6. prednáška

Kvantová mechanika II – časový vývoj kvantových systémov, entaglované kvantové stavy

6.1 Časový vývoj kvantových systémov

Definícia 6.1. Hovoríme, že v čase t kvantový systém Q je popísaný stavom $|\psi(t)\rangle$ vtedy a len vtedy, ak jeho časový vývoj je popísaný ***Schroedingerovou rovnicou***

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \tag{6.1}$$

operátor H je pozorovateľná nazývaná ***hamiltonián*** systém Q.

Pre jednoduchosť budeme predpoklad, že študovaný kvantový systém Q je ***uzavretý***, t. j. hamiltonián H nezávisí explicitne na čase

$$\frac{\partial H}{\partial t} = 0 \tag{6.2}$$

Schroedingerovu rovnicu (6.1) môžeme pomocou unitárneho ***vlnového operátora***

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle \tag{6.3}$$

prepísať do integrálneho tvaru

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} \tag{6.4}$$

Ľahko sa presvedčíme, že takto špecifikovaný vlnový operátor vyhovuje Schroedingerovej rovnici (6.1). Unitárnosť operátora (6.4) priamo plynie z predpokladu, že H je hermitovský operátor.

Nech $|\psi_1\rangle$ a $|\psi_2\rangle$ sú dva stavy kvantového systému Q, budeme požadovať, aby tieto stavy boli navzájom spriahnuté pomocou unitárneho operátora

$$|\psi_1\rangle = U|\psi_2\rangle, \text{ alebo } |\psi_2\rangle = U^+|\psi_1\rangle \tag{6.5}$$

Tento predpoklad má zásadnú dôležitosť v teórii kvantového počítania, každá elementárna operácia pri implementácii kvantového počítania musí byť realizovaná pomocou unitárneho operátora. Pretože unitárny operátor musí byť 1-1-značný, tieto elementárne operácie sú vratné – mikroreverzibilne.

Budeme počítať časovú deriváciu strednej hodnoty $\langle O\rangle = \langle\psi|O|\psi\rangle$

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle O\rangle &= \frac{d}{dt}\langle\psi|O|\psi\rangle = \left\langle\frac{\partial}{\partial t}\psi\middle|O\middle|\psi\right\rangle + \langle\psi|\frac{\partial}{\partial t}O|\psi\rangle + \left\langle\psi\middle|O\middle|\frac{\partial}{\partial t}\psi\right\rangle \\ &= \left\langle-\frac{i}{\hbar}H\psi\middle|O\middle|\psi\right\rangle + \langle\psi|\frac{\partial}{\partial t}O|\psi\rangle + \left\langle\psi\middle|O\middle|-\frac{i}{\hbar}H\psi\right\rangle \\ &= \langle\psi|\underbrace{\left(\frac{i}{\hbar}(HO-OH)+\frac{\partial O}{\partial t}\right)}_{\frac{dO}{dt}}|\psi\rangle = \langle\psi|\frac{dO}{dt}|\psi\rangle\end{aligned} \tag{6.6}$$

Tento výsledok môžeme formálne zapísať pomocou pojmu „***totálna derivácia pozorovateľnej***“

$$\frac{dO}{dt} = \frac{\partial O}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}[H,O] \tag{6.7}$$

kde $[A,B] = AB - BA$ je ***komutátor*** operátorov A a B. Z tejto formuly vyplýva dôležitá vlastnosť, stredná pozorovatreľnej O má nenulovú časovú derivácie (t. j.) nie je konštantná v čase z dvoch dôvodov, buď explicitne závisí na čase (napr. prítomnosťou externého časovo premenného poľa), alebo, aj keď nezávisí explicitne na čase, nekomutuje s hamiltoniánom systému. Tento druhý dôvod je pre interpretáciu kvantovej mechaniky o mnoho zaujimavejší, k tomu, aby stredná hodnota pozorovateľnej bola konštatná v čase, nesmie samotná pozorovateľná O súčasne explicitne závisieť na čase a taktiež musí komutovať s hamiltoniánom systému.

6.2 Entaglované kvantové stavy

Nech Q_1 a Q_2 sú nezávislé kvantové systémy, ktoré boli pripravené v stavoch $|\psi_1\rangle \in H_1$ a $|\psi_2\rangle \in H_2$, ktoré sú spojené do jedného kvantového systému Q. Stav $|\psi\rangle \in H$ globálneho kvantového systému Q je špecifikovaný pomocou tenzorového súčinu stavov $|\psi_1\rangle \in H_1$ a $|\psi_2\rangle \in H_2$

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \in H = H_1 \otimes H_2$$

6.2.1 Tvorba entaglovaného kvantového stavu

Nech Q_1, Q_2, ..., Q_n sú nezávislé kvantové systémy, ktorých stavy sú popísané vektormi z unitárnych priestorov

$$\begin{gathered}H_1 = span\{|\uparrow_1\rangle, |\rightarrow_1\rangle\} \\ H_2 = span\{|\uparrow_2\rangle, |\rightarrow_2\rangle\} \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ H_n = span\{|\uparrow_n\rangle, |\rightarrow_n\rangle\}\end{gathered}$$

V každom tomto unitárnom priestore vytvoríme qubit

$$\begin{gathered}|\nearrow_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow_1\rangle + |\rightarrow_1\rangle\right) \\ |\nearrow_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow_2\rangle + |\rightarrow_2\rangle\right) \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\end{gathered}$$

$$\left|\nearrow_n\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\uparrow_n\right\rangle + \left|\rightarrow_n\right\rangle\right)$$

Nech Q je globálny kvantový systém, ktorého stav (nazývaný ***n-qubitový register***) je špecifikovaný pomocou tenzorového súčinu stavov z jednotlivých podsystémov

$$\begin{aligned}\left|\psi\right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\uparrow_1\right\rangle + \left|\rightarrow_1\right\rangle\right)\otimes\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\uparrow_2\right\rangle + \left|\rightarrow_2\right\rangle\right)\otimes\ldots\otimes\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\uparrow_n\right\rangle + \left|\rightarrow_n\right\rangle\right)\\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n}}\left(\left|\uparrow_1\uparrow_2\ldots\uparrow_n\right\rangle + \left|\uparrow_1\uparrow_2\ldots\rightarrow_n\right\rangle + \ldots + \left|\rightarrow_1\rightarrow_2\ldots\rightarrow_n\right\rangle\right)\end{aligned}$$

ktorý patrí do unitárneho priestoru $H = H_1 \otimes H_2 \otimes \ldots \otimes H_n$. V teórii kvantového počítanie sa tento výsledok často prepisuje pomocou binárnych premenných 0 a 1

$$\begin{aligned}\left|\psi\right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|0_1\right\rangle + \left|1_1\right\rangle\right)\otimes\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|0_2\right\rangle + \left|1_2\right\rangle\right)\otimes\ldots\otimes\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|0_n\right\rangle + \left|1_n\right\rangle\right)\\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n}}\left(\left|0_1 0_2\ldots 0_n\right\rangle + \left|0_1 0_2\ldots 1_n\right\rangle + \ldots + \left|1_1 1_2\ldots 1_n\right\rangle\right)\\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n}}\sum_{x=0}^{2^n-1}\left|x\right\rangle\end{aligned}$$

kde celočíselná premenná x je určená interpretáciu binárneho reťazca $\left(b_1 b_2 \ldots b_n\right)$

$$x = b_n + 2b_{n-1} + 2^2 b_{n-2} + \ldots + 2^{n-1} b_1$$

To znamená, že n-qubitový register ***obsahuje superpozíciu všetkých celých čísel*** od 0 do 2n-1, toto je príklad kvantového masívneho paralelizmu. Táto vlastnosť má však aj jednu nepríjemnú vlastnosť, ak nad n-qubitovým registrom vykonáme meranie, potom tento paralelizmus zmizne a zostane len jeden stav z množiny $\{0,1,2,\ldots,2^n\text{-}1\}$. Pravdepodobnosť pozorovania jedného stavu je $(½)^n$. Výber celého čísla, ktoré je pozorované nie je robený pozorovateľom, ale kvantovým systémom, čo podstatne komplikuje implementáciu algoritmov kvantového počítania.

6.2.2 Dynamika 2-qubitového registra

Podľa postupu z predchádzajúcej kapitoly 2.5.1 vytvoríme 4 stact 2-qubitového registra

$$\left|0\right\rangle = \left|00\right\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix},\quad \left|1\right\rangle = \left|01\right\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix}$$

$$\left|2\right\rangle = \left|10\right\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix},\quad \left|3\right\rangle = \left|11\right\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}$$

Predpokladajme, že počiatočný stav $\left|\psi\right\rangle_{t=0}$ nášho 2-qubitového registra má tvar

$$
|\psi\rangle_{t=0} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle - |1\rangle\right)\otimes|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|00\rangle - |10\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle - |2\rangle\right) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}
$$

Taktiež predpokladajme, že kvantový systém je popísaný hamiltoniánom, ktorý v báze $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\} = \{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ má maticovú reprezentáciu

$$
\frac{\pi\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}
$$

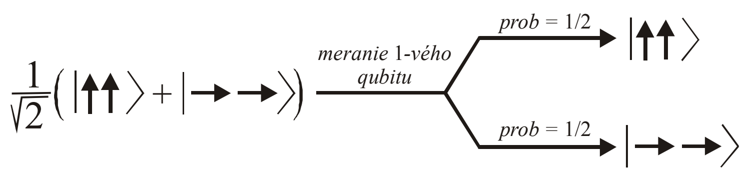
Potom unitárny vlnový operátor má tvar

$$
U_{CNOT}(1,0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2| + |3\rangle\langle 3|
$$

Potom

$$
|\psi(1)\rangle = U(1,0)|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|00\rangle - |11\rangle\right)
$$

To znamená, že z počiatočného stavu $|\psi\rangle_{t=0} = 1/\sqrt{2}\left(|0\rangle - |1\rangle\right)\otimes|0\rangle = 1/\sqrt{2}\left(|00\rangle - |10\rangle\right)$, ktorý bol špecifikovaný pomocou tenzorového súčinu dvoch 1-qubitových stavov, sme aplikovaním unitárneho evolučného operátora dostali nový stav $|\psi(1)\rangle = 1/\sqrt{2}\left(|00\rangle - |11\rangle\right)$, ktorý sa nedá špecifikovať pomocou tenzorového súčinu dvoch elementárnych stavov. Táto skutočnosť môže byť alternatívne vyjadrená tak, že časovou evolúciou pôvodne separované dva qubity stratili svoju identitu, meranie jedného qubitu ovplyvňuje identitu druhého qubitu



Táto skutočnosť je neobyčajného charakteru a nemá obdobu v našom „klasickom svete“.

6.2.3 Definícia entaglovaných stavov

Definícia 6.2. Nech Q_1, Q_2, ..., Q_n sú kvantové systému, ktorých stavy sú charakterizované vektormi z unitárnych priestorov H_1, H_2, ..., H_n . Globálny kvantový systém Q, ktorý obsahuje ako podsystémy Q_1, Q_2, ..., Q_n sa nazýva ***entaglovaný*** vtedy a len vtedy, ak jeho stav $|\psi\rangle \in H = \bigotimes_{i=1}^{n} H_i$ nemôže byť písaný v tvare

$$\left|\psi\right\rangle = \otimes_{i=1}^{n}\left|\psi_i\right\rangle \tag{6.8}$$

kde $\forall i\left(\left|\psi_i\right\rangle \in H_i\right)$. Taktiež môžeme povedať, že stav $\left|\psi\right\rangle$ je ***entaglovaný***.

Podľa tejto definície, stav z predchádzajúceho príkladu $\left|\psi(1)\right\rangle = 1/\sqrt{2}\left(\left|00\right\rangle - \left|11\right\rangle\right)$, systému *Q*, ktorý obsahuje ako podsystémy Q_1 a Q_2, je entaglovaný; nemôžeme ho vyjadriť pomocou tenzorového súčinu dvoch stavov, ktoré špecifikujú 1-qubitové systémy Q_1 a Q_2.

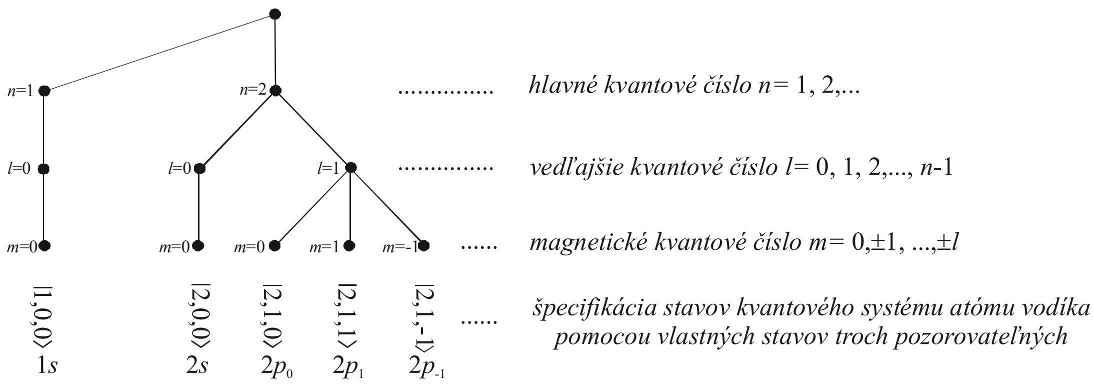
6.3 Úplný súbor komutujúcich pozorovateľných

Určitý formálny problém pri meraní môže vzniknúť s vhodnou interpretáciou takých stavov kvantového systému, ktoré sú degenerované, t. j. sú priradené viacnásobnej vlastnej hodnote. Predpokladajme, že v kvantovom systéme *Q* máme *p* pozorovateľných $\mathcal{O} = \left\{O_1, O_2, \ldots, O_p\right\}$, ktoré sú po dvojiciach komutujúce, $O_i O_j = O_j O_i$, pre $i \neq j$. Systém vlastných hodnôt pozorovateľnej O_i nech je označený $\left\{\lambda_1^{(i)} < \lambda_2^{(i)} < \ldots < \lambda_{n_i}^{(i)}\right\}$, kde každá vlastná hodnota je uvedená práve raz. Potom každý stav kvantového systému *Q* môže byť popísaný pomocou vlastných hodnôt množiny pozorovateľných $\mathcal{O}$, $\left|\lambda_{i_1}^{(1)}, \lambda_{i_2}^{(2)}, \ldots, \lambda_{i_p}^{(p)}\right\rangle$, alebo pre jednoduchosť uvedieme len poradie príslušnej vlastnej hodnoty, $\left|i_1, i_1, \ldots, i_p\right\rangle = \left|\boldsymbol{i}\right\rangle$, kde $\boldsymbol{i} = \left(i_1, i_1, \ldots, i_p\right)$ je *p*-tica celých čísel. Hovoríme, že množina pozorovateľných $\mathcal{O} = \left\{O_1, O_2, \ldots, O_p\right\}$ tvorí ***úplný systém*** vtedy a len vtedy, ak každý kvantový stav systému *Q* je jednoznačne špecifikovaný vlastnými hodnotami systému $\mathcal{O}$, t. j. nevyskytujú sa také dva rôzne stavy systému, ktoré vy boli špecifikované rovnakou *p*-ticou indexov $\boldsymbol{i} = \left(i_1, i_1, \ldots, i_p\right)$.

Definícia 6.3. V každom kvantovom systéme *Q* existuje ***úplný súbor navzájom komutujúcich pozorovateľných*** $\mathcal{O} = \left\{O_1, O_2, \ldots, O_p\right\}$, ktorých vlastné stavy jednoznačne špecifikujú stavy systému *Q*.

Z tejto definície vyplýva, že ak nejaké dva stavy sú degenerované, potom tieto stavy môžu byť rozlíšené pomocou vlastných hodnôt existujúceho úplného súboru pozorovateľných.

Pre ilustráciu pojmu úplného systému pozorovateľných a jeho použitia pre jednoznančnú špecifikáciu stavov systému, uvažujme atóm vodíka, ktorého stavy sú jednoducho plne špecifikované pomocou trojice operátorov, ktoré pochádzajú z hamiltoniánu systému separovaného vo sférických súradniciach na (1) radiálna časť, (2) angulárna časť a (3) xxxx časť. Z teórie riešenia Schroedingerovej rovnice vyplýva, že stavy systémov sú plne špecifikované ako $\left|n, l, m\right\rangle$, kde $n \geq 1$ je hlavné kvantové číslo, $l = 0, 1, \ldots, n\text{-}1$ je vedľajšie kvantové číslo, a $m = 0, \pm 1, \ldots, \pm l$ je magnetické kvantové číslo. Klasifikácia prvých dvoch stavov (degenerovaných s $n = 1$ a $n = 2$) je ukázaná na obrázku.


n=1
n=2
l=0
l=0
l=1
m=0
m=0
m=0
m=1
m=-1
|1,0,0⟩
1s
|2,0,0⟩
2s
|2,1,0⟩
2p0
|2,1,1⟩
2p1
|2,1,-1⟩
2p-1
hlavné kvantové číslo n= 1, 2,...
vedľajšie kvantové číslo l= 0, 1, 2,..., n-1
magnetické kvantové číslo m= 0,±1, ...,±l
špecifikácia stavov kvantového systému atómu vodíka
pomocou vlastných stavov troch pozorovateľných