_k \rangle|$$

Таким образом, для каждой пары совместно неизмеримых величин существует соотношение неопределённости Гейзенберга, которое ограничивает точность их измерения.

(Источник)

Задание 3

Покажите, что любые две диаметрально противоположные точки на сфере Блоха соответствуют двум ортогональным состояниям.

Решение:

Для представления однокубитовых квантовых состояний используется сфера Блоха, где каждой точке на сфере соответствует определенное квантовое состояние.

Противоположные точки на сфере Блоха представляют противоположные состояния кубита.

Две диаметрально противоположные точки на сфере Блоха имеют координаты (θ, φ) и $(\theta + \pi, \varphi + \pi)$, где θ – угол между вектором состояния и осью z , а φ – угол между проекцией

вектора состояния на плоскость $x - y$ и осью x .

Рассмотрим два квантовых состояния, которым соответствуют эти точки на сфере Блоха. Пусть $|0\rangle$ соответствует первой точке, а $|1\rangle$ соответствует второй точке, тогда мы можем записать:

Координаты двух диаметрально противоположных точек на сфере Блоха определяются углами θ и φ . Угол θ – это угол между вектором состояния и осью z , а φ – угол между проекцией вектора состояния на плоскость $x - y$ и осью x . Для двух квантовых состояний, соответствующих этим точкам, мы можем обозначить $|0\rangle$ первой точке и $|1\rangle$ второй точке на сфере Блоха.

$$|0\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|z+\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{i\varphi}|z-\rangle$$

$$|1\rangle = -\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|z+\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{i\varphi}|z-\rangle$$

где $|z+\rangle$ и $|z-\rangle$ – это собственные состояния оператора σ_z , соответствующие собственным значениям $+1$ и -1 .

Эти два квантовых состояния ортогональны друг другу, так как их скалярное произведение равно нулю:

$$\langle 0|1\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\left(-\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\right) + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{i\varphi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{-i\varphi} = 0$$

Тем самым мы доказали, что две диаметрально противоположные точки на сфере Блоха соответствуют двум ортогональным состояниям.

(Источник)

Задание 4

Какие существуют физические реализации кубитов? Назовите преимущества и недостатки указанных типов.

Решение:

Существует несколько физических реализаций кубитов, некоторые из них:

1. Сверхпроводниковые кубиты — это кубиты, основанные на сверхпроводимости. Они имеют высокую скорость операций и долгое время когерентности, что делает их очень перспективными для реализации квантовых компьютеров. Однако, они требуют очень низких температур и сложной экспериментальной аппаратуры.
2. Кубиты на основе ионов — это кубиты, которые используют ионы в ловушке. Они имеют долгое время когерентности и могут быть легко связаны в сеть для реализации квантовых алгоритмов. Недостатком является сложность изготовления и управления большим количеством ионов.
3. Кубиты на основе дефектов в кристаллах — это кубиты, которые используют дефекты в кристаллических материалах, например, в алмазах. Они могут иметь долгое время когерентности и работать при комнатной температуре, что делает их перспективными для реализации квантовых устройств. Однако, они также имеют некоторые ограничения в скорости операций.
4. Кубиты на основе квантовых точек — это кубиты, которые используют квантовые точки, такие как полупроводниковые наночастицы, для реализации квантовых состояний. Они имеют высокую скорость операций и могут быть легко интегрированы с существующими полупроводниковыми технологиями. Однако, они имеют ограничения в длительности когерентности.

Преимущества и недостатки каждого типа кубитов зависят от конкретной реализации и от задач, которые нужно решить с помощью квантовых устройств. В целом, сверхпроводниковые кубиты считаются наиболее перспективными для реализации квантовых компьютеров из-за их высокой скорости операций и долгого времени когерентности. Однако, они требуют сложной экспериментальной аппаратуры и очень низких температур.

Кубиты на основе ионов и дефектов в кристаллах также имеют долгое время когерентности, но требуют более сложных экспериментальных установок. Кубиты на основе квантовых точек могут иметь высокую скорость операций, но ограничены в длительности когерентности. Кроме того, каждый тип кубитов имеет свои уникальные особенности и ограничения, которые могут влиять на их применимость в конкретных задачах. Например, кубиты на основе ионов могут быть сложны в масштабировании из-за необходимости управлять большим количеством ионов.

Кубиты на основе дефектов в кристаллах могут иметь большую ошибку при инициализации и считывании квантовых состояний. Кубиты на основе квантовых точек могут испытывать эффекты окружающей среды, такие как шум, что может привести к деградации квантовых состояний. Каждый тип кубитов имеет свои преимущества и недостатки, и выбор определенного типа зависит от конкретной задачи и условий эксперимента.

(Источник)