



ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ ΚΑΙ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

ΔΗΜΗΤΡΙΟΥ ΕΛΕΥΘΕΡΙΟΣ

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

- ▶ Listing 6.22
 - ❑ Στοιχεία θεωρίας
 - ❑ Αποτελέσματα

- ▶ Listing 6.12
 - ❑ Στοιχεία θεωρίας
 - ❑ Αποτελέσματα

Listing 6.22 : Quantum Entanglement

- ▶ Υπολογισμοί
- ❑ του τελεστή της Hamiltonian
- ❑ των ιδιοτιμών
- ❑ των ιδιοκαταστάσεων

Στοιχεία Θεωρίας

- Οι πίνακες Pauli για τον χώρο των spin

$$X \equiv \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad Y \equiv \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad Z \equiv \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Στοιχεία Θεωρίας

- ▶ Ο τανυστής της Hamiltonian

$$H = \frac{\mu^2}{r^3} (X_A \otimes X_B Y_A \otimes Y_B + Z_A \otimes Z_B - 3Z_A \otimes Z_B)$$

Στοιχεία Θεωρίας

► παράδειγμα

$$X_A \otimes X_B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$H = \frac{\mu^2}{r^3} \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}$$

Στοιχεία Θεωρίας

- Σκοπός μας είναι η εύρεση των ιδιοκαταστάσεων έτσι ώστε να συγκρίνουμε τον πίνακα ιδιοτιμών, με τον πίνακα της Hamiltonian

$$H = \begin{pmatrix} \langle \phi_1 | H | \phi_1 \rangle & \langle \phi_1 | H | \phi_2 \rangle & \langle \phi_1 | H | \phi_3 \rangle & \langle \phi_1 | H | \phi_4 \rangle \\ \langle \phi_2 | H | \phi_1 \rangle & \langle \phi_2 | H | \phi_2 \rangle & \langle \phi_2 | H | \phi_3 \rangle & \langle \phi_2 | H | \phi_4 \rangle \\ \langle \phi_3 | H | \phi_1 \rangle & \langle \phi_3 | H | \phi_2 \rangle & \langle \phi_3 | H | \phi_3 \rangle & \langle \phi_3 | H | \phi_4 \rangle \\ \langle \phi_4 | H | \phi_1 \rangle & \langle \phi_4 | H | \phi_2 \rangle & \langle \phi_4 | H | \phi_3 \rangle & \langle \phi_4 | H | \phi_4 \rangle \end{pmatrix}$$

Αποτελέσματα

Hamiltonian without $\mu\hbar^2/r^3$ factor

```
[[-2  0  0  0]
 [ 0  2  2  0]
 [ 0  2  2  0]
 [ 0  0  0 -2]]
```

Eigenvalues

```
[ 4.00000000e+00+0.j  4.4408921e-16+0.j -2.00000000e+00+0.j
 -2.00000000e+00+0.j]
```

Eigenvectors (in columns)

```
[[ 0.          0.          1.          0.         ]
 [ 0.70710678  0.70710678  0.          0.         ]
 [ 0.70710678 -0.70710678  0.          0.         ]
 [ 0.          0.          0.          1.         ]]
```

Hamiltonian in Eigenvector Basis

```
[[ 4.00000000e+00  0.00000000e+00  0.00000000e+00  6.65133815e-16]
 [ 0.00000000e+00 -2.00000000e+00  0.00000000e+00  0.00000000e+00]
 [ 0.00000000e+00  0.00000000e+00 -2.00000000e+00  0.00000000e+00]
 [ 6.28036983e-16  0.00000000e+00  0.00000000e+00  9.86076132e-32]]
```


Σχολιασμοί

- ▶ Το πρόγραμμα μας έδωσε τα αναμενόμενα αποτελέσματα
- ▶ Κάποιες τιμές δεν πήρα ακριβώς την τιμή μηδέν λόγω του αριθμητικού υπολογισμού

Listing 6.12 : Motion of a wave packet within harmonic oscillator well

- ▶ Προσομοίωση της κίνησης μίας κυματοσυνάρτησης, σε δυναμικό αρμονικού ταλαντωτή.

Στοιχεία Θεωρίας

- Η χρονοεξαρτώμενη εξίσωση Schrodinger (σε μία διάσταση) με την εισαγωγή δυναμικού αρμονικού ταλαντωτή

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + \frac{1}{2} kx^2 \psi(x,t)$$

Στοιχεία Θεωρίας

- ▶ Η λύση της εξίσωσης Schrodinger, έχει την μορφή

$$\psi(x,t) = \frac{\alpha^{1/2}}{\pi^{1/4}} \exp \left[-\frac{1}{2}(x - x_0 \cos \omega t)^2 - i \left(\frac{\omega t}{2} + x x_0 \sin \omega t - \frac{1}{4} x_0^2 \sin 2\omega t \right) \right]$$

- ▶ Ενώ η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας είναι η

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha^2 [x - a \cos(\omega_c t)]^2}$$

Αποτελέσματα

