目 录

第一部分 量子信息 1

第一章 本科光电毕设 3

1.1 2022.10.14 第一次 3

1.1.1 表象变换（旋转坐标法） 4

1.1.2 表象变换（相互作用绘景法） 5

1.1.3 表象变换（简正坐标法） 7

1.1.4 大失谐近似求有效哈密顿量 7

1.2 2022.10.19 第二次 9

1.2.1 第一步 10

1.2.2 第二步 10

1.2.3 第三步 10

1.2.4 第四步 11

1.2.5 第五步 11

1.2.6 第六步 11

1.2.7 第七步 12

1.3 2022.10.28 第三次 13

第二部分 杂项 15

图片索引 19

表格索引 21

第一部分

量子信息

第一章 本科光电毕设

1.1 2022.10.14 第一次：Λ 型三能级原子与光场 Raman 相互作用

本次考虑了 Λ 型三能级原子与光场 Raman 相互作用这一系统，欲求其有效哈密顿量。

在量子力学中，掌握了系统的哈密顿量，通过薛定谔方程，（按理说）就掌握了系统演化的所有现象与特征。然而，哈密顿量的形式往往较为复杂，导致薛定谔方程难以求解。为了简化问题，我们可以通过两步求解系统的有效哈密顿量：

1. 对系统的坐标系（表象）进行变换，求出新表象下的哈密顿量，使得哈密顿量具有 1.1.5 的形式，且表示矩阵的阶数尽可能低。具体方法又分 a) 相互作用绘景法；b) 旋转坐标法；c) 简正坐标法。

2. 套定理 1.1.5 的公式，得到的哈密顿量的表示矩阵是分块对角阵，基态与激发态间已解耦，取出哈密顿量中仅含基态的项（大失谐近似），得到系统的有效哈密顿量。

以下对上述计算方法一一进行介绍。

1.1.1 表象变换（旋转坐标法）

取一算符 H_R，可将该系统的量子态从 $|\psi\rangle$ 变为 $|\psi_R\rangle = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}H_R}|\psi\rangle$。显然 $\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}H_R}$ 是幺正变换。求导得

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}|\psi_R\rangle}{\mathrm{d}t} &= \mathrm{i}\hbar\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H_R\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}H_R}|\psi\rangle + \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}H_R}\frac{\mathrm{d}|\psi\rangle}{\mathrm{d}t}\right)\\ &= -H_R\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}H_R}|\psi\rangle + \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}H_R}H\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}H_R}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}H_R}|\psi\rangle = (\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}H_R}H\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}H_R} - H_R)|\psi_R\rangle.\end{aligned} \tag{1.1–1}$$

可以看出，经过坐标变换，哈密顿量由 H 变为了 $\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}H_R}H\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}H_R} - H_R$。以上公式中的右边常用以下引理进行化简：

引理 1.1.1 (曾谨言习题 4.37) 对任意算符 A, B，有

$$e^{\lambda A}Be^{-\lambda A} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}[A^{(n)}, B]. \tag{1.1–2}$$

其中 $[A^{(n)}, B]$ 通过递推公式定义：

$$[A^{(0)}, B] = B, \quad [A^{(n+1)}, B] = [A, [A^{(n)}, B]]. \tag{1.1–3}$$

一般计算时有 $[A, B] = B$，此时

$$e^{\lambda A}Be^{-\lambda A} = e^{\lambda B}. \tag{1.1–4}$$

特别地，当用相互作用绘景计算微扰时，常用下式

$$e^{\lambda|a\rangle\langle a|}|a\rangle\langle b|e^{-\lambda|a\rangle\langle a|} = e^{\lambda}|a\rangle\langle b|. \tag{1.1–5}$$

知乎文章 [**355327986**] 中以具有如下形式哈密顿量的二能级系统为例：

$$H = V\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta}|g\rangle\langle e| + \mathrm{H.c.} = \begin{bmatrix} & V\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\delta}\\ V\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta} & \end{bmatrix} \tag{1.1–6}$$

选取 $A = \frac{1}{2}\delta\sigma_z = \frac{1}{2}\delta(|e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|)$，则

$$\begin{aligned}H_R &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\frac{1}{2}\delta(|e\rangle\langle e|-|g\rangle\langle g|)}(V\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta}|g\rangle\langle e| + \mathrm{H.c.})\mathrm{e}^{\cdots} - \frac{1}{2}\hbar\delta(|e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|)\\ &= (V|g\rangle\langle e| + \mathrm{H.c.}) - \frac{1}{2}\hbar\delta(|e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|)\end{aligned} \tag{1.1–7}$$

可见，在这一幺正变换下，非对角项的相位消失，而代价是在相应的对角项中出现了

$\pm\frac{1}{2}\hbar\delta$。上式用矩阵形式表示为

$$\begin{bmatrix} & Ve^{-\mathrm{i}t\delta} \\ Ve^{\mathrm{i}t\delta} & \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} \frac{1}{2}\hbar\delta & V \\ V & -\frac{1}{2}\hbar\delta \end{bmatrix} \tag{1.1–8}$$

实际上，A 可以更简单地取 $A = \delta\,|e\rangle\langle e|$ 和 $A = \delta\,|g\rangle\langle g|$，可分别得到 (Todo!)

$$\begin{bmatrix} & Ve^{-\mathrm{i}t\delta} \\ Ve^{\mathrm{i}t\delta} & \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} \frac{1}{2}\hbar\delta & V \\ V & -\frac{1}{2}\hbar\delta \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} & Ve^{-\mathrm{i}t\delta} \\ Ve^{\mathrm{i}t\delta} & \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} \frac{1}{2}\hbar\delta & V \\ V & -\frac{1}{2}\hbar\delta \end{bmatrix} \tag{1.1–9}$$

下面举出更多的坐标系变换例子（第一个例子是刚刚计算的；第二、三个例子见第二次内容，取 $\hbar = 1$）：

$$\begin{bmatrix} & Ve^{-\mathrm{i}t\delta} \\ Ve^{\mathrm{i}t\delta} & \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} \frac{1}{2}\hbar\delta & V \\ V & -\frac{1}{2}\hbar\delta \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} & \omega_j e^{-\mathrm{i}t\delta} & \\ \omega_j e^{\mathrm{i}t\delta} & & \omega_p e^{\mathrm{i}t\Delta} \\ & \omega_p e^{-\mathrm{i}t\Delta} & \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} \delta & \omega_j & \\ \omega_j & & \omega_p \\ & \omega_p & \Delta \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} & & & \omega e^{-\mathrm{i}t\delta} & \\ & & \omega_p & & \\ & \omega_p & & \omega_p & \\ \omega e^{\mathrm{i}t\delta} & & \omega_p & & \omega e^{\mathrm{i}t\delta} \\ & & & \omega e^{-\mathrm{i}t\delta} & \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} \delta & & & \omega & \\ & & \omega_p & & \\ & \omega_p & & \omega_p & \\ \omega & & \omega_p & & \omega \\ & & & \omega & \delta \end{bmatrix} \tag{1.1–10}$$

知乎文章 [**355327986**] 解释了旋转坐标系法的物理图景。

1.1.2 表象变换（相互作用绘景法）

实际上，相互作用绘景法是旋转坐标法的特例。我们常常会遇到受微扰的系统：

$$H = H_0 + V \tag{1.1–11}$$

其中 H_0 为不含时的近似项，V 为含时的微扰项。

注记 1.1.2 一般地，哈密顿量的近似项（在矩阵表示下）为对角项，表示各个本征态自身的演化过程，且与时间无关；而微扰项为非对角项，表示不同本征态之间的耦合，且与时间有关。

在这种情况下，我们可以采用一种特殊的坐标旋转：令 $H_R = H_0$。此时，哈密顿量由 $H_0 + V$ 变为

$$H^{\mathrm{I}} = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}H_0}(H_0 + V)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}H_0} - H_0 = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}H_0}V\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}H_0} \tag{1.1–12}$$

等式成立是因为第一项 H_0 与自身的函数 $\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}H_0}$ 对易，可提出并与第二项抵消。

这一计算称作从薛定谔绘景到相互作用绘景的变换，H^{I} 称作相互作用绘景下的哈密顿量，物理解释如下（另见 [**370513302**, **ctqm**]）。

注记 1.1.3 在量子力学中，力学量 O 在 t 时刻的期望为

$$\langle O(t)\rangle = \langle\psi(0)|U(0)^{\dagger}OU(0)|\psi(0)\rangle \tag{1.1–13}$$

此式反映了力学量随时间的演化，但有以下不同角度的理解：

1. 薛定谔绘景：认为力学量不随时间变化，但波函数（态矢）随时间变化，即 $\langle O(t)\rangle = \langle\psi(0)|U^{\dagger}\cdot O(0)\cdot U|\psi(0)\rangle$；
2. 海森堡绘景：认为力学量不随时间变化，但波函数（态矢）随时间变化，即 $\langle O(t)\rangle = \langle\psi|\cdot U(0)^{\dagger}O(0)U(0)\cdot|\psi\rangle$；
3. 相互作用绘景：将哈密顿量拆成近似项和微扰项之和，认为力学量随时间按近似项部分变化，波函数（态矢）随时间按微扰项部分变化，即 $\langle O(t)\rangle = \langle\psi(0)|\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}H_0}\cdot\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}V}O(0)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}V}\cdot\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}H_0}|\psi(0)\rangle$（此处为便于理解，认为 V 也不含时，更一般的情况见 [**370513302**]）。

在应用中，旋转坐标法用于消去非对角项的相位，并添上对角项；相互作用绘景法则消去了对角项，而填上了非对角项的相位。实际上，两种解法确实互为逆运算，可以以本节的系统为例，先用相互作用绘景法变换表象，再用旋转坐标法变换表象，两次计算后将回到初始的哈密顿量（势能零点可能有所改变，这不影响物理实质）。

因此，经变换后，哈密顿量有两种最简形式：一是相位形式，即哈密顿量表达式中不含对角项，全部转化为非对角项的相位；二是对角项形式，即哈密顿量表达式中不含相位，全部转化为对角项。在 [**PhysRevA.105.032417**] 中，哈密顿量均表示为对角项形式；而老师的手稿推导中，哈密顿量均表示为相位形式。

例 1.1.4 (张智明 [zzmqo] 1.8 节) 二能级原子与单模光场相互作用的哈密顿量，也称 Jaynes-Cummings 模型（以下各式省略最左边的 $\hbar$，纠正了原书的符号错误）

$\omega a^\dagger a+\frac{1}{2}(\omega_e-\omega_g)(\lvert e\rangle\langle e\rvert-\lvert g\rangle\langle g\rvert)+g(a^\dagger\lvert g\rangle\langle e\rvert+\mathrm{H.c.})$	$\frac{1}{2}(\omega_e-\omega_g)(\lvert e\rangle\langle e\rvert-\lvert g\rangle\langle g\rvert)+\Omega(\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\omega}\lvert g\rangle\langle e\rvert+\mathrm{H.c.})$
$g(a^\dagger\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t(\omega_e-\omega_g-\omega)}\lvert g\rangle\langle e\rvert+\mathrm{H.c.})$	$\Omega(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t(\omega_e-\omega_g-\omega)}\lvert g\rangle\langle e\rvert+\mathrm{H.c.})$
$\frac{1}{2}(\omega_e-\omega_g-\omega)(\lvert e\rangle\langle e\rvert-\lvert g\rangle\langle g\rvert)+g(a^\dagger\lvert g\rangle\langle e\rvert+\mathrm{H.c.})$	$\frac{1}{2}(\omega_e-\omega_g-\omega)(\lvert e\rangle\langle e\rvert-\lvert g\rangle\langle g\rvert)+\Omega(\lvert g\rangle\langle e\rvert+\mathrm{H.c.})$

原始形式：

$$\omega a^\dagger a+\frac{1}{2}(\omega_e-\omega_g)(\lvert e\rangle\langle e\rvert-\lvert g\rangle\langle g\rvert)+g(a^\dagger\lvert g\rangle\langle e\rvert+\mathrm{H.c.}) \tag{1.1–14}$$

$$\frac{1}{2}(\omega_e-\omega_g)(\lvert e\rangle\langle e\rvert-\lvert g\rangle\langle g\rvert)+\Omega(\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\omega}\lvert g\rangle\langle e\rvert+\mathrm{H.c.}) \tag{1.1–15}$$

相位形式：

$$g(a^\dagger\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t(\omega_e-\omega_g-\omega)}\lvert g\rangle\langle e\rvert+\mathrm{H.c.}) \tag{1.1–16}$$

$$\Omega(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t(\omega_e-\omega_g-\omega)}\lvert g\rangle\langle e\rvert+\mathrm{H.c.}) \tag{1.1–17}$$

对角形式：

$$\frac{1}{2}(\omega_e-\omega_g-\omega)(\lvert e\rangle\langle e\rvert-\lvert g\rangle\langle g\rvert)+g(a^\dagger\lvert g\rangle\langle e\rvert+\mathrm{H.c.}) \tag{1.1–18}$$

$$\frac{1}{2}(\omega_e-\omega_g-\omega)(\lvert e\rangle\langle e\rvert-\lvert g\rangle\langle g\rvert)+\Omega(\lvert g\rangle\langle e\rvert+\mathrm{H.c.}) \tag{1.1–19}$$

其中 $\frac{1}{2}(\omega_e-\omega_g)(\lvert e\rangle\langle e\rvert-\lvert g\rangle\langle g\rvert)$ 的由来：我们一般写 $\omega\lvert g\rangle\langle g\rvert+\omega_e\lvert e\rangle\langle e\rvert$，由于势能零点可以任取，所以也可写成 $(\omega_g-\omega_e)\lvert g\rangle\langle g\rvert$ 或 $(\omega_e-\omega_g)\lvert e\rangle\langle e\rvert$，二者线性叠加即得 $\frac{1}{2}(\omega_e-\omega_g)(\lvert e\rangle\langle e\rvert-\lvert g\rangle\langle g\rvert)$。这样写的好处是可以与 Pauli 算符 σ_z 对应起来（[**zzmqo**] 全是用 Pauli 算符表示的）。

1.1.3 表象变换（简正坐标法）

求解哈密顿量的本征值和本征向量（厄米算符的特征值均为实数，且不同特征值对应的本征向量彼此正交），将本征向量选取为新基，此时哈密顿量的表示矩阵为对角阵。具体计算见下节。

1.1.4 大失谐近似求有效哈密顿量

引理 1.1.5 (有效哈密顿量公式) 当系统在相互作用绘景下表示的哈密顿量可表示为

$$H^{\mathrm{I}}=\sum_n h_n e^{it\omega_n}+\mathrm{H.c.} \tag{1.1–20}$$

时，其有效哈密顿量为

$$H_{\mathrm{eff}}=\sum_{m,n}\frac{1}{\hbar}\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\omega_m}+\frac{1}{\omega_n}\right)[h_m^\dagger,h_n]e^{it(\omega_m-\omega_n)}. \tag{1.1–21}$$

证明 这是论文 [**James2007EffectiveHT**] 的主要结果，也可见 [**zzmqo**] 的附录。□

注记 1.1.6 老师的计算册中给出了三种解法，我只需掌握此处的公式法即可。

现考虑 Λ 型三能级原子（即有基态 $|g\rangle, |e\rangle$ 和激发态 $|i\rangle$）与光场（光频率为 ω）的 Raman 相互作用，欲求其有效哈密顿量。

此类光与物质相互作用是量子光学的核心问题，有半经典理论和全量子理论两种处理方式。其区别在于：半经典理论将其原子视为量子化的（原子在分立的能级之间跃迁），而光场（电磁场）视为经典场（用频率、场强、电偶极矩等描述）；而全量子理论将原子和光场均视为量子化的，光场用产生/湮灭算符描述。在半经典理论中，本系统的哈密顿量为

$$H = \omega_g |g\rangle\langle g| + \omega_i |i\rangle\langle i| + \omega a^\dagger a + (\lambda_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\omega} |g\rangle\langle i| + \lambda_2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\omega} |e\rangle\langle i| + \mathrm{H.c.}) \tag{1.1–22}$$

在全量子理论中，其哈密顿量为

$$H = \omega_g |g\rangle\langle g| + \omega_i |i\rangle\langle i| + \omega_e |e\rangle\langle e| + \omega a^\dagger a + (\lambda_1 a^\dagger |g\rangle\langle i| + \lambda_2 a^\dagger |e\rangle\langle i| + \mathrm{H.c.}) \tag{1.1–23}$$

注意 $|a\rangle\langle b|$ 表示从 $|b\rangle$ 到 $|a\rangle$ 的跃迁；$a^\dagger$ 和 a 表示光子的产生与湮灭，如 $\lambda_1 a^\dagger |g\rangle\langle i|$ 表示 $|i\rangle$ 态下落到 $|g\rangle$ 态，同时放出一个光子（从而能量守恒），该过程的（耦合）强度为 λ_1。实际上，能量不守恒的过程（如 $\lambda_1 a |g\rangle\langle i|$）也可能发生，但概率很小，不予考虑 (即**旋波近似** (rotating wave approximation))。本次计算采用全量子理论，而以后将采取半经典理论。

由原始哈密顿量求有效哈密顿量的步骤如下：

1. 找出哈密顿量的近似项 H_0^S 和微扰项 V^S，算出相互作用绘景下的哈密顿量 H^{I}；
2. 将 H^{I} 左边整理成定理 1.1.5 中等式左边的形式进行计算，再考虑大失谐情况，忽略含激发态 $|i\rangle$ 的项，得到有效哈密顿量 H_{eff}。

在本问题中，相互作用绘景下的哈密顿量为

$$H^{\mathrm{I}} = e^{it(\omega-\omega_i+\omega_g)} \lambda_1 a^\dagger |g\rangle\langle i| + e^{it(\omega-\omega_i+\omega_e)} \lambda_2 a^\dagger |e\rangle\langle i| + \mathrm{H.c.}. \tag{1.1–24}$$

现假设系统处于大失谐状态，且 $\omega_g = \omega_e$，设失谐量为 $\omega - \omega_i + \omega_e = \Delta$。可得有效哈密顿量为

$$H_{\mathrm{eff}} = \frac{1}{\hbar\Delta} a^\dagger a \left(\lambda_1^2 |g\rangle\langle g| + \lambda_2^2 |e\rangle\langle e| + \lambda_1\lambda_2 (|e\rangle\langle g| + \mathrm{H.c.})\right). \tag{1.1–25}$$

1.2 2022.10.19 第二次：两个 Λ 型里德堡三能级原子与光场 Raman 相互作用

在上一次推导的基础上，我们将原子由一个加到两个，且认为原子的激发态为里德堡 (Rydberg) 态（即主量子数 n 很大的态），此时将出现一些新的物理现象：

1. 每个原子的量子态通过直积得到总的量子态，可能产生纠缠效应（量子信息的核心）；
2. 由于 $n \gg 1$，此时激发态的相邻能级间隔近似相等，可发生偶极偶极相互作用 (dipole-dipole interaction, dd) 或范德瓦尔斯相互作用 (van der Vaals interaction, vdW)。

接下来同样求解该系统的有效哈密顿量，主要步骤如下：

1. 不考虑 vdW，写出每个原子原始的哈密顿量 $H^{\mathrm{S}}_{\mathrm{novdW},j}$；
2. 不考虑 vdW，将 $H^{\mathrm{S}}_{\mathrm{novdW},j}$ 的对角项视为近似项，非对角项视为微扰项，变换绘景，写出每个原子在相互作用绘景下的哈密顿量 $H^{\mathrm{I}}_{\mathrm{novdW},j}$；
3. 不考虑 vdW，写出整个系统在相互作用绘景下的哈密顿量 $H^{\mathrm{I}}_{\mathrm{novdW}}$；
4. 写出偶极偶极相互作用和范德瓦尔斯相互作用的哈密顿量 $H_{\mathrm{dd}}, H_{\mathrm{vdW}}$；
5. 将 $H^{\mathrm{I}}_{\mathrm{novdW}}$ 视为近似项，H_{vdW} 视为微扰项，再次变换绘景，并利用旋波近似等化简得到哈密顿量 H^{II}；
6. 通过求解特征方程，将 H^{II} 中含的 ω_p 项对应的子矩阵对角化，并将这一（H^{II} 以归一化特征向量为基的）对角矩阵视为近似项，将该基下的含 ω_j 项视为微扰项，再次变换绘景得到哈密顿量 H^{III}；
7. 最后，通过定理 1.1.5 结合大失谐条件求得有效哈密顿量 H_{eff}。此外，我们做出以下假设：
$$\mathcal{U}_{j,j+1} = \Delta \gg \delta, \omega_p \gg \omega = \omega_j. \tag{1.2–1}$$

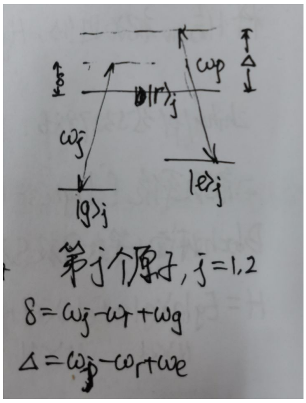

图 1.1: 原子能级示意图（两个原子的能级相同）

1.2.1 第一步

$$H^{\mathrm{S}}_{\mathrm{novdW},j} = \omega_g \left|g\middle\rangle\middle\langle g\right|_j + \omega_i \left|r\middle\rangle\middle\langle r\right|_j + \omega_e \left|e\middle\rangle\middle\langle e\right|_j + \omega a^\dagger a + (\lambda_1 a^\dagger \left|g\middle\rangle\middle\langle r\right|_j + \lambda_2 a^\dagger \left|e\middle\rangle\middle\langle r\right|_j + \mathrm{H.c.}) \tag{1.2–2}$$

1.2.2 第二步

$$\begin{aligned} H^{\mathrm{I}}_{\mathrm{novdW},j} &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}t(\omega_j-\omega_r+\omega_g)}\lambda_1 a^\dagger \left|g\middle\rangle\middle\langle r\right|_j + \mathrm{e}^{\mathrm{i}t(\omega_p-\omega_r+\omega_e)}\lambda_2 a^\dagger \left|e\middle\rangle\middle\langle r\right|_j + \mathrm{H.c.}. \\ &:= \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta}\lambda_1 a^\dagger \left|g\middle\rangle\middle\langle r\right|_j + \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\Delta}\lambda_2 a^\dagger \left|e\middle\rangle\middle\langle r\right|_j + \mathrm{H.c.}. \end{aligned} \tag{1.2–3}$$

$$H^{\mathrm{I}}_{\mathrm{novdW},j} = \hbar(\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta}\omega_j \left|g\middle\rangle\middle\langle r\right|_j + \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\Delta}\omega_p \left|e\middle\rangle\middle\langle r\right|_j + \mathrm{H.c.}). \tag{1.2–4}$$

1.2.3 第三步

$$\begin{aligned} H^{\mathrm{I}} = {} & \omega_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta} \left|gg\middle\rangle\middle\langle rg\right| + \omega_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta} \left|ge\middle\rangle\middle\langle re\right| + \omega_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta} \left|gr\middle\rangle\middle\langle rr\right| \\ & + \omega_p \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\Delta} \left|eg\middle\rangle\middle\langle rg\right| + \omega_p \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\Delta} \left|ee\middle\rangle\middle\langle re\right| + \omega_p \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\Delta} \left|er\middle\rangle\middle\langle rr\right| \\ & + \omega_2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta} \left|gg\middle\rangle\middle\langle gr\right| + \omega_2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta} \left|eg\middle\rangle\middle\langle er\right| + \omega_2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta} \left|rg\middle\rangle\middle\langle rr\right| \\ & + \omega_p \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\Delta} \left|ge\middle\rangle\middle\langle gr\right| + \omega_p \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\Delta} \left|ee\middle\rangle\middle\langle er\right| + \omega_p \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\Delta} \left|re\middle\rangle\middle\langle rr\right| + \mathrm{H.c.}. \end{aligned} \tag{1.2–5}$$

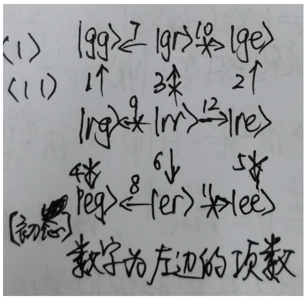

图 1.2: 系统量子态转移图解，注意 1,7 项由于解耦而消去

1.2.4 第四步

$$H_{\rm dd} = J(|rr\rangle\langle+| + \text{H.c.}) \tag{1.2–6}$$

$$H_{\rm vdW} = \mathcal{U}\,|rr\rangle\langle rr| \tag{1.2–7}$$

1.2.5 第五步

将 vdW 视为微扰，将对角项转化为相位，可得每个含 $\langle rr|$ 的项（第 3,6,9,12 项）需减小相位 Δ（即乘 $\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}\Delta}$）。注意到 $\Delta = \mathcal{U} \gg \delta$,，于是第 6,12 项的相位消失，而第 3,9 项近似为 0。再注意到 $\Delta \gg \omega_p$，根据旋波近似，第 4,5,10,11 项近似为 0。此时，由状态转移图可见，第 1,7 项已与其余转移过程解耦，由于我们认为初始状态为 $|eg\rangle$，故第 1,7 项也近似为 0。综上，$H^{\rm I}$ 的表达式只剩 4×2 项，为

$$H^{\rm II} = \hbar(\omega_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta}\,|ge\rangle\langle re| + \omega_p\,|er\rangle\langle rr| + \omega_2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta}\,|eg\rangle\langle er| + \omega_p\,|re\rangle\langle rr| + \text{H.c.}) \tag{1.2–8}$$

1.2.6 第六步

上式中不含时项为 $H_p = \hbar(\omega_p\,|er\rangle\langle rr| + \omega_p\,|re\rangle\langle rr| + \text{H.c.})$，含时项为 $H_\omega = \hbar(\omega_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta}\,|ge\rangle\langle re| + \omega_2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta}\,|eg\rangle\langle er|)$。自然地，我们希望分别将二者作为近似项和微扰项，进行相互作用绘景法表象变换。然而，H_p 并不是对角项。因此我们先将 H_p 对角化。

易知 H_p 在当前基下的表示矩阵为 $\hbar\begin{bmatrix} & \omega_p & \\ \omega_p & & \omega_p \\ & \omega_p & \end{bmatrix}$，求解特征方程 $H_p\,|\psi\rangle = E\,|\psi\rangle$

得

$$\begin{aligned} E_+ = \sqrt{2}\omega_p, &\quad |\psi_+\rangle = \frac{1}{2}\,|er\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\,|rr\rangle + \frac{1}{2}\,|re\rangle\,, \\ E_0 = 0, &\quad |\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,|er\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}\,|re\rangle\,, \\ E_- = -\sqrt{2}\omega_p, &\quad |\psi_-\rangle = \frac{1}{2}\,|er\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}\,|rr\rangle + \frac{1}{2}\,|re\rangle\,. \end{aligned} \tag{1.2–9}$$

反解得

$$
\begin{aligned}
|er\rangle &= \frac{1}{2}|\psi_+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_0\rangle + \frac{1}{2}|\psi_-\rangle\,, \\
|rr\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_-\rangle\,, \\
|re\rangle &= \frac{1}{2}|\psi_+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_0\rangle + \frac{1}{2}|\psi_-\rangle\,.
\end{aligned}
\tag{1.2–10}
$$

于是

$$
\begin{aligned}
H_p &= \sum_{n=+,0,-} E_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|\,, \\
H_\omega &= \hbar\omega \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta}\left(|ge\rangle\left(\frac{1}{2}\langle\psi_+| - \frac{1}{\sqrt{2}}\langle\psi_0| + \frac{1}{2}\langle\psi_-|\right) + |eg\rangle\left(\frac{1}{2}\langle\psi_+| + \frac{1}{\sqrt{2}}\langle\psi_0| + \frac{1}{2}\langle\psi_-|\right)\right),
\end{aligned}
\tag{1.2–11}
$$

代入 1.1–12 得

$$
\begin{aligned}
H^{\mathrm{III}} = \hbar\omega\Bigg(&|ge\rangle\left(\frac{1}{2}\langle\psi_+|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}t(\delta-\sqrt{2}\omega_p)} - \frac{1}{\sqrt{2}}\langle\psi_0|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta} + \frac{1}{2}\langle\psi_-|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}t(\delta+\sqrt{2}\omega_p)}\right) \\
&+ |eg\rangle\left(\frac{1}{2}\langle\psi_+|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}t(\delta-\sqrt{2}\omega_p)} + \frac{1}{\sqrt{2}}\langle\psi_0|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta} + \frac{1}{2}\langle\psi_-|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}t(\delta+\sqrt{2}\omega_p)}\right)\Bigg) + \mathrm{H.c.}
\end{aligned}
\tag{1.2–12}
$$

1.2.7 第七步

$$
\begin{aligned}
H'_{\mathrm{eff}} = \omega^2\Bigg(\Bigg(&\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\delta-\sqrt{2}\omega_p} + \frac{1}{\delta}\right)\left(-\frac{1}{2\sqrt{2}}|\psi_+\rangle\langle\psi_0|\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\sqrt{2}\omega_p} \\
&+ \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\delta-\sqrt{2}\omega_p} + \frac{1}{\delta+\sqrt{2}\omega_p}\right)\left(-\frac{1}{2\sqrt{2}}|\psi_+\rangle\langle\psi_-|\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\sqrt{2}\omega_p} \\
&+ \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\delta} + \frac{1}{\delta+\sqrt{2}\omega_p}\right)\left(-\frac{1}{2\sqrt{2}}|\psi_0\rangle\langle\psi_-|\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\sqrt{2}\omega_p}\Bigg)\times 2 \\
&+ \frac{1}{\delta-\sqrt{2}\omega_p}\left(-\frac{1}{4}|eg\rangle\langle ge|\right) + \frac{1}{\delta}\left(\frac{1}{2}|eg\rangle\langle ge|\right) + \frac{1}{\delta+\sqrt{2}\omega_p}\left(-\frac{1}{4}|eg\rangle\langle ge|\right) + \mathrm{H.c.} \\
&+ \frac{1}{\delta-\sqrt{2}\omega_p}\left(\frac{1}{4}(|\psi_+\rangle\langle\psi_+| - |ge\rangle\langle ge|) + \frac{1}{4}(|\psi_+\rangle\langle\psi_+| - |eg\rangle\langle eg|)\right) \\
&+ \frac{1}{\delta}\left(\frac{1}{2}(|\psi_0\rangle\langle\psi_0| - |ge\rangle\langle ge|) + \frac{1}{2}(|\psi_0\rangle\langle\psi_0| - |eg\rangle\langle eg|)\right) \\
&+ \frac{1}{\delta+\sqrt{2}\omega_p}\left(\frac{1}{4}(|\psi_-\rangle\langle\psi_-| - |ge\rangle\langle ge|) + \frac{1}{4}(|\psi_-\rangle\langle\psi_-| - |eg\rangle\langle eg|)\right)\Bigg)
\end{aligned}
\tag{1.2–13}
$$

在大失谐条件下，只考虑只含 e,g 的项，故有效哈密顿量为

$$
\begin{aligned}
H_{\text{eff}} = \omega^2 \Bigg(& \frac{1}{\delta-\sqrt{2}\omega_p}\left(-\frac{1}{4}\left|eg\right\rangle\!\left\langle ge\right|\right)+\frac{1}{\delta}\left(-\frac{1}{2}\left|eg\right\rangle\!\left\langle ge\right|\right)+\frac{1}{\delta+\sqrt{2}\omega_p}\left(-\frac{1}{4}\left|eg\right\rangle\!\left\langle ge\right|\right)+\text{H.c.} \\
& + \frac{1}{\delta-\sqrt{2}\omega_p}\left(\frac{1}{4}(-\left|ge\right\rangle\!\left\langle ge\right|-\left|eg\right\rangle\!\left\langle eg\right|)\right) \\
& + \frac{1}{\delta}\left(\frac{1}{2}(-\left|ge\right\rangle\!\left\langle ge\right|-\left|eg\right\rangle\!\left\langle eg\right|)\right) \\
& + \frac{1}{\delta+\sqrt{2}\omega_p}\left(\frac{1}{4}(-\left|ge\right\rangle\!\left\langle ge\right|-\left|eg\right\rangle\!\left\langle eg\right|)\right)\Bigg)
\end{aligned} \tag{1.2–14}
$$

故论文 [**PhysRevA.105.032417**] 中的耦合系数

$$
J_{12} = -\frac{\omega^2}{4}\left(\frac{1}{\delta-\sqrt{2}\omega_p}-\frac{2}{\delta}+\frac{1}{\delta+\sqrt{2}\omega_p}\right)=\frac{\omega^2\omega_p^2}{\delta^3-2\delta\omega_p^2} \tag{1.2–15}
$$

而两个 Stark 移位的系数均为

$$
V = -\frac{\omega^2}{4}\left(\frac{1}{\delta-\sqrt{2}\omega_p}+\frac{2}{\delta}+\frac{1}{\delta+\sqrt{2}\omega_p}\right) \tag{1.2–16}
$$

1.3 2022.10.28 第三次：SWAP 门的实现

第二部分

杂项

在需要严格区分左乘与右乘、矩阵维数的情况下，求导公式为:

$$(fg)' = fg' + f'g, \quad (f(g(x)))' = g'(x)f'(g(x)). \tag{1.3–1}$$

应用：如量子力学旋转坐标系、$|x|^p$ 的求导。

图片索引

1.1 原子能级示意图（两个原子的能级相同） 10
1.2 系统量子态转移图解，注意 1,7 项由于解耦而消去 11

表格索引