Introduzione alla Meccanica Quantistica per il Quantum Computing

UniVR - Dipartimento di Informatica

Fabio Irimie

1° Semestre 2024/2025

Indice

1 Introduzione

TODO

2 Formalismo della meccanica quantistica

Deriviamo il formalismo partendo dall'esperimento di Stern-Gerlach e di Feynman utilizzando la notazione di Dirac.

2.1 Principi

- Ad un **sistema fisico** corrisponde uno spazio vettoriale complesso di dimensione n, dove n è il numero di gradi di libertà del sistema quanto-meccanico. Il grado di libertà è il numero di alternative, o scelte, a disposizione del sistema (da qui deriva il termine "quantistico", siccome le alternative sono quantizzate).

  $$\text{Sistema fisico } \rightarrow \mathbb{C}^n$$

  Ad esempio nell'espermimento di Stern-Gerlach la misura è lo spin di un atomo che può avere solo due valori, quindi $\pm\frac{\hbar}{2}$, ovvero $n = 2$.

  Nell'esperimento di Feynman con la doppia fenditura il sistema è una particella che può passare per una delle due fenditure, quindi $n = 2$. Se oltre al percorso in cui è passato l'atomo si vuole sapere anche lo spin, allora il grado di libertà aumenta.

  I sistemi con $n = 2$ si chiamano **sistemi a due stati**.

- Allo **stato fisico** corrisponde un vettore di stato dello spazio vettoriale complesso chiamato **Ket**. Nella notazione di Dirac il vettore di stato è indicato con $|\alpha\rangle$. Questo vettore è definito a meno di una costante, quindi:

  $$|\alpha\rangle \iff c\,|\alpha\rangle$$

  sono lo stesso stato e ciò significa che il Ket è **normalizzato** e sarà un vettore unitario.

  Ad esempio un atomo di argento con un certo spin rappresenta uno stato fisico. E il Ket contiene tutte le informazioni riguardanti alla direzione (""raggi"") che si possono avere su quell'atomo.

- Un **osservabile** è una variabile fisica che si può misurare. All'osservabile corrisponde un operatore dello spazio $\mathbb{C}^n$ che agisce sui Ket e restituisce un altro Ket:

  $$\mathcal{A}\,|\alpha\rangle \quad \text{dove } \mathcal{A} \text{ è l'operatore che agisce su alfa}$$

  (potrebbero essere matrici se si trova una base ad esempio)

  Ci sono degli operatori importanti, cioè quelli che agendo su un Ket $|a_i\rangle$ restituiscono un vettore parallelo ad $|a_i\rangle$ e quindi sono **autoKet** (si può pensare agli autovettori dell'algebra linare):

$$\underbrace{\mathcal{A}\,|a_i\rangle}_{\text{autoKet} \leftrightarrow \text{autostato}} = \underbrace{a_i}_{\text{autovalore}} \ |a_i\rangle$$

L'oggetto risultante rappresenta lo stesso stato fisico, siccome è solo moltiplicato per una costante. L'insieme degli autoKet e autostati è rappresentato come:

$$\{|a_i\rangle\}\,;\{a_i\}$$

Ad esempio nell'esperimento di Stern-Gerlach si aveva l'operatore $\mathcal{S}_{\hat{z}}$ che rappresentava la misura dello spin lungo l'asse z.

$$\{\mathcal{S}_z;\pm\}\,;\left\{\pm\frac{\hbar}{2}\right\}$$

nell'esperimento si ha che l'operatore $\mathcal{S}_z$ che agisce sullo stato a spin in su restituisce:

$$\mathcal{S}_z\,|\mathcal{S}_z;+\rangle = \frac{\hbar}{2}\,|\mathcal{S}_z;+\rangle$$

l'operatore $\mathcal{S}_z$ agisce sullo stato a spin in giu restituisce:

$$\mathcal{S}_z\,|\mathcal{S}_z;-\rangle = -\frac{\hbar}{2}\,|\mathcal{S}_z;-\rangle$$

Nell'esperimento di Stern-Gerlach i due autoKet di $\mathcal{S}_z$ sono una base dello spazio $\mathbb{C}^2$ e quindi si può scrivere un qualsiasi Ket come combinazione lineare di questi due Ket:

$$|\mathcal{S}_x;\pm\rangle$$
$$|\mathcal{S}_y;\pm\rangle$$

Un generico stato rappresentato come combinazione lineare di questi Ket è:

$$|\alpha\rangle = c_+\,|\mathcal{S}_z;+\rangle + c_-\,|\mathcal{S}_z;-\rangle$$

o anche la seguente notazione (qbit):

$$|\alpha\rangle = c_0\,|0\rangle + c_1\,|1\rangle$$

- Qualsiasi **generico stato fisico** del sistema si può rappresentare come **sovrapposizione di autostati**, cioè una combinazione lineare degli autoKet.

$$|\alpha\rangle = \sum_i^n c_i\,|a_i\rangle$$

(questo sviluppo è unico per il sistema a_i) dove n è il grado di libertà e:

$$A\,|a_i\rangle = a_i\,|a_i\rangle$$

Finchè non viene effettuata una misura, il sistema è in uno stato di sovrapposizione e non si può sapere il suo stato. Trovare tutti gli autostati di un

sistema si chiama problema di quantizzazione.

2.2 Operazioni

2.2.1 Prodotto "interno"

- Esiste una corrispondenza uno ad uno tra lo spazio degli stati (Ket) e un suo spazio duale (Bra):
$$\underset{\text{Ket}}{|\alpha\rangle} \xleftrightarrow{\text{Duale}} \underset{\text{Bra}}{\langle\alpha|}$$
La base dei Ket è in corrispondenza duale con la base dei Bra:
$$\underbrace{\{|a_n\rangle\}}_{\text{autoKet}} \xleftrightarrow{\text{C.D.}} \underbrace{\{\langle a_n|\}}_{\text{autoBra}}$$
ad exempio:
$$C\,|\alpha\rangle \xleftrightarrow{\text{C.D.}} C^*\,\langle\alpha|$$
dove C^* è il complesso coniugato di C. Questo vuol dire che ad una somma di Ket corrisponde la somma dei Bra.

Vogliamo definire un prodotto tra stati fisici.

Definizione 2.1 (Prodotto interno)**.** È definito **prodotto interno** il prodotto tra un Ket e un Bra:
$$\underbrace{\langle\alpha|\beta\rangle}_{\text{Notazione di Dirac}} = (\langle\alpha|)\cdot(|\beta\rangle)$$

Proprietà:

- $\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^*$
- $\langle\alpha|\alpha\rangle \geqslant 0$, quindi $\langle\alpha|\alpha\rangle$ è reale.

Definizione 2.2 (Ket ortogonali)**.** Due Ket sono **ortogonali** quando:
$$\langle\alpha|\beta\rangle = 0$$

Con questo operatore si possono normalizzare gli stati fisici, che sono definiti a meno di una costante.

Definizione 2.3 (Normalizzazione)**.** La normalizzazione di uno stato fisico si esegue come:
$$|\hat{\alpha}\rangle = \frac{|\alpha\rangle}{\sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}}$$

Di conseguenza
$$\langle\hat{\alpha}|\hat{\alpha}\rangle = 1$$

2.2.2 Operazioni illecite

Alcune operazioni nella meccanica quantistica sono vietate, perchè non hanno significato.

- Un operatore non può agire su un Ket da destra:
$$A\,|\alpha\rangle \quad \checkmark$$
$$|\alpha\rangle\,A \quad \times$$
Analogamente un osservabile non può agire da sinistra su un Bra:
$$\langle\alpha|\,A \quad \checkmark$$
$$A\,\langle\alpha| \quad \times$$
- Non ha significato moltiplicare due Ket:
$$|\alpha\rangle\,|\beta\rangle \quad \times$$
Non ha significato moltiplicare due Bra:
$$\langle\alpha|\,\langle\beta| \quad \times$$

La notazione $|\alpha\rangle\,|\beta\rangle$ si può utilizzare solo quando si hanno spazi fisici diversi (due variabili diverse dello stesso sistema o due sistemi diversi). Ad esempio se si hanno 2 particelle si può rappresentare il sistema fisico di ogni singola particella con un Ket diverso:
$$|\alpha\rangle_1$$
$$|\alpha\rangle_2$$
ma si può anche rappresentare il sistema fisico totale di entrambe le particelle con la seguente notazione:
$$|\alpha\rangle_1 \otimes |\alpha\rangle_2 = |\alpha\rangle_1\,|\alpha\rangle_2$$

Nell'esperimento di Feynman avremo lo stato fisico del percorso:
$$|\text{Percorso}\rangle$$
ma se si vuole rappresentare il percorso e lo spin si avrà:
$$|\text{Percorso}\rangle \otimes |\text{Spin}\rangle = |\text{Percorso}\rangle\,|\text{Spin}\rangle$$

2.2.3 Prodotto esterno

In meccanica quantistica ha senso definire un prodotto esterno:
$$|\alpha\rangle\,\langle\beta|$$
Questo oggetto è un operatore.

Teorema 2.1 (Assioma associativo della moltiplicazione)**.**

$$(|\alpha\rangle\langle\beta|)\,|\psi\rangle = |\alpha\rangle\,(\langle\beta|\psi\rangle)$$

Secondo l'assioma associativo della moltiplicazione si ha che:

$$\underbrace{(|\alpha\rangle\langle\beta|)}_{\text{Operatore}}\,\underbrace{|\psi\rangle}_{\text{Ket}} = \underbrace{|\alpha\rangle}_{\text{Ket}}\,\underbrace{(\langle\beta|\psi\rangle)}_{\text{Numero}}$$

Osserviamo che $(|\beta\rangle\langle\alpha|)$ è un operatore

Ha agito come proiettore, proiettando il Ket $|\psi\rangle$ sullo stato $|\alpha\rangle$ (esegue una rotazione di uno stato).

2.2.4 Operatore aggiunto

Definizione 2.4 (Operatore aggiunto)**.** Si definisce operatore aggiunto l'operatore A^+. Ogni operatore che agisce su uno stato ha una corrispondenza uno ad uno con un operatore duale (operatore aggiunto) che agisce su un Bra:

$$A\,|\alpha\rangle \overset{\text{C.D.}}{\longleftrightarrow} \langle\alpha|\,A^+$$

Se $A = A^+$ allora l'operatore è **hermitiano** o **autoaggiunto**.

2.3 Rappresentazione matriciale

2.3.1 Ket di base

Se $A = A^+$, allora

- Gli autovalori $\{a_i\}$ sono reali
- Gli autoKet $\{|a_i\rangle\}$ sono una base

$$\langle a_i|a_j\rangle = \delta_{ij}$$

e un ket arbitrario potrà essere espresso come sovrapposizione di autoket dell'osservabile A:

$$\text{Ket qualunque} = \sum_i \text{autoKet di } A$$

$$\Downarrow$$

$$|\alpha\rangle = \sum_i c_i\,|a_i\rangle$$

L'oggetto c_i è la proiezione $\langle a_i|\alpha\rangle$:

$$\langle a_i|\alpha\rangle = \sum_i c_i\,\langle a_i|a_i\rangle = c_i$$

ovvero:

$$|\alpha\rangle = \sum_i |a_i\rangle \langle a_i|\alpha\rangle$$

Questa è la **relazione di completezza**, che dice che a_i è base dello spazio:

$$\sum |a_i\rangle \langle a_i| = \mathbb{I}$$

Questo oggetto è il proiettore sul Ket di base $|a_i\rangle$ e si può indicare anche come:

$$|a_i\rangle \langle a_i| = \Lambda_{a_i}$$

Da questo si deriva che la somma dei coefficienti al quadrato fa 1:

$$\sum |c_i|^2 = 1$$

perchè:

$$\begin{aligned}
\langle\alpha|\alpha\rangle &= 1 \\
&= \langle\alpha| \left(\sum |a_i\rangle \langle a_i|\right) |\alpha\rangle \\
&= \sum_i \langle\alpha|a_i\rangle \langle a_i|\alpha\rangle \\
&= \sum |c_i|^2 = 1
\end{aligned}$$

2.4 Teoria della misura

In pratica ogni Ket si può rappresentare come un vettore colonna:

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix}$$

dove le componenti α_n sono i coefficienti della sovrapposizione $\langle a_i|\alpha\rangle$

Ogni Bra è un vettore riga:

$$\langle\alpha| = \begin{pmatrix} \alpha_1^* & \cdots & \alpha_n^* \end{pmatrix}$$

dove le componenti sono il complesso coniugato delle componenti del Ket.

La componente $\langle\alpha|\beta\rangle$ si può calcolare come un prodotto scalare:

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1^* & \cdots & \alpha_n^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_n \end{pmatrix}$$

e quindi:

$$|\alpha\rangle \langle\beta| = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_1^* & \cdots & \beta_n^* \end{pmatrix}$$

In entrambi i casi si ottiene una matrice quadrata $N \times N$.

Qualunque operatore B è rappresentato da una matrice quadrata $N \times N$ e agisce sui Bra (a destra) o sui Ket (a sinistra):

$$B = \sum_i \sum_j \underbrace{|a_i\rangle \langle a_j| B |a_j\rangle \langle a_i|}_{N^2 \text{ numeri } B_{ij}} = \mathbb{I}B\mathbb{I}$$

cioè si moltiplica per l'identità a destra e sinistra:

Nella base a_i $A = A^+$ è osservabile e la sua base è diagonale con elementi reali:

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_n \end{pmatrix} \quad a_i \in \mathbb{R}$$

3 Quantizzazione dell'esperimento Stern-Gerlach

Scelgo i Ket di base:

$$|\mathcal{S}_z; \pm\rangle$$

con la seguente notazione:

$$\{|+\rangle, |-\rangle\} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |0\rangle, |1\rangle$$

3.1 Operatori

- Il più semplice operatore è l'operatore di completezza:

$$\mathbb{I} = |+\rangle \langle +| + |-\rangle \langle -|$$

- Operatore $\mathcal{S}_z$

$$\mathcal{S}_z = \frac{\hbar}{2} [|+\rangle \langle +| - |-\rangle \langle -|]$$

  in forma matriciale:

$$\mathcal{S}_z = \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{pmatrix}$$

- Autostati di $\mathcal{S}_z$:

$$\mathcal{S}_z |+\rangle = \frac{\hbar}{2} |+\rangle$$
$$\mathcal{S}_z |-\rangle = -\frac{\hbar}{2} |-\rangle$$

Uno stato arbitrario α sarà dato dalla combinazione di autoKet di cui i coefficienti si trovano proiettando α sugli autoKet:

$$|\alpha\rangle = |+\rangle \overbrace{\langle +|\alpha\rangle}^{c_+} + |-\rangle \overbrace{\langle -|\alpha\rangle}^{c_-}$$
$$= \begin{pmatrix} \langle +|\alpha\rangle \\ \langle -|\alpha\rangle \end{pmatrix}$$

4 Processi della misura

Il quadrato della funzione d'onda descrive la probabilità di trovare una particella in una certa posizione:

$$P = |\phi|^2$$

Se abbiamo due particelle e vogliamo calcolare la probabilità della somma delle ampiezze notiamo che:

- Se non misuro si ha interferenza:

$$\sum \phi \quad P = |\phi_1 + \phi_2|^2$$

- Se misuro si ha che la probabilità è la somma delle probabilità:

$$P = \sum P$$

4.1 Teoria della misura

Prendiamo in considerazione la base $|a_i\rangle$, sappiamo che lo stato prima della misura è espresso come sovrapposizione di autostati:

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |a_i\rangle \quad c_i = \langle a_i|\psi\rangle$$

1. Se faccio la misura di un osservabile A lo stato ψ **collassa** in un autostato di A con una certa probabilità P :

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\text{Misura di A}} |a_i\rangle$$

   il risultato della misura è a_i, cioè l'autovalore. Sono i possibili risultati della misura, **lo spettro dell'osservabile**.

   La probabilità P di misurare a_i è data dal coefficiente dello sviluppo di $|\psi\rangle$ al quadrato:

$$P = |c_i|^2 = |\langle a_i|\psi\rangle|^2 \quad \text{Con stato normalizzato}$$

   La misura in meccanica quantistica cambia lo stato del sistema. Ad esempio nell'esperimento di Stern-Gerlach lo stato $|\psi\rangle$ rappresenta lo spin di un atomo. Prima di misurare non sappiamo che stato abbia, cioè è in sovrapposizione. Attraverso un operatore misuriamo lo spin e la particella potrà dare come risultato l'autostato $|+\rangle$ o l'autostato $|-\rangle$:

2. Se $|\psi\rangle = |a\rangle$ è un autostato, allora la misura di A non lo cambia:

$$|a\rangle \xrightarrow{\text{Misura di A}} |a\rangle$$

   Ad esempio nell'esperimento di Stern-Gerlach se dopo aver misurato lo spin $\mathcal{S}_z$ ho trovato l'autostato $|+\rangle$ rifaccio la misura ritrovo lo stesso autostato ed è un risultato certo:

Definizione 4.1 (Valore di aspettazione)**.** Il **valore di aspettazione** di un osservabile A rispetto a $|\psi\rangle$ è la media dei valori che si possono ottenere misurando A sullo stato $|\psi\rangle$:

$$\langle A\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi|\left(A\,|\psi\rangle\right)$$

Dimostrazione:

$$\begin{aligned}\langle\psi|A|\psi\rangle &= \sum_i\sum_j \langle\psi|a_i\rangle\,\langle a_i|\underbrace{A\,|a_j\rangle}_{a_j|a_j\rangle}\langle a_j|\psi\rangle\\ &= \sum_i a_i\,\langle\psi|a_i\rangle\,\langle a_i|\psi\rangle\\ &= \sum_i a_i|\,\langle a_i|\psi\rangle\,|^2\end{aligned}$$

dove a_i è la misura e $|\,\langle a_i|\psi\rangle\,|^2 = P$ è la probabilità di ottenerla.

4.2 Osservabili compatibili

$\mathcal{S}_z, \mathcal{S}_x \quad (\mathcal{S}_y)$ non si possono misurare simultaneamente. Si vuole definire cosa significa che due osservabili siano compatibili.

Definizione 4.2. Dati due osservabili $[A, B] = AB - BA$ è il **commutatore** di A e B.

- $A(B)\,|\psi\rangle$ vuol dire che si misura prima B e poi ψ

Teorema 4.1. Se A, B commutano

- Gli elementi di B sono diagonali nella rappresentazione di A, cioè la base di A $|a_i\rangle$ è anche la base di B

Due operatori che commutano hanno una base comune e la notazione è:

$$|a, b\rangle$$

Consideriamo che $[A, B]$ siano osservabili che commutano

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\text{Misuro A}} |a\rangle \xrightarrow{\text{Misuro A}} \underbrace{|a\rangle}_{\text{100\% risultato a}}$$

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\text{Misuro A}} |a, b\rangle \xrightarrow{\text{Misuro B}} |a, b\rangle \xrightarrow{\text{Misuro A}} |a, b\rangle$$

Non si avrà nessuna distruzione dell'informazione perchè A è anche autostato di B.