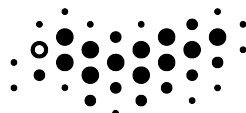


Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
"Национальный исследовательский университет ИТМО"



УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Дополнительные главы физики
Задание после лекции 08.05.2023
"Операторы, кубиты и что-то еще про квантовую
механику"

Выполнил:
Лопатенко Г. В., М32021

Преподаватель:
Музыченко Я. Б.

Май, 2023

Содержание

1	Операторы и их собственные функции	2
2	Совместно измеримые по Гейзенбергу величины	7
3	Сфера Блоха и две диаметрально противоположные точки	9
4	Физические реализации кубитов	10

1 Операторы и их собственные функции

Выписать операторы проекций \hat{L}_i и оператор квадрата орбитального углового момента \hat{L}^2 в декартовых и сферических координатах. Как выглядят собственные функции \hat{L}_z и \hat{L}^2 ? Какие квантовые числа определяют собственные функции оператора \hat{L}^2 ? Построить некоторые из собственных функций оператора \hat{L}^2 .

При погружении в математический аппарат релевантных тем можно погибнуть, но все же попытаем удачу, тем более мое последнее моделирование было тесно связано с поиском и построением (хоть и по рекуррентным полиномам Лежандра) угловых собственных функций уравнения Шредингера. Итак, начнем с оператора момента импульса:

$$\hat{L} = [\hat{r}, \hat{p}] = \hat{L}_x \vec{e}_x + \hat{L}_y \vec{e}_y + \hat{L}_z \vec{e}_z$$
$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 \vec{e}_x + \hat{L}_y^2 \vec{e}_y + \hat{L}_z^2 \vec{e}_z$$

Запишем в декартовой системе координат:

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$$
$$\hat{L}_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$$
$$\hat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

Теперь при переходе в сферическую систему координат:

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad y = r \sin \theta \sin \phi, \quad z = r \cos \theta$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$
$$\hat{L}_x = -i\hbar \left(\sin \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \theta \cos \phi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

Оператор \hat{L}_y выражается по некоммутирующим $[\hat{L}_x, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_y$.

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

И через оператор Лежандра: $\hat{L}^2 = -\hbar^2 \hat{\Lambda}$. Таким образом, решение уравнения на собственные значения оператора Лежандра определяет также собственные функции и значения оператора квадрата момента импульса:

$$(\hat{\Lambda} + \lambda \hat{I}) Y(\theta, \phi) = 0$$

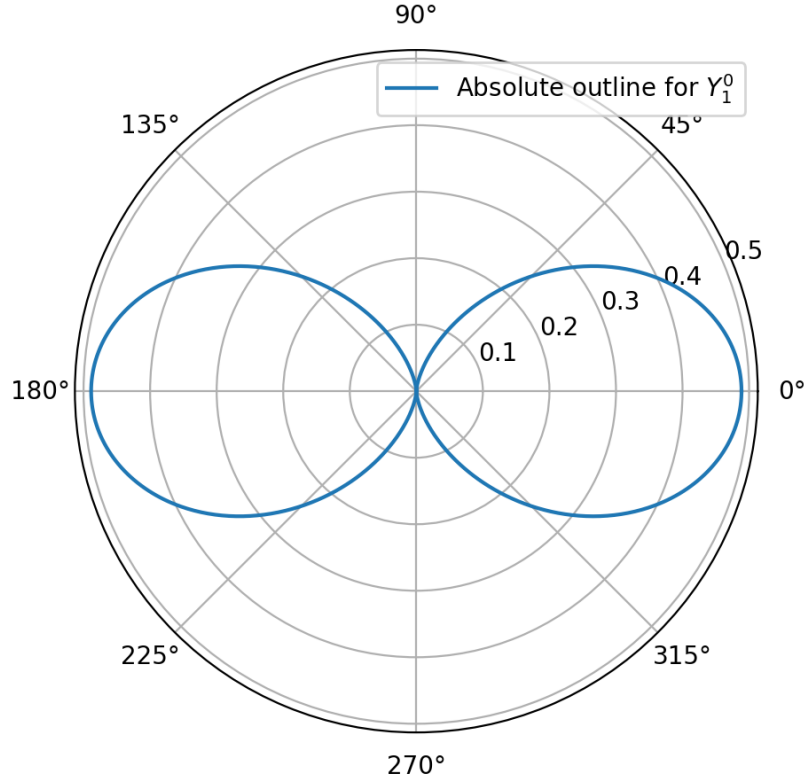
Запишем решения в сферических координатах (для задач ротатора):

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

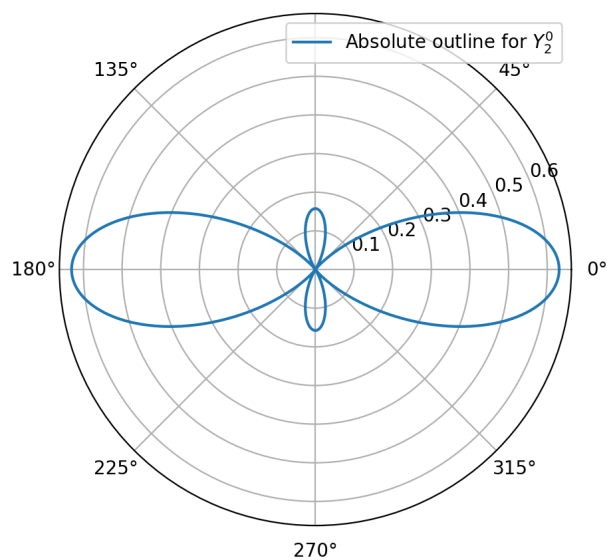
Заметим, что в записи собственных функций участвуют квантовое орбитальное (азимутальное) число l и квантовое магнитное число m .

Построим проекции угловых собственных функций. Очевидно, что тела вращения относительно главной оси будут представлять собой форму орбиталей (можно ознакомиться в моделировании, ссылка в источниках).

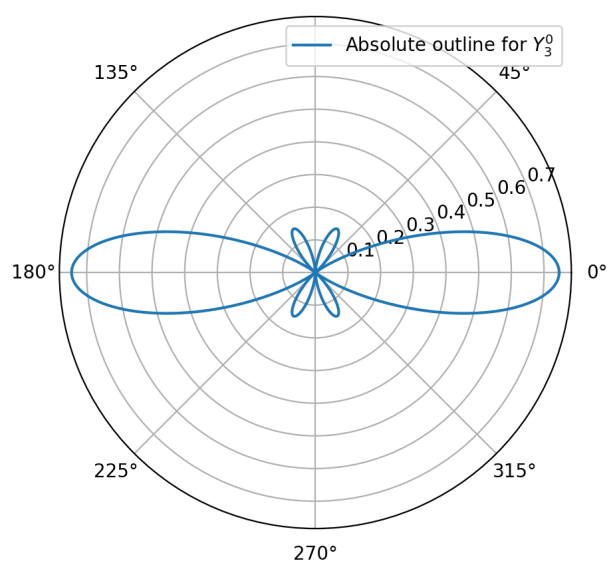
Orbital geometrically probabilistic plot $l = 1, m = 0$



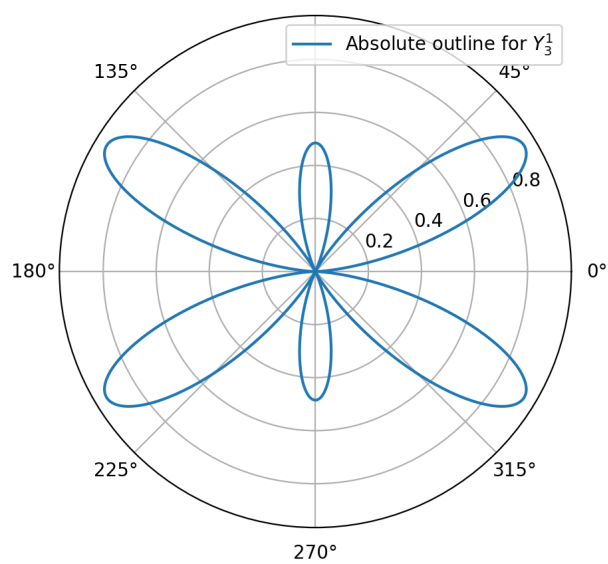
Orbital geometrically probabilistic plot $l = 2, m = 0$



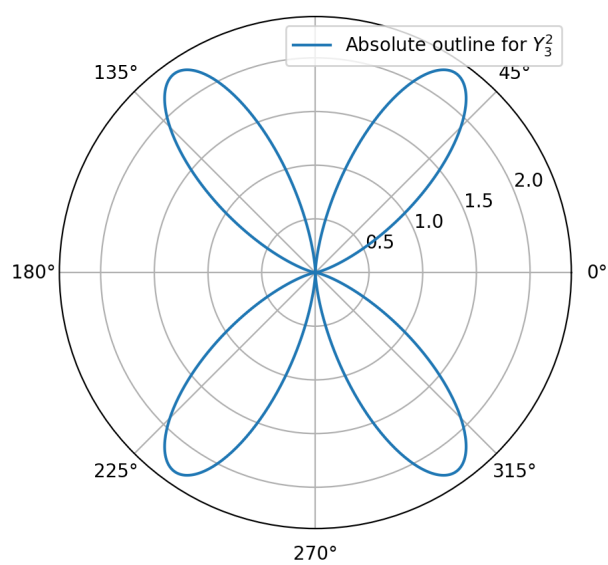
Orbital geometrically probabilistic plot $l = 3, m = 0$



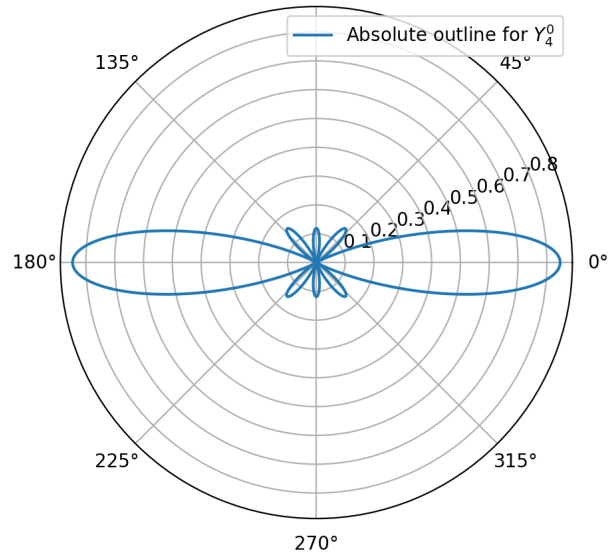
Orbital geometrically probabilistic plot $l = 3, m = 1$



Orbital geometrically probabilistic plot $l = 3, m = 2$



Orbital geometrically probabilistic plot $l = 4, m = 0$



В моделировании полиномы Лежандра задавались рекуррентно, строились проекции угловых функций и их трехмерные визуализации.

Источники:

- Лопатенко, Жуйков. Квантово-механическое моделирование
- §3.8. Момент импульса в квантовой механике
- §3.9. Оператор квадрата момента импульса. Сферические функции.

2 Совместно измеримые по Гейзенбергу величины

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

К счастью математиков и несчастью физиков-практиков, не все величины, описывающие квантовый мир, могут быть совместно измеримыми. Для математического аппарата описания квантовой физики свойственен операторный анализ, поэтому вывод о совместной измеримости будем делать исключительно из факта коммутиремости или некоммутируемости операторов. Операторы коммутируют, если $[\hat{G}, \hat{L}] = \hat{G}\hat{L} - \hat{L}\hat{G} = 0$. Тогда коммутирующие операторы говорят о соизмеримости величин. Коммутатор записывается в виде $[\hat{G}, \hat{L}] = i\hat{K}$ и по неравенству для введенной нормы соотношение неопределенности представим в виде:

$$\langle \Delta \hat{G}^2 \rangle \langle \Delta \hat{L}^2 \rangle \geq \frac{\langle \hat{K} \rangle^2}{4}$$

1. Рассмотрим на примере некоммутирующих $\hat{r} = r$ и $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r}$:

$$\begin{aligned} [\hat{r}, \hat{p}]\phi(r) &= r \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \right) \phi(r) - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \right) r \phi(r) \\ [\hat{r}, \hat{p}]\phi(r) &= -ri\hbar \frac{\partial \phi(r)}{\partial r} + i\hbar \left(\phi(r) + \frac{r \partial \phi(r)}{\partial r} \right) = i\hbar \phi(r) \neq 0 \end{aligned}$$

Для операторов координаты и импульса соотношение неопределенности:

$$\langle \Delta r \rangle^2 \langle \Delta p \rangle^2 \geq \frac{\hbar^2}{4} \longrightarrow \Delta r \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

2. Рассмотрим на примере коммутирующих $\hat{r} = r$ и $\hat{L} = [\hat{r}, \hat{p}]$:

$$\begin{aligned} [\hat{r}, \hat{L}]\phi(r) &= [\hat{r}, [\hat{r}, \hat{p}]]\phi = ri\hbar\phi - [\hat{r}, \hat{p}]r\phi = ri\hbar\phi - \left(-ri\hbar \frac{\partial(r\phi)}{\partial r} + i\hbar \frac{\partial(r^2\phi)}{\partial r} \right) \\ [\hat{r}, \hat{L}]\phi(r) &= 2ri\hbar\phi - 2ri\hbar\phi + r^2 i\hbar\phi' - r^2 i\hbar\phi' = 0, \text{ но } [\hat{r}, \hat{L}_r]\phi(r) \neq 0 \end{aligned}$$

Операторы координаты и полного момента импульса коммутирующие. Заметим, что для проекций это свойство не выполняется и $\Delta r \Delta L_r \geq \frac{\hbar}{2}$

3. Заметим, что для операторов $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r}$ и $\hat{L} = [\hat{r}, \hat{p}]$ исход будет тот же, то есть полный оператор \hat{L} коммутирует с оператором проекции импульса, но соотношение Гейзенберга выполнится для операторов проекции момента импульса и проекции импульса: $\hat{L}_r \hat{p}_r \geq \frac{\hbar}{2}$.

4. Будем рассматривать оператор квадрата момента импульса в сферической системе координат $\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Lambda$ (где Λ - оператор Лежандра) и оператор любой проекции момента импульса \hat{L}_r .

В этот раз не будем представлять выкладки, так как они (опять же не совсем честно и строго) содержатся в лекционном материале, где доказывается, что:

$$[\hat{L}_z, \hat{L}^2] = [\hat{L}_y, \hat{L}^2] = [\hat{L}_x, \hat{L}^2] = 0$$

Получается, что любой из операторов проекции момента импульса коммутирует с оператором квадрата момента импульса, а значит эти величины совместно измеримы. Тем не менее между собой любая пара операторов проекции момента импульса не коммутирует.

Источники:

- Wikipedia: Коммутатор операторов (алгебра)
- Формальное доказательство $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] \neq 0$
- Формальное доказательство $[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0$

3 Сфера Блоха и две диаметрально противоположные точки

Показать, что любые две диаметрально противоположные точки на Q-сфере соответствуют двум ортогональным состояниям.

Ответственные студенты еще в симуляциях *IBM Quantum* убедились, что любое суперпозиционное состояние на Q-сфере можно представить:

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

Тогда достаточно очевидно, что диаметрально противоположная точка:

$$\chi' = \cos\left(\frac{\pi - \theta}{2}\right)|0\rangle + \sin\left(\frac{\pi - \theta}{2}\right)e^{i(\pi - \phi)}|1\rangle$$

Будем работать со скалярным произведением в стандартном базисе:

$$(\chi, \chi') = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\cos\left(\frac{\pi - \theta}{2}\right) + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{i\phi}\sin\left(\frac{\pi - \theta}{2}\right)e^{i(\pi - \phi)}, \text{ при } e^{i\pi} = -1$$

$$(\chi, \chi') = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\cos\left(\frac{\pi - \theta}{2}\right) - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\sin\left(\frac{\pi - \theta}{2}\right) = \cos\left(\frac{\theta}{2} + \frac{\pi - \theta}{2}\right) = 0$$

Оказалось, что скалярное произведение обнуляется для любых выбранных углов (θ, ϕ) , задающих положение точки на сфере, то есть диаметрально противоположные состояния суперпозиции действительно ортогональны.

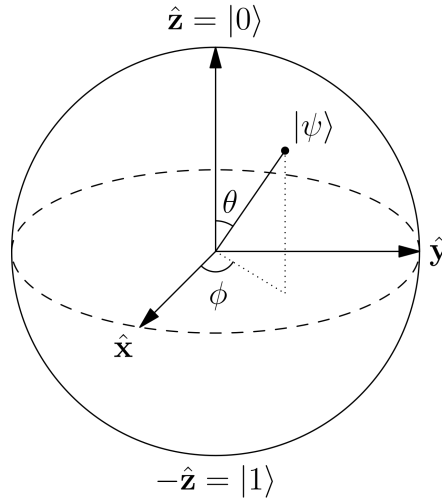


Рис. 1: Сфера Блоха

4 Физические реализации кубитов

Перечислить преимущества и недостатки физ. реализаций кубитов.

Для анализа физических реализаций двухуровневой квантовой системы необходимо обратить внимание на требования DiVincenzo:

1. управляемость (по набору квантовых гейтовых операций)
2. масштабируемость (по взаимодействию между кубитами)
3. считываемость
4. независимость от окружения

Первые модели кубитов на основе атомных систем как раз были достаточно хорошо изолированы от окружающей среды, захват и манипуляция атомов высокоточно осуществлялась при помощи дорогостоящих и высокотехнических лазерных установок для оптической накачки и лазерного охлаждения, однако глобальным минусом таких систем являлась пара запись-считывание ввиду слабого взаимодействия атомов друг с другом.

С развитием теоретической базы становилось понятно, что очень перспективны твердотельные системы, выступающие в роли кубитов: например, спины в твердых телах и сверхпроводящие контура микронных размеров (для фазовых, потоковых и зарядовых кубитов). Твердотельные системы имеют массу преимуществ над нейтральными атомами и ионами в ловушках: хорошо отработанная технология изготовления наноструктур и мезоструктур. Контроль над кубитами (манипуляция) в таком случае производится на основе электромагнитных схем управления или оптически. Недостатком твердотельных систем является малое значение характеристики времени декогеренции (фазовой релаксации).

Источники:

- Диссертация на соискание ученой степени КФМН Денисенко М.В. "Амплитудная спектроскопия и мониторинг состояний сверхпроводниковых кубитов"