目 录

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，具体方法又分 a) 相互作用绘景法；b) 旋转坐标系法。

2. 通过定理 1.1.4，求解系统的有效哈密顿量。其中在套完公式后，需要在大失谐情况下，认为激发态的出现概率约为 0（这是因为此时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。

以下对上述计算方法一一进行介绍。

1.1.1 表象变换（相互作用绘景法）

在正式计算前，先给出预备知识。首先是绘景变换：

定理 1.1.1 若一系统（在薛定谔绘景下）的哈密顿量 H^S 可拆成近似项 H_0^S 和微扰项 V^S 之和，则系统在相互作用绘景下的哈密顿量为

$$H^{\mathrm{I}} = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}H_0^{\mathrm{S}}} V^S \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}H_0^{\mathrm{S}}}. \tag{1.1–1}$$

证明 见陈童 [4]。 □

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。

以上公式中的右边常用以下引理进行化简：

引理 1.1.3 (曾谨言习题 4.37) 对任意算符 A, B，有

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

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

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

特别地，当用相互作用绘景计算微扰时，常用下式

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

1.1.2 表象变换（旋转坐标系法）

旋转坐标系：取一算符 A，可将该系统的量子态从 $|\psi\rangle$ 变为 $|\psi\rangle_R = \mathrm{e}^{\mathrm{i}tA}|\psi\rangle$。显然 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}tA}$ 是幺正变换。求导得

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}\,|\psi_R\rangle}{\mathrm{d}t} &= \mathrm{i}\hbar\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}tA}\frac{\mathrm{d}\,|\psi\rangle}{\mathrm{d}t} + \mathrm{i}A\mathrm{e}^{\mathrm{i}tA}|\psi\rangle\right) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}tA}H|\psi\rangle - \hbar A\mathrm{e}^{\mathrm{i}tA}|\psi\rangle \\ &= (\mathrm{e}^{\mathrm{i}tA}H\mathrm{e}^{-\mathrm{i}tA} - \hbar A)\mathrm{e}^{\mathrm{i}tA}|\psi\rangle = (\mathrm{e}^{\mathrm{i}tA}H\mathrm{e}^{-\mathrm{i}tA} - \hbar A)|\psi_R\rangle. \end{aligned} \tag{1.1–6}$$

可以看出，经过坐标变换，哈密顿量由 H 变为了 $H_R = \mathrm{e}^{\mathrm{i}tA}H\mathrm{e}^{-\mathrm{i}tA} - \hbar A$。结合引理 1.1.3 可知，选取合适的 A 可使哈密顿量得到简化。

知乎文章 [1] 中以具有如下形式哈密顿量的二能级系统为例：

$$H = V\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta}\,|g\rangle\langle e| + \mathrm{H.c.} = \begin{bmatrix} & V\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\delta} \\ V\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta} & \end{bmatrix} \tag{1.1–7}$$

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

$$\begin{aligned} H_R &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\frac{1}{2}\delta(|e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|)}(V\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta}\,|g\rangle\langle e| + \mathrm{H.c.})\mathrm{e}^{\cdots} - \frac{1}{2}\hbar\delta(|e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|) \\ &= (V\,|g\rangle\langle e| + \mathrm{H.c.}) - \frac{1}{2}\hbar\delta(|e\rangle\langle e| - |g\rangle\langle g|) \end{aligned} \tag{1.1–8}$$

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

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

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!)

$$\begin{bmatrix} & V\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\delta} \\ V\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta} & \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} \frac{1}{2}\hbar\delta & V \\ V & -\frac{1}{2}\hbar\delta \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} & V\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\delta} \\ V\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta} & \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} \frac{1}{2}\hbar\delta & V \\ V & -\frac{1}{2}\hbar\delta \end{bmatrix} \tag{1.1–10}$$

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 $\hbar=1$)：

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

$$\begin{bmatrix} & & & \omega\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\delta} & & & \\ & & \omega_p & & & & \\ & \omega_p & & & \omega_p & & \\ \omega\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta} & & \omega_p & & & & \omega\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta} \\ & & & \omega\mathrm{e}^{-\mathrm{i}t\delta} & & & \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} \delta & & & \omega & \\ & & \omega_p & & \\ & \omega_p & & \omega_p & \\ \omega & & \omega_p & & \omega \\ & & & \omega & \delta \end{bmatrix} \tag{1.1–11}$$

知乎文章 [1] 解释了旋转坐标系法的物理图景。

1.1.3 大失谐近似求有效哈密顿量

引理 1.1.4 (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

$$H^{\mathrm{I}} = \sum_n h_n e^{it\omega_n} + \mathrm{H.c.} \tag{1.1–12}$$

时，其有效哈密顿量为

$$H_{\mathrm{eff}} = \sum_{m,n} \frac{1}{\hbar}\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\omega_m}+\frac{1}{\omega_n}\right)[h_m^\dagger, h_n]e^{it(\omega_m-\omega_n)}. \tag{1.1–13}$$

证明 这是论文 [2] 的主要结果，也可见 [3] 的附录。 □

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

$$H = \omega_g |g\rangle\langle g| + \omega_i |i\rangle\langle i| + \omega a^\dagger a + (\lambda_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\omega} |g\rangle\langle i| + \lambda_2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\omega} |e\rangle\langle i| + \mathrm{H.c.}) \tag{1.1–14}$$

在全量子理论中，其哈密顿量为

$$H = \omega_g |g\rangle\langle g| + \omega_i |i\rangle\langle i| + \omega_e |e\rangle\langle e| + \omega a^\dagger a + (\lambda_1 a^\dagger |g\rangle\langle i| + \lambda_2 a^\dagger |e\rangle\langle i| + \text{H.c.}) \tag{1.1–15}$$

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计算，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，由定理 1.1.1 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 1.1.4 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，利用定理 1.1.1，得相互作用绘景下的哈密顿量为

$$H^{\mathrm{I}} = e^{it(\omega-\omega_i+\omega_g)}\lambda_1 a^\dagger |g\rangle\langle i| + e^{it(\omega-\omega_i+\omega_e)}\lambda_2 a^\dagger |e\rangle\langle i| + \text{H.c.}. \tag{1.1–16}$$

而有效哈密顿量为

$$H_{\text{eff}} = \frac{1}{\hbar\Delta} a^\dagger a \left(\lambda_1^2 |g\rangle\langle g| + \lambda_2^2 |e\rangle\langle e| + \lambda_1\lambda_2(|e\rangle\langle g| + \text{H.c.})\right). \tag{1.1–17}$$

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 $H^{\mathrm{S}}_{\text{novdW},j}$；

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 1.1.4 结合大失谐条件求得有效哈密顿量 H_{eff}。

1.2.1 第一步

$$H^{\mathrm{S}}_{\mathrm{novdW},j} = \omega_g \left|g\right\rangle\!\left\langle g\right|_j + \omega_i \left|r\right\rangle\!\left\langle r\right|_j + \omega_e \left|e\right\rangle\!\left\langle e\right|_j + \omega a^\dagger a + (\lambda_1 a^\dagger \left|g\right\rangle\!\left\langle r\right|_j + \lambda_2 a^\dagger \left|e\right\rangle\!\left\langle r\right|_j + \mathrm{H.c.}) \tag{1.2–1}$$

1.2.2 第二步

$$\begin{aligned} H^{\mathrm{I}}_{\mathrm{novdW},j} &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}t(\omega_j-\omega_r+\omega_g)}\lambda_1 a^\dagger \left|g\right\rangle\!\left\langle r\right|_j + \mathrm{e}^{\mathrm{i}t(\omega_p-\omega_r+\omega_e)}\lambda_2 a^\dagger \left|e\right\rangle\!\left\langle r\right|_j + \mathrm{H.c.}. \\ &:= \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta}\lambda_1 a^\dagger \left|g\right\rangle\!\left\langle r\right|_j + \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\Delta}\lambda_2 a^\dagger \left|e\right\rangle\!\left\langle r\right|_j + \mathrm{H.c.}. \end{aligned} \tag{1.2–2}$$

$$H^{\mathrm{I}}_{\mathrm{novdW},j} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta}\omega_j \left|g\right\rangle\!\left\langle r\right|_j + \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\Delta}\omega_p \left|e\right\rangle\!\left\langle r\right|_j + \mathrm{H.c.}. \tag{1.2–3}$$

1.2.3 第三步

$$\begin{aligned} H^{\mathrm{I}} = \omega_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta}\left|gg\right\rangle\!\left\langle rg\right| + \omega_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta}\left|ge\right\rangle\!\left\langle re\right| + \omega_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta}\left|gr\right\rangle\!\left\langle rr\right| \\ + \omega_p\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\Delta}\left|eg\right\rangle\!\left\langle rg\right| + \omega_p\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\Delta}\left|ee\right\rangle\!\left\langle re\right| + \omega_p\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\Delta}\left|er\right\rangle\!\left\langle rr\right| \\ + \omega_2\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta}\left|gg\right\rangle\!\left\langle gr\right| + \omega_2\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta}\left|eg\right\rangle\!\left\langle er\right| + \omega_2\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta}\left|rg\right\rangle\!\left\langle rr\right| \\ + \omega_p\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\Delta}\left|ge\right\rangle\!\left\langle gr\right| + \omega_p\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\Delta}\left|ee\right\rangle\!\left\langle er\right| + \omega_p\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\Delta}\left|re\right\rangle\!\left\langle rr\right| + \mathrm{H.c.}. \end{aligned} \tag{1.2–4}$$

1.2.4 第四步

$$H_{\mathrm{dd}} = J(|rr\rangle\langle +| + \mathrm{H.c.}) \tag{1.2–5}$$

$$H_{\mathrm{vdW}} = \mathcal{U}\,|rr\rangle\langle rr| \tag{1.2–6}$$

1.2.5 第五步

$$H^{\mathrm{II}} = \omega_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta}\,|ge\rangle\langle re| + \omega_p\,|er\rangle\langle rr| + \omega_2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta}\,|eg\rangle\langle er| + \omega_p\,|re\rangle\langle rr| + \mathrm{H.c.} \tag{1.2–7}$$

1.2.6 第六步

$$\begin{aligned} H^{\mathrm{III}} = \hbar\omega\Bigg(& |ge\rangle \left(\frac{1}{2}\langle\psi_+|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}t(\delta-\sqrt{2}\omega_p)} - \frac{1}{\sqrt{2}}\langle\psi_0|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta} + \frac{1}{2}\langle\psi_-|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}t(\delta+\sqrt{2}\omega_p)}\right) \\ & + |eg\rangle \left(\frac{1}{2}\langle\psi_+|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}t(\delta-\sqrt{2}\omega_p)} + \frac{1}{\sqrt{2}}\langle\psi_0|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\delta} + \frac{1}{2}\langle\psi_-|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}t(\delta+\sqrt{2}\omega_p)}\right)\Bigg) + \mathrm{H.c.} \end{aligned} \tag{1.2–8}$$

1.2.7 第七步

$$H_{\mathrm{eff}} = \hbar\omega\Bigg(cv\Bigg) \tag{1.2–9}$$

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。

参考文献

[1] URL: https://zhuanlan.zhihu.com/p/355327986 (引用于 pp. 5, 6).

[2] Daniel F. V. James and Jonathan Jerke. “Effective Hamiltonian theory and its applications in quantum information”. 刊于: *Canadian Journal of Physics* 85 (2007), pp. 625–632 (引用于 p. 6).

[3] 张智明. 量子光学. 科学出版社, 2015 (引用于 p. 6).

[4] 陈童. 量子力学新讲. URL: http://newquanta.com/ (引用于 p. 4).

图片索引

表格索引