



两态系统和量子比特

量子比特

Rabi振荡

混合态

双态系统的波函数

- ◆ 二维Hilbert空间是最简单的非平庸空间

- ◆ 基矢

$$|0\rangle, \quad |1\rangle$$

- ◆ 任意态矢量均可表示为

$$|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle \sim \psi = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix}$$

- ◆ 整体常数因子可去除,

$$\begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} a \\ be^{i\phi} \end{pmatrix}, \quad a, b \in [0,1], \quad a^2 + b^2 = 1$$

- ◆ 用角度参数表示

$$\psi = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta e^{i\phi} \end{pmatrix}, \quad \theta \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right], \quad \phi \in [0, 2\pi)$$

把量子态映射到半个球面。赤道线对应同一个物理状态。

- ◆ 把量子态映射到整个球面,

$$\psi = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix}, \quad \theta \in [0, \pi], \quad \phi \in [0, 2\pi)$$

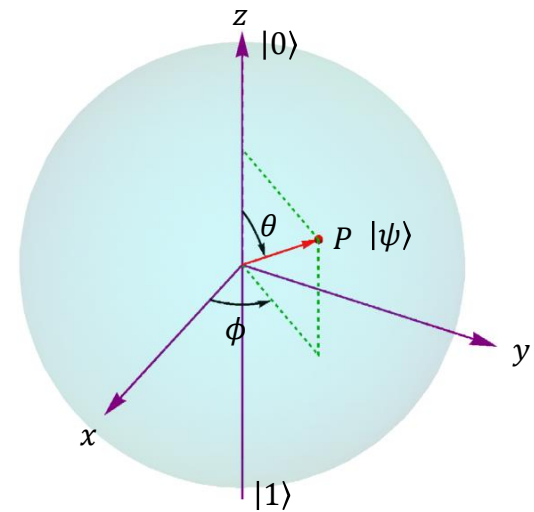
Bloch球

- ◆ 任意二能级态

$$\psi = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1+z}{2}} \\ \frac{x+iy}{\sqrt{2(1+z)}} \end{pmatrix}$$
$$\theta \in [0, \pi], \quad \phi \in [0, 2\pi), \quad x^2 + y^2 + z^2 = 1$$

对应到球面上的一个点

- ◆ 相差整体相因子的所有波函数，对应到同一个点，代表同一个物理状态
- ◆ 注意北极点对应态矢 $|0\rangle$ ，南极点对应态矢 $|1\rangle$
- ◆ 二能级系统的波函数可以存储信息，称为一个量子比特(qubit)



量子比特

◆ 经典比特 (bit)

- ① 用一个可处于完全2个不同的状态的系统实现
- ② 两个状态用二进制数0,1表示
- ③ 可能的单比特操作（逻辑门）：恒等Id，非NOT

◆ 量子比特 (qubit)

- ① 用一个2能级体系实现
- ② 状态是2维空间的矢量，标准基为

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

任意一个态矢都可以用基矢展开，

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

$$\propto \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi}|1\rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi} \end{pmatrix}$$

- ③ 量子比特的操纵：么正变换，单量子比特门

对 比

- ◆ 传统的bit只有0,1两种状态
- ◆ 量子比特的状态由连续变化的实参数 (θ, ϕ) 描述
- ◆ 单个量子比特可以存储无穷多的信息？
并非完全如此：
 - 获取单个量子比特的信息，需要测量
 - 每次测量只能得到1个经典比特的信息，
 $\sigma_n = +1, -1$
 - 为了得到 α, β ，需要无穷多次测量

量子比特的实现

- ① 量子点 (quantum dot) 中的电子自旋 $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$
- ② 核磁共振 (NMR) 中的核自旋 $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$
- ③ 双阱系统 (double well) 中粒子位置 $\{|\text{left}\rangle, |\text{right}\rangle\}$
- ④ 激光 (或微波射频) 驱动单原子的态 $\{|E_1\rangle, |E_2\rangle\}$
- ⑤ 超导回路 (superconducting circuit, flux qubit) 中的电流方向 $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$
- ⑥ 光子的偏振 $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ 或 $\{|\leftrightarrow\rangle, |\vdash\rangle\}$

量子比特的实现, 需要一个二态系统满足以下条件,

(1) 系统可以制备在任意指定的态(输入)

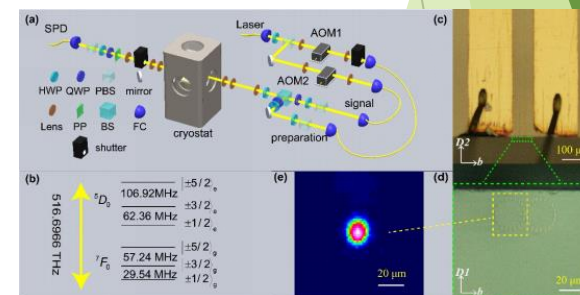
例如基态 $|0\rangle$, 或者一个叠加态

(2) 可以把系统从一个任意状态, 变换到另外一个任意状态 (计算)

么正变换, 量子逻辑门, 用磁场或激光控制系统的演化

(3) 存在可测物理量, 有2个特征值 (输出)

例如测量 σ_z , 有两个本征值 ± 1



图片来源: 科大新闻网

量子比特的测量

- ◆ 如果我们以同样方式制备大量相同的量子态 $|\psi\rangle$ ，那么量子比特的参数 θ, ϕ 是可测量的
- ◆ 测量三个物理量 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1+z}{2}} \\ \frac{x+iy}{\sqrt{2(1+z)}} \end{pmatrix}$$

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

$$\langle \psi | \sigma_x | \psi \rangle = \sin \theta \cos \phi = x$$

$$\langle \psi | \sigma_y | \psi \rangle = \sin \theta \sin \phi = y$$

$$\langle \psi | \sigma_z | \psi \rangle = \cos \theta = z$$

重复多次测量后取平均，可得到 x, y, z ，即一个量子比特的高精度状态

量子比特的么正变换

- ◆ 进行量子信息处理需要操纵量子比特

- ◆ 操纵量子比特即对量子态进行变换

$$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \quad |\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$$

- ◆ 量子力学中的状态变换需要保证几率不变，即态矢的模长不变：

$$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \quad \langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi'|\psi'\rangle$$

- ◆ 保矢量模长不变 \Leftrightarrow 保矢量内积不变

$$\left. \begin{aligned} |\psi\rangle &= c_1|a\rangle + c_2|b\rangle \\ \langle\psi|\psi\rangle &= \langle\psi'|\psi'\rangle \end{aligned} \right\} \Rightarrow c_1^*c_2\langle a|b\rangle + c_1c_2^*\langle b|a\rangle = c_1^*c_2\langle a'|b'\rangle + c_1c_2^*\langle b'|a'\rangle$$
$$\Rightarrow \forall |a\rangle, |b\rangle \in \mathcal{H}, \quad \langle a|b\rangle = \langle a'|b'\rangle$$

- ◆ 复Hilbert空间保内积的变换，是么正变换

$$\langle a|b\rangle = \langle a'|b'\rangle = \langle a|\hat{U}^\dagger\hat{U}|b\rangle \Leftrightarrow \hat{U}^\dagger\hat{U} = \mathbf{1}$$

- ◆ 时间演化算符是么正变换

$$\hat{U}(t_2, t_1) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot(t_2-t_1)}$$

- ◆ 对单量子比特，么正变换即Bloch球的转动：

操纵单个量子比特，等价于三维空间的刚体转动

单量子比特门

◆ Hadamard门

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\sigma_x + \sigma_z) \\ = ie^{-i\frac{\pi\sigma_x+\sigma_z}{2}} \frac{1}{2\sqrt{2}}$$

◆ 相移门

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\delta} \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\delta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\delta}{2}} \end{pmatrix} = e^{-i\delta\frac{\sigma_z}{2}} = u_z(\delta)$$

◆ 转动Bloch球，可实现任意量子态：

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

◆ 球体的转动，即刚体转动 (**SO(3)**)，可用欧拉转动实现

$$R(\alpha, \beta, \gamma) \stackrel{\text{def}}{=} R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z(\gamma)$$

◆ Bloch球的转动 $R(\alpha, \beta, \gamma)$ ，对应量子态的转动

$$u(\alpha, \beta, \gamma) \stackrel{\text{def}}{=} u_z(\alpha) u_y(\beta) u_z(\gamma)$$

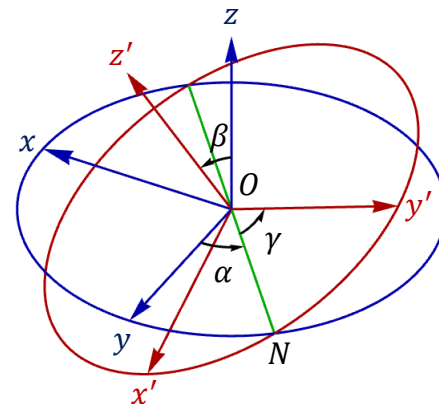
◆ **U(2)**的分解

$$u \equiv e^{-i\left(\delta\frac{\sigma_0}{2} + \psi_1\frac{\sigma_1}{2} + \psi_2\frac{\sigma_2}{2} + \psi_3\frac{\sigma_3}{2}\right)} \equiv e^{-i\frac{\delta}{2}} u(\alpha, \beta, \gamma)$$

除了一个没有物理效应的整体相因子，需要三个参数描述 (**SU(2)**)

◆ Hadamard门+相移门，能实现任意单量子比特门

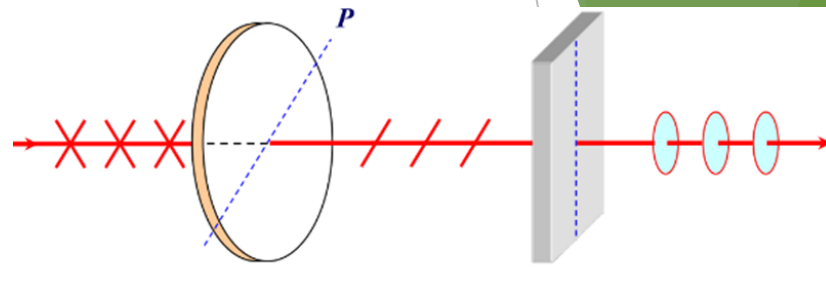
$$u \equiv u_z(a) H u_z(b) H u_z(c)$$



光子偏振态的变换

- 光子的偏振态

$$|\leftrightarrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$
$$|\psi\rangle = \alpha|\leftrightarrow\rangle + \beta|\uparrow\rangle$$



- 光子可用于实现量子比特，可用于量子通讯

- 快轴与 x 轴夹角为 θ 的 $1/2$ 波片，琼斯矩阵为

$$P_{1/2}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \cos 2\theta & \sin 2\theta \\ \sin 2\theta & -\cos 2\theta \end{pmatrix}$$

- 快轴与 x 轴夹角为 θ 的 $1/4$ 波片，琼斯矩阵为

$$P_{1/4}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \cos^2 \theta + i \sin^2 \theta & (1-i) \sin \theta \cos \theta \\ (1-i) \sin \theta \cos \theta & \sin^2 \theta + i \cos^2 \theta \end{pmatrix}$$

- 量子比特的任意么正变换可分解为

$$u = P_{1/4}(a)P_{1/2}(b)P_{1/4}(c) = \begin{pmatrix} \xi & \eta \\ -\eta^* & \xi^* \end{pmatrix}$$

$$\xi = \{\cos[2(a-b)] + \cos[2(b-c)]\} + i\{\cos 2b - \cos[2(a-b+c)]\}$$

$$\eta = \{-\sin[2(a-b)] - \sin[2(b-c)]\} + i\{\sin 2b - \sin[2(a-b+c)]\}$$

- 可见 $1/2$ 波片与 $1/4$ 波片能实现任意单量子比特门

Rabi振荡：模型

- ◆ 原子的二能级体系可以作为qubit
- ◆ 可用光场改变原子的状态

- ◆ 系统的哈密顿量

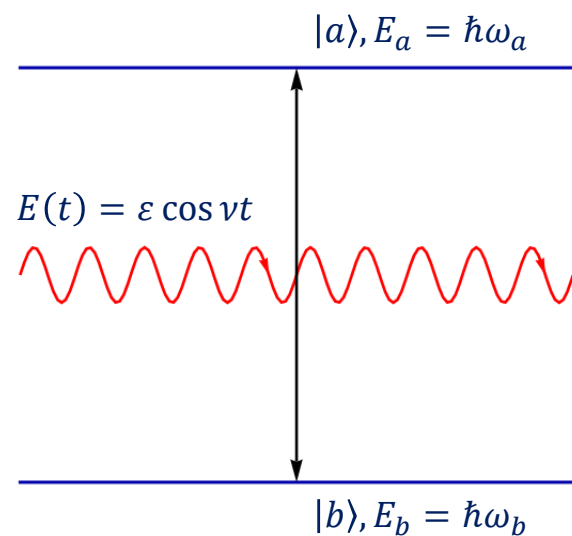
$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \\ &= \begin{pmatrix} E_a & 0 \\ 0 & E_b \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -g_{ab}E(t) \\ -g_{ab}^*E(t) & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} E_a & -g_{ab}E(t) \\ -g_{ab}^*E(t) & E_b \end{pmatrix}\end{aligned}$$

其中

$$g_{ab} = e\langle a|x|b\rangle$$

是电偶极矩阵元， \hat{H}_1 是原子与辐射场的偶极相互作用。

- ◆ 用单频光场与原子作用， $E(t) = \varepsilon \cos vt$



Rabi振荡：相互作用表象的薛定谔方程（一）

◆ 薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi$$
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} c_a(t) \\ c_b(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hbar\omega_a & -g_{ab}E(t) \\ -g_{ab}^*E(t) & \hbar\omega_b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_a(t) \\ c_b(t) \end{pmatrix}$$

◆ 相互作用表象中的薛定谔方程

令

$$\begin{pmatrix} c_a(t) \\ c_b(t) \end{pmatrix} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} \tilde{c}_a(t)e^{-i\omega_a t} \\ \tilde{c}_b(t)e^{-i\omega_b t} \end{pmatrix}$$

代入薛定谔方程得

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{\tilde{c}}_a(t)e^{-i\omega_a t} \\ \dot{\tilde{c}}_b(t)e^{-i\omega_b t} \end{pmatrix} + i\hbar \begin{pmatrix} -i\omega_a \tilde{c}_a(t)e^{-i\omega_a t} \\ -i\omega_b \tilde{c}_b(t)e^{-i\omega_b t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hbar\omega_a c_a(t) \\ \hbar\omega_b c_b(t) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -g_{ab}E(t) \\ -g_{ab}^*E(t) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_a(t) \\ c_b(t) \end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix} e^{-i\omega_a t} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega_b t} \end{pmatrix} i\hbar \begin{pmatrix} \dot{\tilde{c}}_a(t) \\ \dot{\tilde{c}}_b(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -g_{ab}E(t) \\ -g_{ab}^*E(t) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\omega_a t} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega_b t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{c}_a(t) \\ \tilde{c}_b(t) \end{pmatrix}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \tilde{c}_a(t) \\ \tilde{c}_b(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -g_{ab}E(t)e^{i\omega t} \\ -g_{ab}^*E(t)e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{c}_a(t) \\ \tilde{c}_b(t) \end{pmatrix}$$

$\omega \stackrel{\text{def}}{=} \omega_a - \omega_b$

Rabi振荡：相互作用表象的薛定谔方程（二）

- 相互作用表象的薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \tilde{c}_a(t) \\ \tilde{c}_b(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -g_{ab}E(t)e^{i\omega t} \\ -g_{ab}^*E(t)e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{c}_a(t) \\ \tilde{c}_b(t) \end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix} \dot{\tilde{c}}_a \\ \dot{\tilde{c}}_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & i\frac{g_{ab}\varepsilon}{\hbar} \cos \nu t e^{i\omega t} \\ i\frac{g_{ab}^*\varepsilon}{\hbar} \cos \nu t e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{c}_a \\ \tilde{c}_b \end{pmatrix}$$

- 电偶极矩阵元的相位

$$g_{ab} \stackrel{\text{def}}{=} |g_{ab}|e^{-i\phi}$$

- 拉比频率

$$\Omega_R \stackrel{\text{def}}{=} \frac{|g_{ab}|\varepsilon}{\hbar}$$

- 薛定谔方程成为

$$\begin{pmatrix} \dot{\tilde{c}}_a \\ \dot{\tilde{c}}_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & i\Omega_R \cos \nu t e^{i(\omega t - \phi)} \\ i\Omega_R \cos \nu t e^{-i(\omega t - \phi)} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{c}_a \\ \tilde{c}_b \end{pmatrix}$$

Rabi振荡：化简薛定谔方程

- 相互作用表象的薛定谔方程

$$\begin{pmatrix} \dot{\tilde{c}}_a \\ \dot{\tilde{c}}_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & i\Omega_R \cos \nu t e^{i(\omega t - \phi)} \\ i\Omega_R \cos \nu t e^{-i(\omega t - \phi)} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{c}_a \\ \tilde{c}_b \end{pmatrix} \stackrel{\text{def}}{=} \Lambda(t) \begin{pmatrix} \tilde{c}_a \\ \tilde{c}_b \end{pmatrix}$$

- 两边对时间求偏导数，化简得

$$\begin{pmatrix} \ddot{\tilde{c}}_a \\ \ddot{\tilde{c}}_b \end{pmatrix} = \dot{\Lambda} \begin{pmatrix} \tilde{c}_a \\ \tilde{c}_b \end{pmatrix} + \Lambda \begin{pmatrix} \dot{\tilde{c}}_a \\ \dot{\tilde{c}}_b \end{pmatrix} = \dot{\Lambda} \Lambda^{-1} \begin{pmatrix} \tilde{c}_a \\ \tilde{c}_b \end{pmatrix} + \Lambda^2 \begin{pmatrix} \tilde{c}_a \\ \tilde{c}_b \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \Lambda^2 &= -\Omega_R^2 \cos^2 \nu t \mathbf{1}_{2 \times 2} \\ \Lambda^{-1} &= -\frac{1}{\Omega_R^2 \cos^2 \nu t} \Lambda = \frac{1}{\Omega_R \cos \nu t} \begin{pmatrix} 0 & -ie^{i(\omega t - \phi)} \\ -ie^{-i(\omega t - \phi)} & 0 \end{pmatrix} \\ \dot{\Lambda} &= \begin{pmatrix} 0 & (-\omega \cos \nu t - i\nu \sin \nu t)\Omega_R e^{i(\omega t - \phi)} \\ (\omega \cos \nu t - i\nu \sin \nu t)\Omega_R e^{-i(\omega t - \phi)} & 0 \end{pmatrix} \\ \dot{\Lambda} \Lambda^{-1} &= \frac{1}{\cos \nu t} \begin{pmatrix} -\nu \sin \nu t + i\omega \cos \nu t & 0 \\ 0 & -\nu \sin \nu t - i\omega \cos \nu t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\nu \tan \nu t + i\omega & 0 \\ 0 & -\nu \tan \nu t - i\omega \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{cases} \ddot{\tilde{c}}_a = (-\nu \tan \nu t + i\omega) \dot{\tilde{c}}_a - \Omega_R^2 \cos^2 \nu t \tilde{c}_a \\ \ddot{\tilde{c}}_b = (-\nu \tan \nu t - i\omega) \dot{\tilde{c}}_b - \Omega_R^2 \cos^2 \nu t \tilde{c}_b \end{cases}$$

Rabi振荡: Rotating Wave Approximation

◆ 薛定谔方程

$$\begin{pmatrix} \dot{\tilde{c}}_a \\ \dot{\tilde{c}}_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & i\Omega_R \cos \nu t e^{i(\omega t - \phi)} \\ i\Omega_R \cos \nu t e^{-i(\omega t - \phi)} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{c}_a \\ \tilde{c}_b \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \dot{\tilde{c}}_a \\ \dot{\tilde{c}}_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{i}{2}\Omega_R (e^{i[(\omega+\nu)t-\phi]} + e^{i[(\omega-\nu)t-\phi]}) \\ \frac{i}{2}\Omega_R (e^{-i[(\omega+\nu)t-\phi]} + e^{-i[(\omega-\nu)t-\phi]}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{c}_a \\ \tilde{c}_b \end{pmatrix}$$

◆ 旋转波近似: 舍弃高频项 $e^{i[(\omega+\nu)t-\phi]}, e^{-i[(\omega+\nu)t-\phi]}$ (平均效果约为0)

$$\begin{pmatrix} \dot{\tilde{c}}_a \\ \dot{\tilde{c}}_b \end{pmatrix} = \Lambda \begin{pmatrix} \tilde{c}_a \\ \tilde{c}_b \end{pmatrix}, \quad \Lambda \stackrel{\text{def}}{=} i \frac{\Omega_R}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{i[(\omega-\nu)t-\phi]} \\ e^{-i[(\omega-\nu)t-\phi]} & 0 \end{pmatrix}$$

◆ 求导得

$$\begin{pmatrix} \ddot{\tilde{c}}_a \\ \ddot{\tilde{c}}_b \end{pmatrix} = \dot{\Lambda} \Lambda^{-1} \begin{pmatrix} \dot{\tilde{c}}_a \\ \dot{\tilde{c}}_b \end{pmatrix} + \Lambda^2 \begin{pmatrix} \tilde{c}_a \\ \tilde{c}_b \end{pmatrix}$$

$$\Lambda^2 = -\frac{\Omega_R^2}{4} \mathbf{1}_{2 \times 2}, \quad \Lambda^{-1} = -i \frac{2}{\Omega_R} \begin{pmatrix} 0 & e^{i[(\omega-\nu)t-\phi]} \\ e^{-i[(\omega-\nu)t-\phi]} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\dot{\Lambda} = (\omega - \nu) \frac{\Omega_R}{2} \begin{pmatrix} 0 & -e^{i[(\omega-\nu)t-\phi]} \\ e^{-i[(\omega-\nu)t-\phi]} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\dot{\Lambda} \Lambda^{-1} = -i(\omega - \nu) \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \ddot{\tilde{c}}_a \\ \ddot{\tilde{c}}_b \end{pmatrix} = i(\omega - \nu) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\tilde{c}}_a \\ \dot{\tilde{c}}_b \end{pmatrix} - \frac{1}{4} \Omega_R^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{c}_a \\ \tilde{c}_b \end{pmatrix}$$

Rabi振荡：旋转波近似解

◆ 微分方程

$$\begin{pmatrix} \ddot{\tilde{c}}_a \\ \ddot{\tilde{c}}_b \end{pmatrix} = i(\omega - \nu) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\tilde{c}}_a \\ \dot{\tilde{c}}_b \end{pmatrix} - \frac{1}{4} \Omega_R^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{c}_a \\ \tilde{c}_b \end{pmatrix}, \quad \begin{cases} \ddot{\tilde{c}}_a = i(\omega - \nu) \dot{\tilde{c}}_a - \frac{1}{4} \Omega_R^2 \tilde{c}_a \\ \ddot{\tilde{c}}_b = -i(\omega - \nu) \dot{\tilde{c}}_b - \frac{1}{4} \Omega_R^2 \tilde{c}_b \end{cases}$$

◆ 特征方程

$$\begin{aligned} \lambda^2 - i(\omega - \nu)\lambda + \frac{1}{4} \Omega_R^2 &= 0 \Rightarrow \lambda = \frac{1}{2} \left[i(\omega - \nu) \pm \sqrt{-(\omega - \nu)^2 - \Omega_R^2} \right] = \frac{i}{2} [(\omega - \nu) \pm \Omega] \\ \lambda^2 + i(\omega - \nu)\lambda + \frac{1}{4} \Omega_R^2 &= 0 \Rightarrow \lambda = \frac{1}{2} \left[-i(\omega - \nu) \pm \sqrt{-(\omega - \nu)^2 - \Omega_R^2} \right] = \frac{i}{2} [-(\omega - \nu) \pm \Omega] \\ \Omega &\stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{(\omega - \nu)^2 + \Omega_R^2} = \sqrt{(\omega - \nu)^2 + \frac{|g_{ab}|^2 \varepsilon^2}{\hbar^2}} \end{aligned}$$

◆ 所以微分方程的通解是

$$\begin{cases} \tilde{c}_a(t) = \left(a_1 e^{\frac{i}{2} \Omega t} + a_2 e^{-\frac{i}{2} \Omega t} \right) e^{\frac{i}{2} (\omega - \nu) t} \\ \tilde{c}_b(t) = \left(b_1 e^{\frac{i}{2} \Omega t} + b_2 e^{-\frac{i}{2} \Omega t} \right) e^{-\frac{i}{2} (\omega - \nu) t} \end{cases}$$

◆ 用初值确定积分常数，得

$$\begin{cases} \tilde{c}_a(t) = \left\{ \left[\cos \frac{\Omega t}{2} - i \frac{\omega - \nu}{\Omega} \sin \frac{\Omega t}{2} \right] \tilde{c}_a(0) + \left[i \frac{\Omega_R}{\Omega} e^{-i\phi} \sin \frac{\Omega t}{2} \right] \tilde{c}_b(0) \right\} e^{\frac{i}{2} (\omega - \nu) t} \\ \tilde{c}_b(t) = \left\{ \left[i \frac{\Omega_R}{\Omega} e^{i\phi} \sin \frac{\Omega t}{2} \right] \tilde{c}_a(0) + \left[\cos \frac{\Omega t}{2} + i \frac{\omega - \nu}{\Omega} \sin \frac{\Omega t}{2} \right] \tilde{c}_b(0) \right\} e^{-\frac{i}{2} (\omega - \nu) t} \end{cases}$$

Rabi振荡：布居反转

- ◆ 如果取初条件是

$$\begin{cases} \tilde{c}_a(0) = 1, & \tilde{c}_b(0) = 0 \\ \tilde{c}_a(t) = \left(\cos \frac{\Omega t}{2} - i \frac{\omega - \nu}{\Omega} \sin \frac{\Omega t}{2} \right) e^{\frac{i}{2}(\omega - \nu)t} \\ \tilde{c}_b(t) = i \frac{\Omega_R}{\Omega} e^{i\phi} \sin \frac{\Omega t}{2} e^{-\frac{i}{2}(\omega - \nu)t} \end{cases}$$

- ◆ 则处于两个能级的概率分别是

$$P_a(t) = |c_a|^2 = |\tilde{c}_a|^2 = \cos^2 \frac{\Omega t}{2} + \frac{(\omega - \nu)^2}{\Omega^2} \sin^2 \frac{\Omega t}{2}$$

$$P_b(t) = |c_b|^2 = |\tilde{c}_b|^2 = \frac{\Omega_R^2}{\Omega^2} \sin^2 \frac{\Omega t}{2}$$

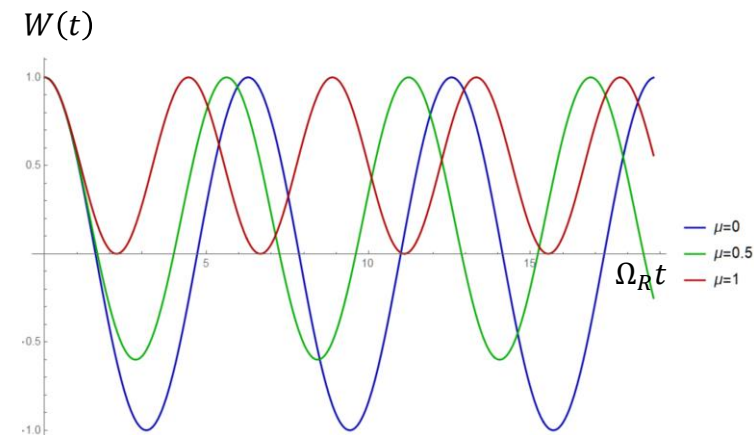
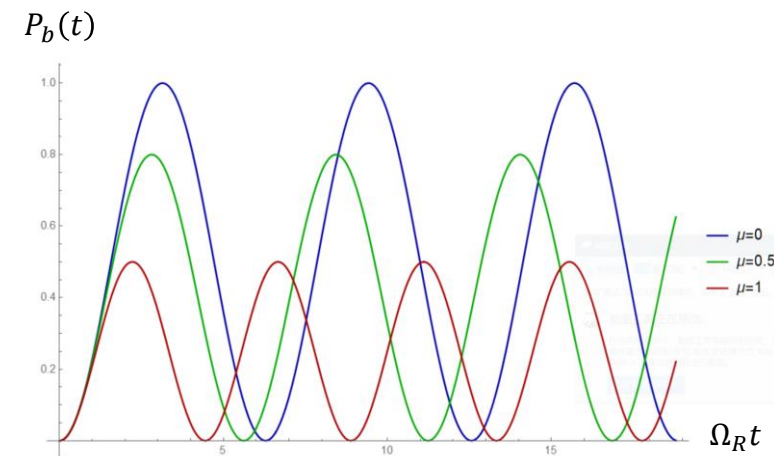
$$P_b = \frac{1}{1 + \mu^2} \sin^2 \left(\frac{\sqrt{1 + \mu^2}}{2} \Omega_R t \right), \quad \mu \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\omega - \nu}{\Omega_R}$$

- ◆ 布居反转数

$$W(t) \stackrel{\text{def}}{=} P_a(t) - P_b(t) = \cos^2 \frac{\Omega t}{2} + \frac{(\omega - \nu)^2 - \Omega_R^2}{\Omega^2} \sin^2 \frac{\Omega t}{2}$$

- ◆ 共振时 $\omega = \nu$ ，布居反转数是

$$W(t) \stackrel{\text{def}}{=} P_a(t) - P_b(t) = \cos^2 \frac{\Omega_R t}{2} - \sin^2 \frac{\Omega_R t}{2} = \cos \Omega_R t$$



混合态和密度矩阵

- ◆ 确定性的系统用态矢量 $|\psi\rangle$ 描述，称为**纯态 (pure state)**
- ◆ 当信息不完全时（子系统、热学过程），只有概率性的描述，称为**混合态 (mixed state)**

$$\{p_1, |\psi_1\rangle; p_2, |\psi_2\rangle; \dots\}, \quad \sum_j p_j = 1$$

- ◆ 混合态下物理量的期望值

$$\langle A \rangle = \sum_j p_j \langle \psi_j | \hat{A} | \psi_j \rangle = \sum_j p_j \text{Tr}(|\psi_j\rangle\langle\psi_j| \hat{A}) = \text{Tr} \left[\left(\sum_j p_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j| \right) \hat{A} \right]$$

- ◆ **密度矩阵 (density matrix)**

$$\hat{\rho} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_j p_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j|$$
$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A})$$

- ◆ 纯态的密度矩阵

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$$
$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A}) = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$

- ◆ 纯态和混态都可以用密度矩阵描述

密度矩阵的性质

◆ 厄米

$$\hat{\rho} = \sum_j p_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j| \Rightarrow \hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$$

◆ 半正定

$$\forall \varphi \in \mathcal{H}, \langle \varphi | \hat{\rho} | \varphi \rangle = \sum_j p_j \langle \varphi | \psi_j \rangle \langle \psi_j | \varphi \rangle = \sum_j p_j |\langle \varphi | \psi_j \rangle|^2 \geq 0$$

◆ 迹

$$\text{Tr } \hat{\rho} = \text{Tr} \left(\sum_j p_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j| \right) = \sum_j p_j \langle \psi_j | \psi_j \rangle = \sum_j p_j = 1$$

◆ 特征值

① 厄米 \Rightarrow 特征值 $\{\lambda_k | k = 1, 2, 3, \dots\}$ 是实数

② 半正定 $\Rightarrow \lambda_k \geq 0, k = 1, 2, 3, \dots$

③ 迹为1 $\Rightarrow \lambda_1 + \lambda_2 + \dots = 1$

◆ 特征矢

$$|k\rangle = \lambda_k |k\rangle, \quad k = 1, 2, 3, \dots$$

① 正交归一: $\langle j | k \rangle = \delta_{jk}$

② 完备: $\sum_k |k\rangle\langle k| = \mathbf{1}$

③ 密度矩阵的谱分解:

$$\hat{\rho} = \sum_n \lambda_n |n\rangle\langle n|$$

◆ 纯态的密度矩阵是投影矩阵

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| \Rightarrow \rho^2 = \rho$$

◆ 混态的密度矩阵不是投影矩阵

$$\hat{\rho}^2 = \sum_{j,k} \lambda_j \lambda_k |j\rangle\langle j|k\rangle\langle k| = \sum_{j,k} \lambda_j \lambda_k \delta_{jk} |j\rangle\langle k| = \sum_j \lambda_j^2 |j\rangle\langle j|$$

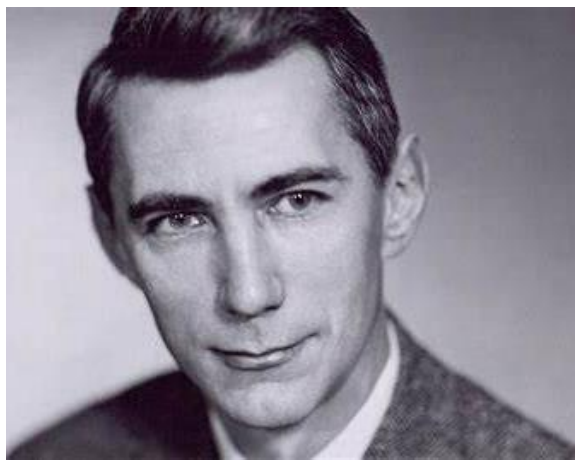
$$\text{Tr } \hat{\rho}^2 = \sum_j \lambda_j^2 \leq 1$$

等号仅在纯态成立。

混合态的熵

- ◆ 经典统计的Shannon entropy

$$S = - \sum_j p_j \log p_j$$



- ◆ 量子统计的von Neumann entropy

$$\begin{aligned} S &= -\text{Tr}(\hat{\rho} \log \hat{\rho}) \\ &= - \sum_j \lambda_j \log \lambda_j \end{aligned}$$



密度矩阵的演化

$$\begin{aligned}\frac{d\rho}{dt} &= \sum_j p_j \left\{ \left(\frac{d}{dt} |\psi_j\rangle \right) \langle \psi_j| + |\psi_j\rangle \left(\frac{d}{dt} \langle \psi_j| \right) \right\} \\ &= \sum_j p_j \left\{ \left(\frac{1}{i\hbar} \hat{H} |\psi_j\rangle \right) \langle \psi_j| + |\psi_j\rangle \left(-\frac{1}{i\hbar} \langle \psi_j| \hat{H} \right) \right\} \\ &= \frac{1}{i\hbar} \sum_j p_j \{ \hat{H} |\psi_j\rangle \langle \psi_j| - |\psi_j\rangle \langle \psi_j| \hat{H} \} = \frac{1}{i\hbar} (\hat{H} \rho - \rho \hat{H})\end{aligned}$$

$$\boxed{\frac{d\rho}{dt} = -\frac{1}{i\hbar} [\rho, \hat{H}]}$$

例：子系统的密度矩阵

- ◆ 设封闭的复合系统A+B是纯态，

$$|\psi\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle)$$
$$\hat{\rho}_{AB} = |\psi\rangle_{AB} \langle\psi| = \frac{1}{2}|01\rangle\langle 01| + \frac{1}{2}|01\rangle\langle 10| + \frac{1}{2}|10\rangle\langle 01| + \frac{1}{2}|10\rangle\langle 10|$$

- ◆ 子系统A的可观测量Q，期望值是

$$\hat{Q} = \hat{Q}_A \otimes \hat{I}_B$$
$$\langle Q \rangle = \text{Tr}(\rho_{AB} \hat{Q}) = \frac{1}{2}\langle 0|\hat{Q}_A|0\rangle + \frac{1}{2}\langle 1|\hat{Q}_A|1\rangle$$
$$= \text{Tr}\left(\frac{1}{2}|0\rangle\langle 0|\hat{Q}_A + \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1|\hat{Q}_A\right)$$

- ◆ 因此子系统A的约化密度矩阵是

$$\hat{\rho}_A \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1|$$
$$\langle Q_A \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho}_A \hat{Q}_A)$$

- ◆ 定义偏迹(partial trace)

$$X = (X_{j,k;j',k'})$$
$$Y \stackrel{\text{def}}{=} \text{Tr}_B(X), \quad Y_{jj'} \equiv \sum_k X_{j,k;j',k}$$

- ◆ 子系统与总系统密度矩阵的关系：

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B(\hat{\rho}_{AB})$$

- ◆ 可判断子系统是混合态：

$$\hat{\rho}_A = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}, \quad \hat{\rho}_A^2 = \begin{pmatrix} 1/4 & 0 \\ 0 & 1/4 \end{pmatrix} \neq \hat{\rho}_A$$

二维混合态密度矩阵

- ◆ 二维Hilbert空间的矩阵展开

$$\rho \equiv c_0 \mathbf{1}_{2 \times 2} + c_1 \sigma_1 + c_2 \sigma_2 + c_3 \sigma_3, \quad c_0, c_1, c_2, c_3 \in \mathbb{C}$$

- ◆ 厄米

$$\begin{aligned} \rho^\dagger &= \rho \\ c_0 \mathbf{1}_{2 \times 2} + c_1 \sigma_1 + c_2 \sigma_2 + c_3 \sigma_3 &= c_0^* \mathbf{1}_{2 \times 2} + c_1^* \sigma_1 + c_2^* \sigma_2 + c_3^* \sigma_3 \\ &\Rightarrow c_0, c_1, c_2, c_3 \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

- ◆ 迹1

$$\begin{aligned} \text{Tr } \rho &= 2c_0 = 1 \Rightarrow c_0 = \frac{1}{2} \\ \rho &= \frac{1}{2} (\mathbf{1}_{2 \times 2} + \vec{p} \cdot \vec{\sigma}) \end{aligned}$$

- ◆ $\text{Tr } \rho^2 \leq 1$

$$\begin{aligned} \rho^2 &= \frac{1}{4} (\mathbf{1}_{2 \times 2} + \vec{p} \cdot \vec{\sigma})^2 = \frac{1}{4} \{ (1 + \vec{p}^2) \mathbf{1}_{2 \times 2} + 2\vec{p} \cdot \vec{\sigma} \} \\ \text{Tr } \rho^2 &= \frac{1}{2} (1 + \vec{p}^2) \leq 1 \Rightarrow \vec{p}^2 \leq 1 \end{aligned}$$

- ◆ 所以混合态的密度矩阵是

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{2} (\mathbf{1}_{2 \times 2} + p \vec{n} \cdot \vec{\sigma}) \\ |\vec{n}| &= 1, \quad 0 \leq p \leq 1 \end{aligned}$$

混合态量子比特和Bloch球

◆ 纯态

$$\begin{aligned}\rho^2 &= \rho \\ \Leftrightarrow \frac{1}{4} \{ (1 + \vec{p}^2) \mathbf{1}_{2 \times 2} + 2\vec{p} \cdot \vec{\sigma} \} &= \frac{1}{2} (\mathbf{1}_{2 \times 2} + p\vec{n} \cdot \vec{\sigma}) \\ \Rightarrow p &= 1 \\ \rho &= \frac{1}{2} (\mathbf{1}_{2 \times 2} + \vec{n} \cdot \vec{\sigma})\end{aligned}$$

◆ 纯态量子比特

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1+z}{2}} \\ \frac{x+iy}{\sqrt{2(1+z)}} \end{pmatrix} \\ |\psi\rangle\langle\psi| &= \begin{pmatrix} \frac{1+z}{2} & \frac{1}{2}(x-iy) \\ \frac{1}{2}(x+iy) & \frac{x^2+y^2}{2(1+z)} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+z & x-iy \\ x+iy & 1-z \end{pmatrix} \\ \rho &= \frac{1}{2} (\mathbf{1}_{2 \times 2} + \vec{r} \cdot \vec{\sigma}), \quad |\vec{r}| = 1\end{aligned}$$

◆ $|\vec{r}| < 1$ 时正好是混合态的密度矩阵

◆ 因此，可以用Bloch球的

球面表示纯态量子比特

球体内部表示混合态量子比特

◆ 球心是混乱程度最大的状态

