1) Блохинцев Д.И.
Основы квантовой механики.

2) Ландау Лифшиц.

3) Ярив А.
Введение в теорию и приложения кв. механики.

4) Г.П. Берман и др.
Введение в квантовые компьютеры.

5) Квант. компьютеры и кв. вычисления под редакцией Садовничего.

Квантовая механика

O - микрообъём.

Δx

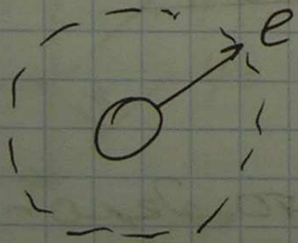
$p = mv$ — импульс

локализ-ия микрообъёма

$p \cdot \Delta x$ — действие

$\hbar = 10^{-27}$ — пост. Планка

$\boxed{p\Delta x \lesssim \hbar}$ — хар-ка микрообъёмов описывает кв. физика



$\Delta x \sim 10^{-9}$

$v = 10^{8}$ см/с

$m \sim 10^{-27}$ г

$p\Delta x \sim 10^{-27}$ эрг·сек

$V \sim 1$ см/с

$m \sim 1$ г.

действие ~ 1 эрг/сек.

{наука о поведении микрообъёмов}

Квантовая механика

кв. вычисления

кв. криптография

кв. телепортация

передача инф-ции по кв. каналам

кв. компьютеры

1900 г — зарождение квант.

1920–1930 — развитие

1940 — полупров. транзистор (классический бит)

1960 — лазер

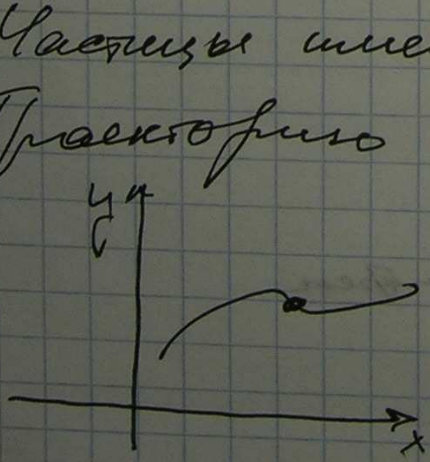
2000 — кв. информатика

??? — кв. компьютер

Частицы и волны класс. физика

Частицы имеют координаты.

Траекторию



Волны — нечто делокализованное

Плоская волна:

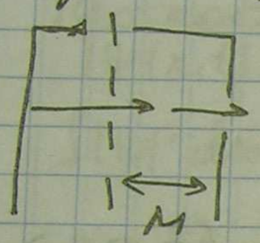
$$\psi(x,t) = \underbrace{A}_{\text{амплитуда}} \sin(\underbrace{\omega t - kx}_{\text{фаза}})$$

$k = \frac{2\pi}{\lambda}$ – волновое число

λ – длина волны

<u>Дифракция электронов</u>

пример с катодом (монохром пучок)



$M = \frac{mv^2}{2}$

$v = \sqrt{\frac{2eU}{m}}$

$p = mv = \sqrt{2meU}$

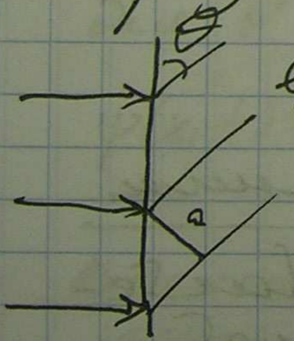
разность потенциалов

Эта схема позволяет привести в одинаково ~~состояние~~ все электроны

(одним импульсом) – поставим детектор (например, фотопленку)

$\Rightarrow$ реагирует на поле

фаза одинаковая $e^{-i\omega t}$



$\psi_1 = e^{-i\omega t - \alpha x}$

$\psi_2 = e^{-i\omega t - k(x+a)}$

$$|\psi|^2 = |\psi_1 + \psi_2|^2 = |A^2| \cdot |e^{ikx} + e^{ik(x+\Delta x)}|^2 =$$

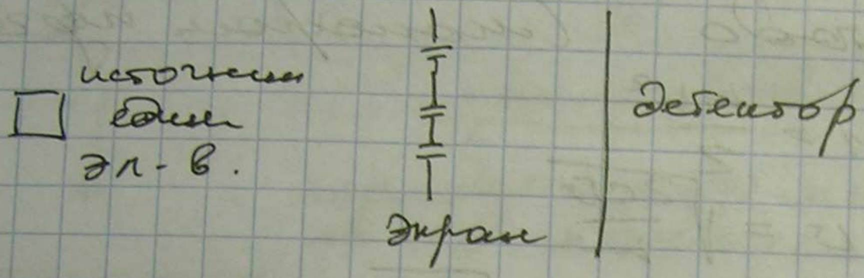
$$= 4|A|^2 \cos^2\left(\frac{k \cdot 2\sin\theta}{2}\right) \qquad \angle = d\sin\theta$$

Это простейшая дифракция на 2-х отверстиях

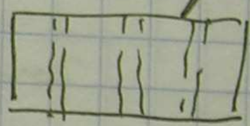
Гипотеза Де Бройля – с каждым электронам связана волна:

$$\psi = Ae^{i(kx-\omega t)}$$

$$p = \hbar k \; ; \; \hbar\omega = \frac{p^2}{2m}$$



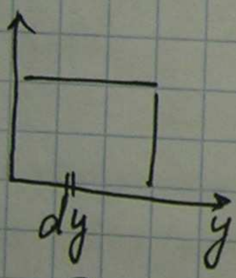
пускаем по одному $\bar{e}$ многораз $\Rightarrow$

$\Rightarrow$ получаем полоски 

с т. зрения теор. вер-ти

$N \to \infty$ $\quad dP(y) = \dfrac{dN(y)\,dy}{N}$

плотн-ть вер-ти попадания эл-на в dy



1 Первый постулат квант. механики

$\forall$ микрообъём полностью характеризуется волновой ф-цией $\psi(\vec{r}, t)$ (имеет статистический смысл; пл-ть попадания $\bar{e}$ в т. $\vec{r}$ в момент t)

Принцип суперпозиции. Соотношения неопр-ти. Ур-е Шредингера (Гайзенберга)

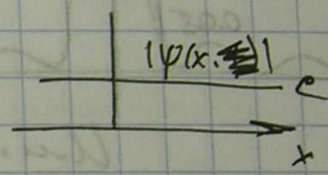
Волна Де Бройля. $\psi_k(x) = Ce^{ikx-i\omega t}$

$\vec{p}$ $\quad \vec{c} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$ $\quad \hbar\omega = \frac{p^2}{2m}$

Плотность вер-ти нах-я частицы в обл.:
$|\psi(x,t)|^2$

$\int|\psi|^2 dx = 1$

$|Ce^{ikx-i\omega t}|^2 = |\psi(x,t)|^2 = |C|^2 = const.$



Нормировка в ящике.

Когда импульс задан $\longleftrightarrow$ опр. координаты
+ удовл. соотн. Гайзенберга.

Принцип суперпозиции — весь микромир держится на нём

2 Состояния:
$\psi_1(x,t)$, $\psi_2(x,t)$ $\Rightarrow$ может находится в состоянии $\psi(x,t) = C_1\psi_1(x,t) + C_2\psi_2(x,t)$

С какой точностью опр-ся координата?

для N волновых ф-ций: $\psi = \sum_n C_n\psi_n$

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\Delta k}\int_{k_0-\frac{\Delta k}{2}}^{k_0+\frac{\Delta k}{2}} dk\cdot A(k)\exp\{i(kx-\omega(k)t\}$$ волновой пакет.

Волн. пакет узкий, если $\Delta k \ll k_0$ $\Rightarrow$ м. разложить в р. Тейлора в окр. т. k_0

$\omega(k) = \omega(k_0) + \frac{\partial\omega}{\partial k}(k-k_0)$; $\quad \xi = k-k_0$; $\quad A(k) \approx A(k_0)$

$$\psi(x,t) = \frac{A_0}{\Delta k}e^{i(k_0x-\omega_0t)}\int_{k_0-\frac{\Delta k}{2}}^{k_0+\frac{\Delta k}{2}} e^{i\xi(x-\frac{\partial\omega}{\partial k_0}t)}d\xi$$

$$\frac{\partial\omega}{\partial k_0} = \frac{\partial}{\partial k}\left(\frac{\hbar k^2}{2m}\right)\Big|_{k=k_0} = \frac{\hbar k_0}{m} = V_0$$

$\hbar k_0$ — имп. ч.
m — масса частицы

$$\psi(x,t) = \frac{A_0}{\Delta k}e^{i(k_0x-\omega_0t)}\frac{\sin\frac{\Delta k(x-V_0t)}{2}}{\frac{\Delta k(x-V_0t)}{2}}$$

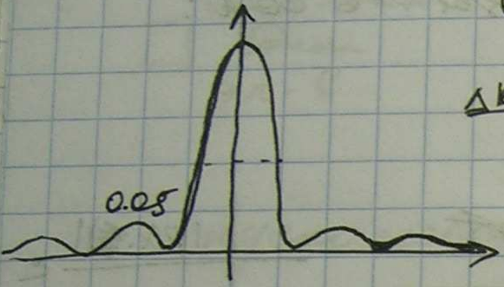
Волновой пакет

Пусть $y = \frac{\Delta k(x - v_0 t)}{2}$ $\Rightarrow$

$$\psi(x,t) = \frac{\sin y}{y}\cdot A_0 e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}$$

$\Rightarrow$ переходим к плотн. вер-ти нах-я частицы в м. времени t в x

$$|\psi(x,t)|^2 = A_0^2 \frac{\sin^2 y}{y^2}$$



$\frac{\Delta k(x - v_0 t)}{2}$

$\frac{dx}{dt} = v_0$

частица движ-ся со скоростью v_0 вправо отн. оси x.

Импульс опр-н с точностью до Δk

$$\Delta y = \Delta\left(\frac{\Delta k(x - v_0 t)}{2}\right) = \{\Delta k = const,\ t = const\} = \underbrace{\frac{\Delta k}{2}\Delta x}_{=\pi}$$

положим равным $\forall const$. Пусть π

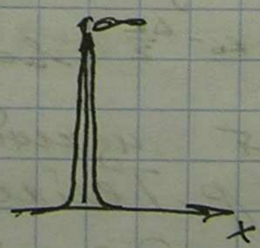
Умножим обе части равенства на $\hbar$

$\Rightarrow$ $\boxed{\Delta p \Delta x = 2\pi\hbar}$. Если импульс опр-н точно $\Rightarrow$ $\Delta p = 0$

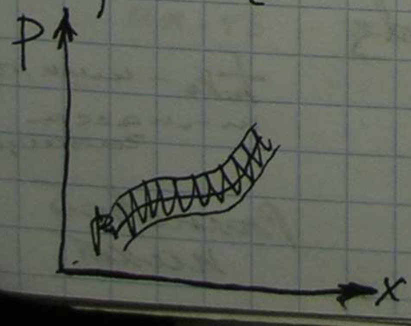
$\Delta x = \infty$ $\Rightarrow$ коорд. точно не определена.

Если $\Delta x = 0$ $\Rightarrow$ $\Delta p = \infty$ $\Rightarrow$ импульс не определён

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx}\,dk = \delta(x)$$



$$\Delta p \Delta x \geq \frac{\pi}{2}$$



Постулаты квантовой механики

① Квант. объёк описывается волн. ф-ей

② ∀ класс. физич. вел. н соотв. оператор. Знач. физич. величины, измеряемой в эксперим., опр.-ся средним значением соотв. оператора.

Операторы

1) Координата $\hat{x}$ $\langle x \rangle$ – среднее

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* x \psi \, dx$$

$$f(x) \Rightarrow \langle f(x) \rangle = \int \psi^* f \psi \, dx$$

2) Импульса $\hat{p}$:

$$\langle \hat{p} \rangle = \int \psi^* \hat{p} \psi \, dx$$

Волна Де Бройля: $\psi(x) = A e^{i\left(\frac{p}{\hbar}x\right)}$

$$\langle p \rangle = p = A^2 \int e^{-i\frac{p}{\hbar}x} e^{i\frac{p}{\hbar}x} dx \, ; \quad A^2 \int \psi^* \psi \, dx = 1.$$

3) $\hat{p} \to \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ оператор дифференцирования по координате.

Обобщим для 3-хмерного случая

$$\vec{\hat{p}} = -i\hbar \, \mathrm{grad}$$

4) Правило постр. произвольного оператора

$$F(\vec{r}, \vec{p}) \xrightarrow{?} \hat{F} \qquad \boxed{\hat{F} = F(\vec{r}, \vec{\hat{p}})}$$

Пример: Энергия $H = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}) =$

$$= \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\vec{r}) = \Rightarrow (\mathrm{grad}\,\mathrm{grad} = \Delta) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r})$$

Св-ва 1) операторы кв. мех. линейны
кв. механика — линейная теория

2) эрмитовы операторы.

$$\int \psi_1^* \hat{A} \psi_2 \, dx = \int (\hat{A} \psi_1^*) \psi_2^* \, dx \Rightarrow \langle \hat{A} \rangle = \langle \hat{A} \rangle^*$$

сред. зн. действительны

Задача на соб. зн. и соб. ф-ции оператора:

$\hat{A}\varphi = A\varphi$, $\hat{A}$ — дифф. опер.
A — соб. значения
φ — соб. ф-ции.

+ граничные условия

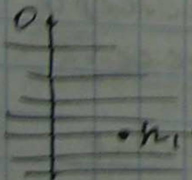
Свойство полноты набора соб. зн., соб. ф-ций.

φ_n; $\hat{A}\varphi_n = A_n \varphi_n \Rightarrow \psi = \sum_n c_n \varphi_n$

$$1 = \int |\psi(x)|^2 dx = \sum_n \sum_m c_n^* c_m \int \varphi_n^* \varphi_m \, dx$$

$\{\varphi_n\}$ — ОНС $\Rightarrow 1 = \sum_n |c_n|^2$

$|c_n|^2$ — вер-ть нахождения в соб. состоянии с n



Атом водорода

$n, \varphi_n \Rightarrow |c_n(t)|^2$ — вер-ть, что на n-м уровне.

Уравнение Шредингера

Соотношения Де Бройля: $\omega = \frac{\hbar}{2m} k^2$

Ур. Максвелла $\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \to \psi = C e^{ikx - i\omega t}$

$\omega^2 = k^2 c^2$

$\Rightarrow$ слева первая производная по времени

$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi$. Справа $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ — опер-р кинетич. энергии при движении вдоль оси x: $H = \frac{p_x^2}{2m} = \frac{(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})^2}{2m}$

$\Rightarrow \boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi}$ Справедл. для $\forall$ квантомех. сис-мы с гамильтонианом H

Для атома водорода

$\oplus \; \bar{e}, \; \vec{r}$ $\qquad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{|\vec{r}|}$

Стационарное ур-е Шредингера

H н/з от $t \Rightarrow$ стац.

$$H = H(\vec{r}, \vec{p}) \Rightarrow \psi = f(t)\varphi(\vec{r})$$

$$E = i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{\varphi(r)}\hat{H}\varphi(r)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}f. \quad f(t) = ce^{-\frac{iE}{\hbar}t}$$

$$\boxed{\hat{H}\varphi = E\varphi}$$

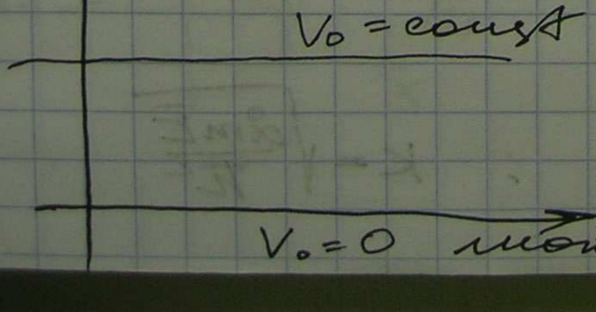
для атома водорода $\hat{H}\varphi_n = E_n\varphi_n$

Финит. и инфинит. движ. Лекция.

Дискретные и непрерывные энергетич. спектры.

~~Приближ.~~ Движ. частицы в непрер. яме. Эфф. туннелирования через барьер.

Движ. электрона в периодич. потенциале.



$V_0 = 0$ можно положить.

1. $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \cancel{U_0}^{\to 0}$

2. $H\psi = E\psi$ $\Rightarrow$ ур-е Шред в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = E\psi$$

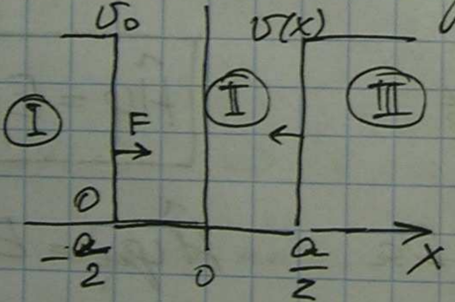
Волна де Бройля: $\psi_k = Ce^{ikx}$

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$p_k = \langle p \rangle = \int \psi_k^* \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi_c(x)\,dx = \hbar k$$

$$\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_k}{\partial k} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p_k}{m} = v_k$$

Яма конечной глубины.



$U_0 \longrightarrow \infty$

$F = -\frac{\partial U}{\partial x}$

$\Rightarrow$ граничные условия: (непр-ти за пределы ямы)

$$\psi\left(-\frac{a}{2}\right) = \psi\left(\frac{a}{2}\right) = 0$$

в обл. I, III: $\psi_I = \psi_{III} = 0$

II: $\psi_{II}(x) = C^{\pm ikx}$

$\psi_k^+ = C(e^{ikx} + e^{-ikx}) = A\cos kx$

$\psi_k^- = B\sin kx$

II: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} Ce^{ikx} = Ee^{ikx}C$; $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

$\psi_k^+(x) = A\cos kx$

$\hat{A}\xi = \lambda\xi$

$\hat{H}\psi = E\psi$

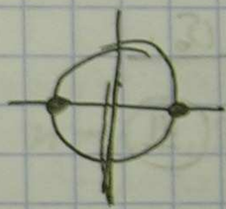
$\psi_+(-\frac{a}{2}) = \psi_+(\frac{a}{2}) = 0$

$\frac{k_n a}{2} = \frac{\pi}{2}n, \quad n = 1, 3, 5, \dots$

$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$

$\psi_-(x) = B\sin kx$

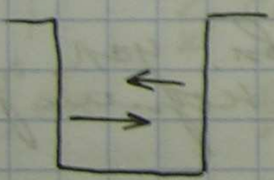
$\psi_-(-\frac{a}{2}) = \psi(\frac{a}{2}) = 0$



$\frac{k_n a}{2} = \frac{\pi}{2}n, \quad n = 2, 4, \dots$

$\psi^{(n)}(x) = B\sin k_n x; \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}, \quad n = 2, 4, 6, \dots$

$\psi_+^{(n)}(x) = A\cos k_n x, \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}, \quad n = 1, 3, 5, \dots$

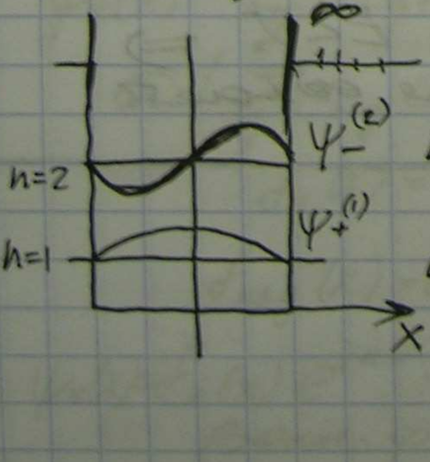


$\psi_{\cancel{+}}(\cancel{B}) = (e^{ikx} + e^{-ikx})A$

$\psi_k^{(+)}(x,t) = (e^{ikx} + e^{-ikx})e^{-\frac{iE_k}{\hbar}t} \Rightarrow$

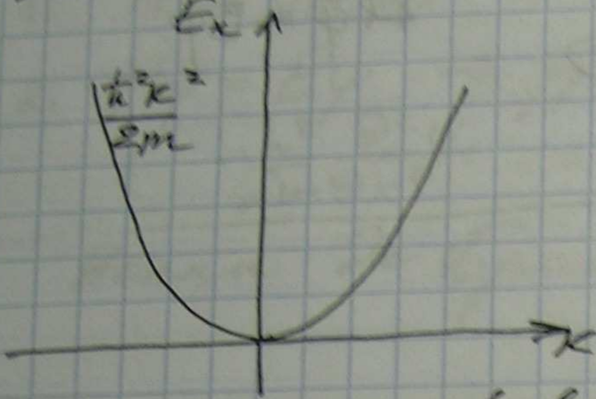
2 волны $\longrightarrow$ и $\longleftarrow$

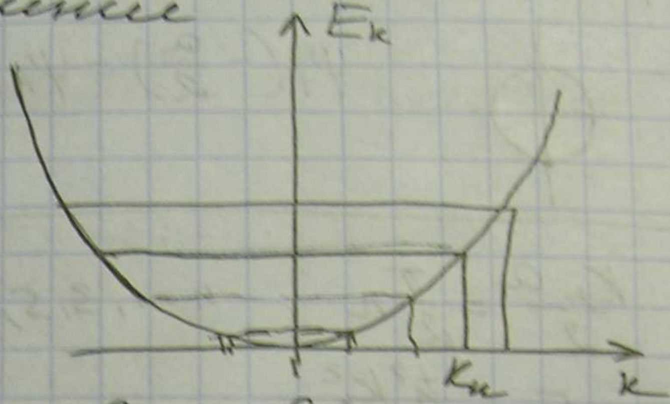
$\Rightarrow$ суперпозиция



$\left.\begin{array}{l} E_n \sim n^2 \\ \Delta E_n \sim n \end{array}\right]$ ΔE_n – расст. м. ур...

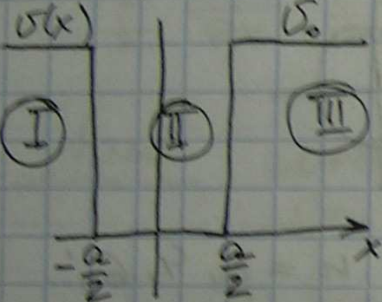
Инфинитное движение | Финитное движение





гр. усл. приводит к квантованию

непрер. спектр | дискретный спектр.

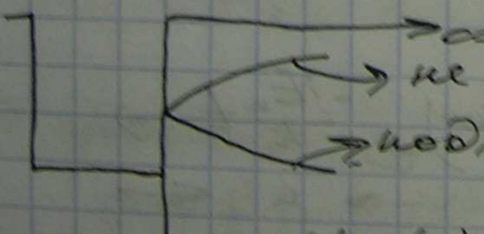


II: $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$

ур-е Шред. такое же.

III: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_{III} = -(U_0 - E)\psi_{III}$

$$\psi_{III}(x) \sim \exp\left(\pm\sqrt{\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}}\,x\right)$$



∞

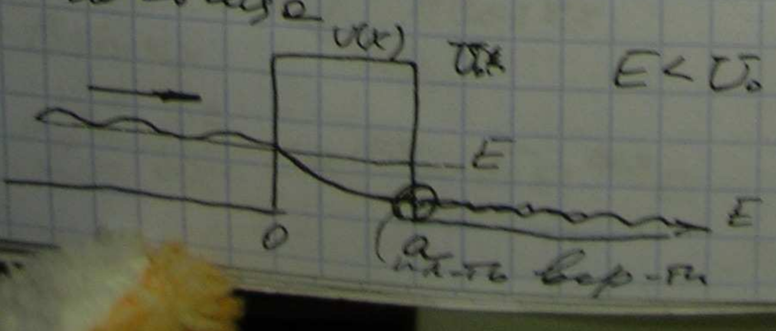
не подх., т.к. не удовл. усл. нормир.

подходит.

$$\psi_{III}(x) \sim \exp\left[-\sqrt{\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}}\right]$$

в кв. механике возможно $E < U_0$ ⇒ классически недоступная область

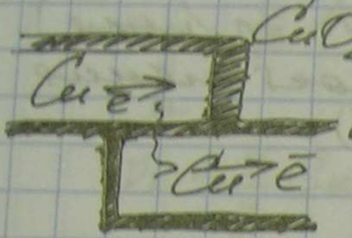
Легкая частица



$E < U_0$

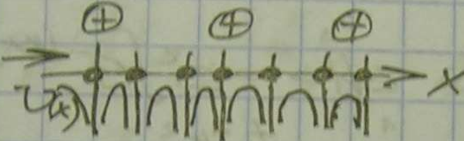
Вероятность прохождения через барьер.

$$|\psi(a)|^2 \sim \exp\left[-2\sqrt{\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}}\,a\right]$$



Движение в периодич. потенциале

Кристалл.



$U(x) = U(x+a)$

$U(x) = \sum_g U_g e^{igx}$ $\qquad g_n = \frac{2\pi}{a}n, \quad n = 1, 2, 3$ — вектора обратной решётки.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + U(x)\psi(x) = E\psi$$

$$\psi(x) = \sum_{k'} C_{k'} e^{ik'x}$$

$\Big| e^{-ikx}$

$$\sum_{k'} C_{k'} e^{ik'x}(E_{k'} - E) + \sum_{k'}\sum_g u_g C_{k'} e^{ikx+igx} = 0$$

$\int dx$

$$E_{k'} = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} \Rightarrow$$

$$C_k(E_k - E) + \sum_g u_g C_{k-g} = 0$$

$$\psi_k(x) = \sum_g C_{k-g} e^{i(k-g)x} \ominus \quad \text{— решение ур-я Шрёдингера}$$

$$\ominus \left(\sum_g C_{k-g} e^{-igx}\right)e^{ikx} = f_k(x)e^{ikx}$$

$f_k(x) = f_k(x+a)$ — период решётки a

$f_{k+g}(x) = f_k(x)$ — периодич.

$\psi_k(x) = f_k(x)e^{ikx}$: ф-я Блоха?

Волн. ф. ē в кристалле носит блоховский вид

05.03.08.

$$\psi_k = f_k(x) e^{ikx}$$

ē рассеивается (обусл. сопротивл. эл. поле) за счёт колебаний (смещ. отн. состояния равновесия)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

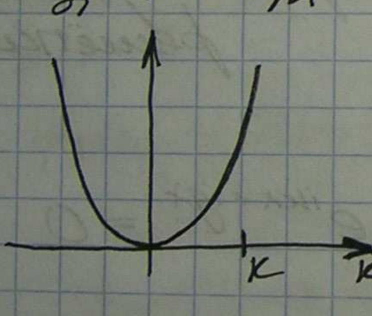
$$\int \psi_k^* \hat{H} \psi_k dx = ?$$

для своб. движения: $\langle \hat{H} \rangle = c^2 \int e^{-ikx} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-ikx} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

в кристалле: $\langle \hat{H} \rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$

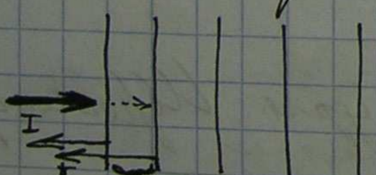
m^* меняется (эффективная масса ē)

в Si : $m^* = 0,1\, m$



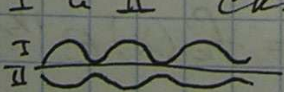
Неодн-ти рассеивают волны => дифрагирует на а-парам. решётки волна

Отраж. волны интерферируют



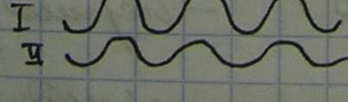
I и II складываются:

деструкт.



гасят

конструкт.

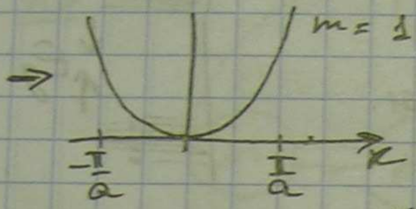


Условие конструкт. интерференции:

Разность хода: $\Delta = 2a$

Усл. констр. интерф.: $\Delta = m\lambda = m\frac{2\pi}{k} = 2a \Rightarrow$

$k_m = m\frac{\pi}{a}$, $m = \pm 1, \pm 2, ..$ 3



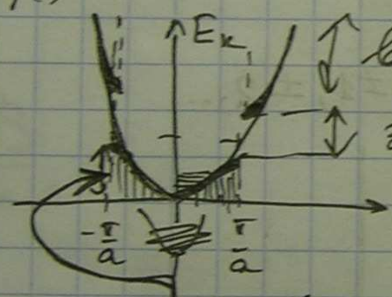
$\psi_k = \sum\limits_g C_{k-g} e^{+i(k-g)}$; $k = \pm\frac{\pi}{a}$

$e^{i\frac{\pi}{a}x}$ $e^{-i\frac{\pi}{a}x}$

$g = \frac{2\pi}{a}$

$\psi_{(\frac{\pi}{a})+}(x) = C(e^{i\frac{\pi}{a}x} + e^{-i\frac{\pi}{a}x}) = A\cos\frac{\pi}{a}x$

$\psi_{(\frac{\pi}{a})-}(x) = B\sin\frac{\pi}{a}x$, $B \in \mathbb{C}$

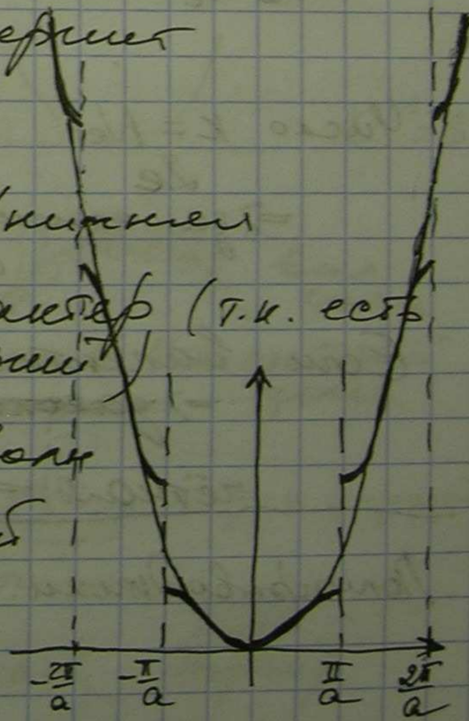


верхняя зона разреш. энергий

зона запрещ. энергий

зона разрешён. энергий / нижняя

$\Longrightarrow$ спектр носит зонный характер (т.к. есть зоны запрещ. энергий)

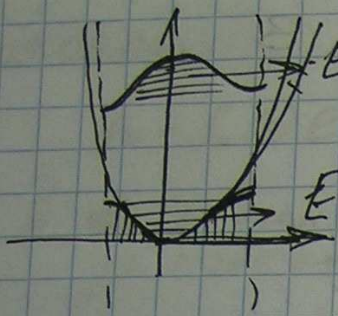


Пример. изучая движение волн в периодич. структуре появл-ся зонный спектр

$\psi_k(x) = \psi_{k\pm g}(x)$

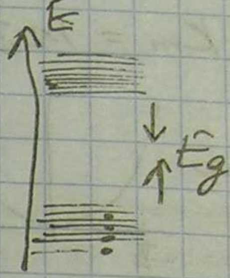
g – вектор обратн. решётки: $g = \frac{2\pi}{a}n$

$|\psi_k(x)|^2 = |\psi_{k\pm g}(x)|^2$



$E_{ск}$ — зона проводимости.

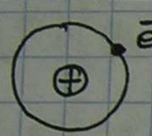
$E_{вк}$ — валентные зоны.



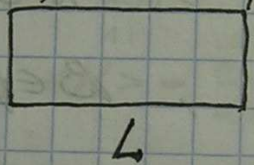
Твёрдые тела

металлы — п/пров-ки — диэлектрики

Na



$\psi(0) = \psi(L)$

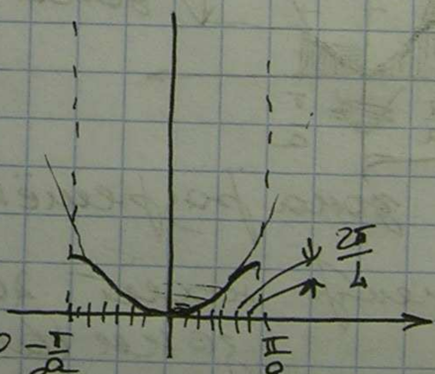


возьмём много Na
⇒ кристалл натрия

$N_a = N_{\bar{e}}$

$$k_n = \frac{2\pi}{L} n, \quad n = \pm 1, \pm 2, \ldots$$

Число $k = \dfrac{N_e}{2e}$
⇒ заполнена только половина.



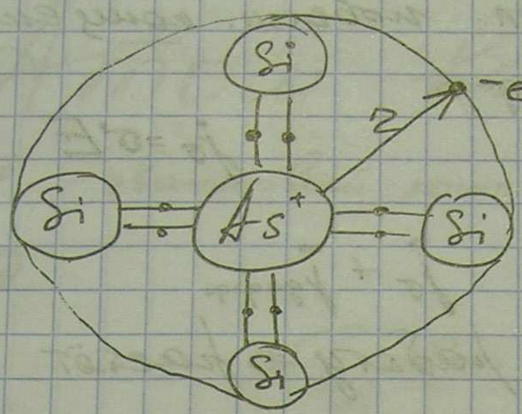
Если валентность нечётная
⇒ ~~заполнено~~ наполовину заполнено

чётная ⇒ заполнено полностью

Полупроводники.

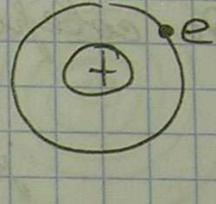
12.03

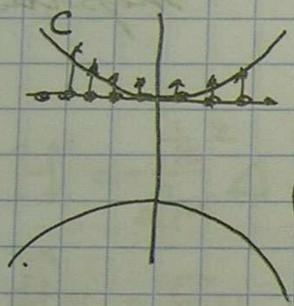
As



$r \approx 10^{-6}$ см

As 10^{21}



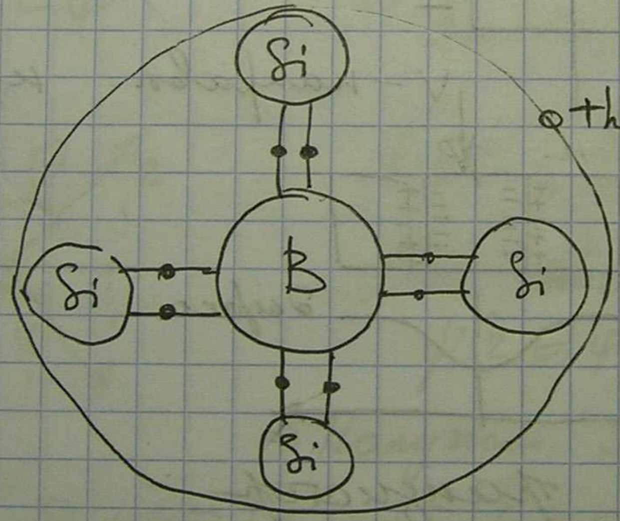


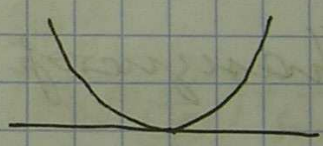
10^{-3} эВ

$10^{21} \frac{1}{см^3}$ $\bar{e}$

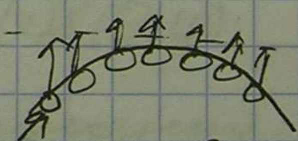
$kT \sim 25 \cdot 10^{-2}$ эВ

B
вал-3





10^{-3} эВ



вал зона

дырки в валентной зоне

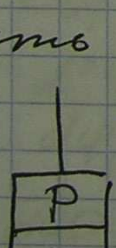
Сканируется пучок

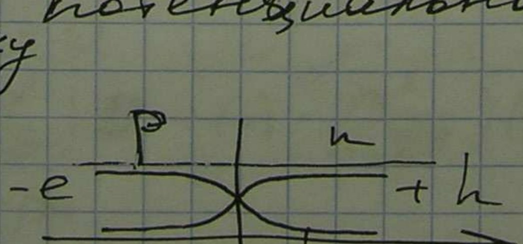
→ p-n переход

10^{-4} см - толщина

Суть работы p-n перехода: потенциальный барьер

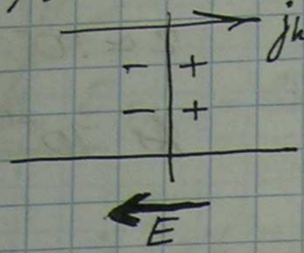
вид сверху





эти обл (p,n) — электро нейтральные.
p - дырки
n - $\bar{e}$

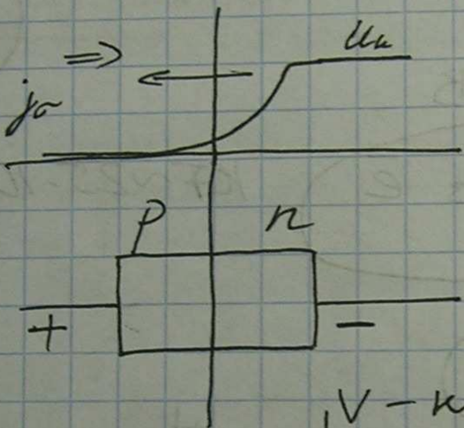
диффузия: из обл. повыш. концентрации



$j_\sigma = \sigma E$

$\vec{j}_\sigma + \vec{j}_{дифф}$

надо совершать работу ⇒ растёт потенц. энергия

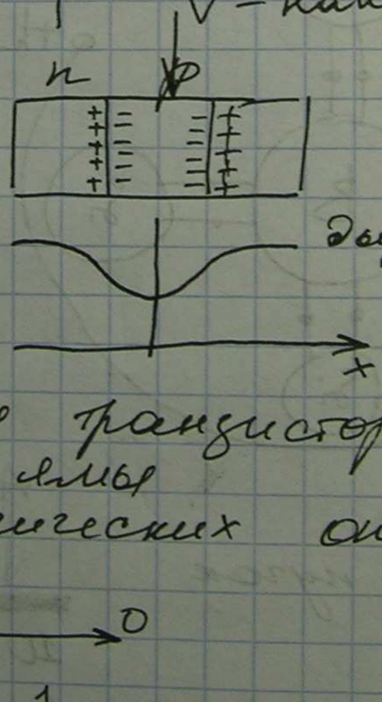


Классический

Квантовый

V − направл. напр.

Транзистор



V⊕ ⇒ открывается транзистор ⇒ "1"

V⊖ ⇒ углубление ямы ⇒ "0"

Это для логических операций.

$\xrightarrow{1} x \xrightarrow{} 0$

$\xrightarrow{0} x \xrightarrow{1}$

Атом водорода

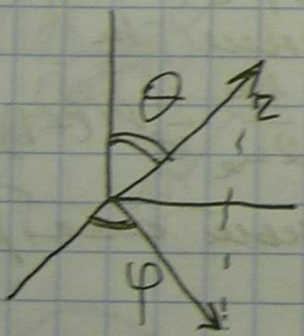
10^{-8} – квантовый компьютер

1926 год

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze^2}{r} \qquad U = -\frac{Ze^2}{r}$$

Центрально-симметричное поле

$$\hat{H}\psi = E\psi \qquad \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r\psi - \frac{\hbar^2}{2mr^2}\Delta_{\theta\varphi}\psi = (E-U(r))\psi$$



$$\Delta_r = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)$$

$$\Delta_{\theta\varphi} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y(\theta,\varphi)$$

$\Rightarrow$ Получим 3 уравнения:

$$\Delta_r R + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_{\text{эфф}}(r))R = 0$$

$$U_{\text{эфф}}(r) = U(r) - \lambda\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}$$

$$\Delta_{\theta\varphi}Y + \lambda Y = 0 \quad ; \quad Y(\theta,\varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi)$$

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + m^2\Phi(\varphi) = 0$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\right)\Theta + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta$$

$$\Phi_m(\varphi) = Ce^{i\varphi m}$$

$$\Phi(0) = \Phi(2\pi)$$

$m = 0, \pm 1, \pm 2$ — квантовое число
магнитное квантовое число.

Замена переменного: $\cos\theta = \xi$

$$\Rightarrow (1-\xi^2)\Theta''(\xi) - 2\xi\Theta' + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-\xi^2}\right)\Theta = 0$$

$$\lambda = l(l+1), \quad l = 0, 1, \ldots$$

l - орбитальное квантовое число

$$\Theta_{l,m}(\theta) = c\, P_l^{|m|}(\cos\theta)$$

$\Rightarrow$ Шаровые функции

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = C_{lm}\, P_l^{|m|}(\cos\theta)\, e^{im\varphi}$$ — полиномы Лежандра

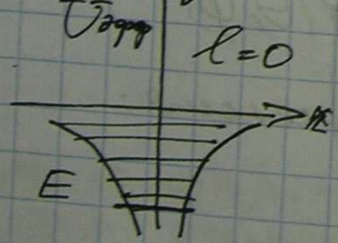
$P_l^{|m|}(\xi) = 0$; $|m| \leq l$, $l = 0, 1, 2, \ldots$

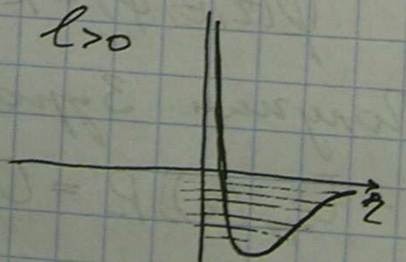
$m = -l, \ldots 0, l.$

$\Rightarrow$ $2l+1$ значение m

Замена: $R(r) = \frac{f(r)}{r}$ $\Rightarrow$ $U_{эфф} = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{r^2}l(l+1)$

$l = 0 \Rightarrow$ кулонова яма $\Rightarrow$ дискретный спектр





$\Rightarrow$ атом водорода имеет дискр. энергетический спектр

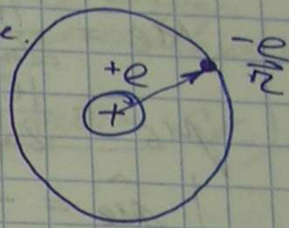
$$E_n = -\frac{Z^2 e^4 m_e}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$ — Ф-ла Бора

n — главное квантовое число

$$\Rightarrow \psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) \equiv R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\theta, \varphi);$$

$$\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}$$

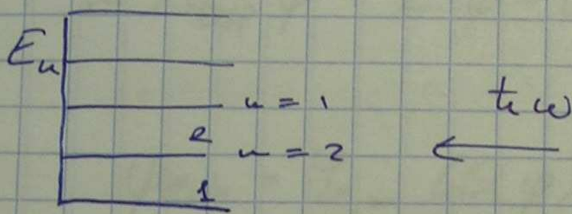
$\vec{d} = e\vec{r}$ — дипольный момент.



$H = -\vec{d}\cdot\vec{E}$

$\vec{\mu}$ — магн. момент.

$H = -\vec{\mu}\vec{H}$



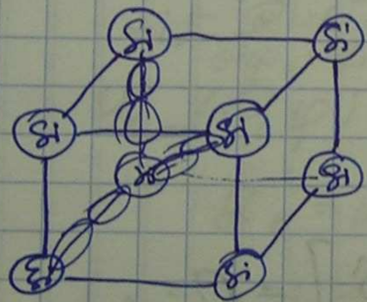
$\vec{H} = -\vec{d}\vec{E}$

$\psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi)$,

$n = 1, 2, 3, \ldots$

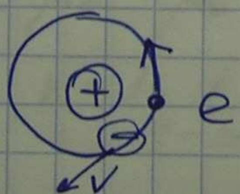
$l = 0, 1, \ldots n-1$

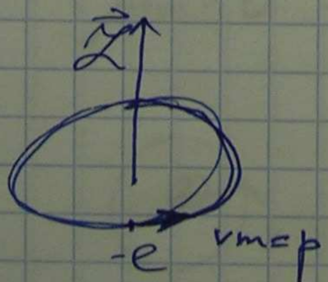
$m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \pm l$



Энергия магн. поля (магн. момент)

$H = -\vec{\mu}\vec{H}$





$\vec{L} = [\vec{r} \times \vec{p}]$

$L = pr = mvr$

Ток: $J = \frac{e}{T}$; $T = \frac{2\pi r}{v}$

$J = \frac{ev}{2\pi r}$

$\mu = \frac{J\pi r^2}{c}$, $H = -\vec{\mu}\vec{H}$

$\mu_e = \frac{|e|}{2mc} L$

$\mu_Б = \frac{|e|\hbar}{2mc}$

$\boxed{\vec{\mu}_e = -\frac{\mu_Б}{\hbar} L}$ (мех. момент.

магн. момент.

$\hat{\vec{L}} = [\vec{r} \times \hat{\vec{p}}]$

$\hat{L}_x = y\hat{p}_z - \hat{p}_y z$

$\hat{L}_y = z\hat{p}_x - \hat{p}_z x$

$\hat{L}_z = x\hat{P}_y - \hat{P}_x y$

$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$

Оператор $\hat{p}$ коммут. с $\hat{p}^2$

Коммутатор: $\left[\hat{p}\frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{\hat{p}^2}{2m}\hat{p}\right] = 0$

(оператор таков)

$[x\hat{P}_x - \hat{P}_x x] \neq 0 = i\hbar$

$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

краткая запись коммутатора

$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$

$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x$

$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$

$[L^2, L_z]_- = 0$ (их можно одновременно вычислить)

Задача на соб. зн. и соб.-ф-ции опер. квадрата полного момента

$\hat{L}^2\psi = L\psi$ (переходим к сферич. СК)

$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\theta,\varphi}$

$\hbar^2 \Delta_{\theta\varphi}\psi + L^2\psi = 0$ (как в атоме водорода)

$\Delta_{\theta\varphi} Y_{l,m}(\theta,\varphi) + l(l+1) Y_{lm}(\theta,\varphi) = 0$

$\psi_{l,m} = Y_{l,m}(\theta,\varphi)$

$L^2 = \hbar\, l(l+1)$

$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi}$

$-i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi} Y_{l,m}(\theta,\varphi) = m\hbar\, Y_{l,m}(\theta,\varphi)$

$Y_{l,m}(\theta,\varphi) = \Theta_{m,l}\, e^{im\varphi}$

$L_z = m\hbar$

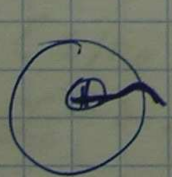
$$\begin{cases} \mu_l^2 = \mu_Б^2\, l(l+1) \\ \mu_z = \mu_Б \cdot m \end{cases}$$

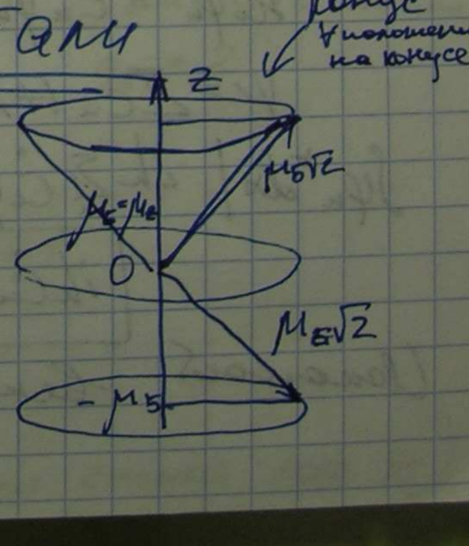
$n=1$, $l=0$, $m=0$ — самое низкое состояние водорода
s-состояние.

$\mu_l = 0$!!!

Spin
Спин.

Орбитали





$n=2$, $l=1$, $m_l = 0, \pm 1$.
p-состояние.

$\mu_l = \mu_Б\sqrt{2}$, $\mu_z = 0, \pm\mu_Б$

Матричная квантовая механика

$B\varphi_n = \beta_n \varphi_n$

Текущий опер. $\hat{A}$

$\hat{A}\psi = A\psi \quad ; \quad \psi = \sum_m C_m \varphi_m(x)$

$\sum_m C_m \hat{A}\varphi_m = A\sum_m C_m \varphi_m$ — ОН функции

$\int \psi_k^* dx$

$\sum_m C_m A_{km} = A\sum_m C_m \delta_{mk}$

$\sum_m (A_{km} - A\delta_{mk}) = 0$

A_{km} — матр. элемент ~~...~~ операт. $\hat{A}$

$A_{km} = \int \varphi_k^* \hat{A}\varphi_m dx$

$\det|A_k - \delta_{mk} A| = 0 \Rightarrow$ соб. зн. A

$\langle\psi\rangle = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_m \end{pmatrix}$ соб. ~~...~~ A.

$\sum_m |C_m|^2 = 1$

Нестац. ур-е. Шредингера

$i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \quad ; \quad H = H_0 + V$ — возмущающее поле

$H_0 \varphi_n = E_n \varphi_n$

$\psi = \sum C_n(t)\varphi_n(r)$

$\int \varphi_n^* dx \Big| \; i\hbar \sum_n \dot{C}_n \varphi_n(x) = \sum_n C_n \hat{H}\varphi_n$

$$\boxed{i\hbar \dot{C}_m = \sum_n H_{mn} C_n}$$

Искомый вектор сост.-е! Ур.-е Шредингера

$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \\ \dots \\ C_m(t) \end{pmatrix}$

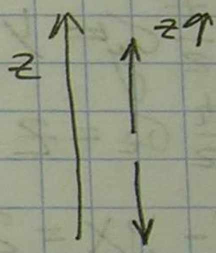
$$H_{mn} = (H_0)_{mn} + V_{mn} = E_n \delta_{mn} + V_{mn}$$

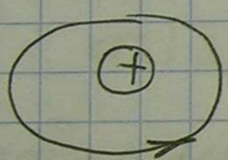
соб значения
(уровни энер. ē в атоме H)

Spin и ē
магн. моменты

$$H^{(z)} = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} = -\mu_z B(z)$$

$$F_z = -\frac{\partial H}{\partial z} = -\mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$$





орбит	спин
$\vec{L}$	$\vec{S}$
L_z	S_z
L^2	S^2
$L = \hbar\sqrt{l(l+1)}$	$S = \hbar\sqrt{s(s+1)}$
$l = 0, 1, \dots n-1$	$s = 1/2$
$\vec{\mu}_l = \frac{\mu_B}{\hbar}\vec{L}$	$\vec{\mu}_s = g_s \frac{\mu_B}{\hbar}\vec{S}$
$-l \le m_l \le +l$	$-s \le m_s \le s$
$L_z = m_l \hbar$	$S_z = m_s \hbar$

магн. мом

$g_s = 2$

$$\Delta m_l = \Delta m_s = \pm 1$$

$$m_s = +\frac{1}{2},$$
$$m_s = -\frac{1}{2}$$

m_s – квантовое число (пр-ция спина на z)

$$L_x L_y - L_y L_x = i\hbar L_z$$

$$\Rightarrow S_x S_y - S_y S_x = i\hbar S_z$$

$$S_y S_z - S_z S_y = i\hbar S_x$$

$$S_z S_x - S_x S_z = i\hbar S_y$$

$S_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x = \hat{X}$ (обозн. квантовой инф-ки)

$S_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y = Y$

$S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z = Z$

$$\Rightarrow XY - YX = 2iZ$$

$$YZ - ZY = 2iX$$

$$ZX - XZ = 2iY$$

Матр.....

$$\sigma_z = Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_x = X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = NOT$$

$$\sigma_y = Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$

Магнитный момент:

$$\hat{\mu}_x = -\mu_Б \sigma_x$$

$$\mu_y = -\mu_Б \sigma_y$$

$$\mu_z = -\mu_Б \sigma_z$$

Задача на соб. зн. и соб. вектора

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ -c_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

$\lambda = +1$, $c_1 = 1$, $c_2 = 0$

$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |0\rangle$ – обозначение такого вект.-столбца

$\langle 0| = (1^* \; 0^*) = (1 \; 0)$

$\langle 0|0\rangle = Sp \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = 1$

$\lambda = -1$, $c_2 = 1$, $c_1 = 0$

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

$\langle 0|1\rangle = \langle 1|0\rangle = 0$

Выдающаяся формула:

$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$

a, b – коэфф. разложения

произв. состояние кубита (квант. бита)

Q-bit – кубит

2 – базисных состояния

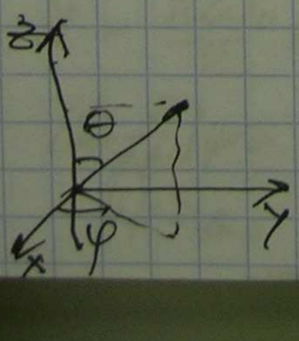
$|a|^2 + |b|^2 = 1 \Leftarrow \langle\psi|\psi\rangle = 1$

$\Lambda_z = a^*a - b^*b = |a|^2 - |b|^2$

$\Lambda_x = b^*a + a^*b$

$\Lambda_y = i(a^*b - b^*a)$

$\Lambda_z^2 + \Lambda_x^2 + \Lambda_y^2 = 1$

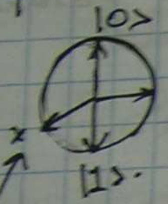


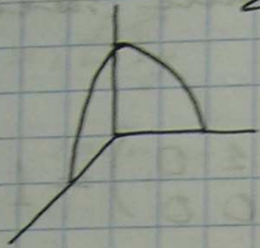
$\Lambda_x = \sin\theta\cos\varphi$

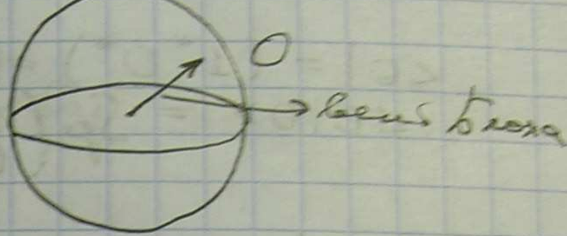
$\Lambda_y = \sin\theta\sin\varphi$

$|\psi\rangle = |a| e^{i\varphi_a}|0\rangle + |b| e^{i\varphi_b}|1\rangle = e^{i\varphi_a}\left(\cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + \right.$
$\left. + e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle\right)$ $\qquad \varphi = \varphi_b - \varphi_a$

$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle$







$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ — суперпозиционное состояние.

$\Rightarrow 2^n$ чисел

Теорема $\forall$ кв. выч. (опер.) м. б. проведено с помощью 1-кубитовых и 2-кубитовых операций

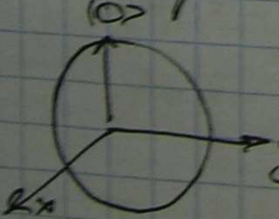
$R_x(\theta) = \cos\frac{\theta}{2}\hat{I} - i\sin\frac{\theta}{2}\hat{x} = e^{-i\frac{\theta}{2}\hat{x}}$ → операторы поворота

$$\boxed{\begin{aligned}\hat{x}|0\rangle &= |1\rangle \\ \hat{x}|1\rangle &= |0\rangle\end{aligned}}$$

$R_y(\theta) = e^{-\frac{i\theta}{2}\hat{y}}$

$R_z(\theta) = e^{-\frac{i\theta}{2}\hat{z}}$

операторы поворота.



$\hat{R}_x\left(\frac{\pi}{2}\right)|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{I} - i\hat{x})|0\rangle =$
$= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - i|1\rangle)$

Опер-р. поворот.

Вращение по правилу Буравчика — 09.8

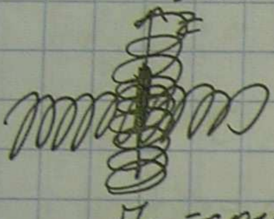
$e^{-i\frac{\theta}{2}\hat{x}} = \cos\frac{\theta}{2}\hat{I} - i\sin\frac{\theta}{2}\hat{x}$ — разл. эксп. $(\hat{x})^{2n} = 1$, $(\hat{x})^{2n+1} = \hat{x}$, $\hat{x} = NOT$

Опер: $\hat{z}$: $e^{-i\frac{\theta}{2}\hat{z}}$ аналогично с $\hat{x}$

$\hat{x}\hat{z} = -i\hat{y}$

Как реализ-ся опер-р поворота.

поворот спина осущ-ся магн. полем.



B_0

$\gamma = \gamma_0 \cos\omega t$ — анипл. $\omega \sim 10^8 \frac{1}{сек}$

— так проводились первые эксперим...

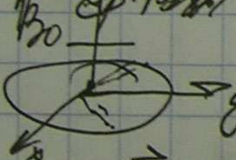
$\gamma_0 = const$ — для удобства

поле: $\vec{B}_1(t) = 2B_{10}\cos\omega t\,\hat{e}_x$ — орт

Надо записать ур-е Шредингера.

"приближ-е вращающихся волн"

$2B_{10}\cos\omega t\,\hat{e}_x = B_{10}(\cos\omega t\,\hat{e}_x + \sin\omega t\,\hat{e}_y) + B_{10}(\cos\omega t\,\hat{e}_x - \sin\omega t\,\hat{e}_y)$ — формально



вектор спина прецессирует вокруг ко...
резонирует в ... и

$\vec{B}_1(t) \approx B_1(\cos\omega t\,\hat{e}_x + \sin\omega t\,\hat{e}_y)$

гамильтониан: $H = -\vec{\mu}_s\vec{B} =$

$\mu_s = \frac{2\mu_Б}{\hbar}\hat{\vec{s}}$ $\mu_Б$ — const магн. Бора

$= B_0\mu_Б\hat{z} + B_{10}\mu_Б(\hat{x}\cos\omega t + \hat{y}\sin\omega t)$; $2B_0\mu_Б = \hbar\omega_0$

ω_0 — частота прецессии

$2B_{10}\mu_Б = \hbar\Omega$

$\Rightarrow$ канонич. ф. гамильтониана имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega_0}{2}\hat{z} + \frac{\hbar\Omega}{2}(\hat{x}\cos\omega t + \hat{y}\sin\omega t) = H_0(t)$$

$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$ полное ур-е Шредин.

$|\psi\rangle_{t=0} \to |\psi\rangle_t$ базовая опер. квант. вычислений

— кубит-опер.

решение: вводим новое сос-ие
изменим на φ

Новое сост: $|\psi(t)\rangle = e^{\frac{i\omega t}{2}\hat{z}}|\varphi(t)\rangle$ → старое сост.

$$|\varphi(t)\rangle = e^{-\frac{i\omega t}{2}}|\psi(t)\rangle$$

$$\frac{\hbar\omega}{2}\hat{z}e^{-i\frac{\omega t}{2}\hat{z}}|\psi\rangle + e^{-\frac{i\omega t}{2}}i\hbar\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} = (\hat{H}_0+\hat{V}_1)e^{-\frac{i\omega t}{2}\hat{z}}$$

$$i\hbar\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} = \hbar\left(\frac{\omega_0-\omega}{2}\right)\hat{z}|\psi\rangle$$

$$e^{\frac{i\omega t}{2}}V_1 e^{-\frac{i\omega t}{2}\hat{z}}|\psi\rangle$$

$$\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} = -i\frac{(\omega_0-\omega)}{2}\hat{z}|\psi\rangle - i\frac{\Omega}{2}e^{i\frac{\omega t}{2}\hat{z}}(\hat{x}\cos\omega t + \hat{y}\sin\omega t)\cdot e^{-\frac{\omega t}{2}\hat{z}}|\psi\rangle$$

$$e^{\frac{i\omega t}{2}\hat{z}}\hat{y}e^{-i\frac{\omega t}{2}\hat{z}} = \hat{x}\cos\omega t + \hat{y}\sin\omega t$$

$$e^{\frac{i\omega t}{2}\hat{z}}\hat{x}e^{-\frac{i\omega t}{2}\hat{z}} = \hat{x}\cos\omega t - \hat{y}\sin\omega t$$

(по ф. Эйлера)

$$e^{\frac{i\omega t}{2}\hat z}\,\hat y\,e^{-\frac{i\omega t}{2}\hat z} = \hat x\cos\omega t + \hat y\sin\omega t$$

$$e^{\frac{i\omega t}{2}\hat z}\,\hat x\,e^{-\frac{i\omega t}{2}\hat z} = \hat x\cos\omega t - \hat y\sin\omega t$$

$$\hat x\hat z = -i\hat y$$

$$\hat y\hat z = i\hat x$$

$$\Rightarrow \frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} = -i\left(\frac{\omega_0-\omega}{2}\right)\hat z|\psi\rangle - \frac{i\Omega}{2}\hat x|\psi\rangle$$ ур-е Шр.

$\Rightarrow$ операторное решение

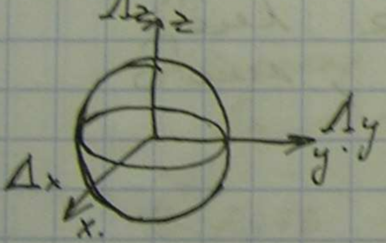
$$|\psi(t)\rangle = |\psi\rangle_t = e^{-i\left[\frac{\omega_0-\omega}{2}\hat z + \frac{\Omega}{2}\hat x\right]t}|\psi(0)\rangle$$

1) $B_1=0$, $\omega=0$, $\Omega=0$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{\omega_0 t}{2}\hat z}|\psi(0)\rangle$$

вектор спина вращ. вокр. поля, прецессирует.

Задание $|\psi(0)\rangle = \frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt2}$



$$\langle S_z\rangle_{t=0} = \left(\frac{\langle 0|+\langle 1|}{\sqrt2}\left(\frac{\hbar}{2}\hat z\right)\frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt2}\right) = 0!$$

$$\langle S_x\rangle = \frac{\hbar}{2}\langle\hat x\rangle = \frac{\hbar}{2}$$

$$\langle S_y\rangle_{t=0} = 0$$

$$|\psi\rangle_t = \frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt2}\cos\frac{\omega_0 t}{2} - i\frac{|0\rangle-|1\rangle}{\sqrt2}\sin\frac{\omega_0 t}{2}$$

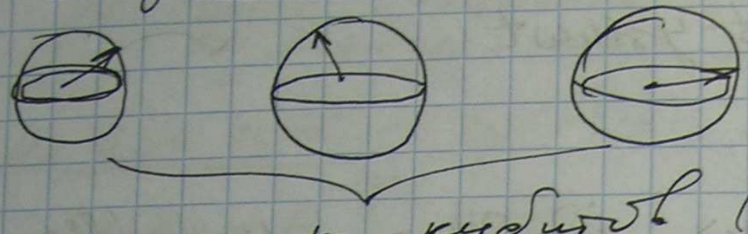
$$\langle\hat x(t)\rangle = \cos^2\frac{\omega_0 t}{2} - \sin^2\frac{\omega_0 t}{2} = \cos\omega_0 t$$

$$\langle\hat y(t)\rangle = \sin\omega_0 t$$

2) $\omega=\omega_0$

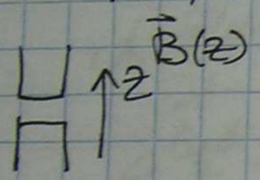
$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\left[\frac{\omega_0-\omega}{2}\hat z + \frac{\Omega}{2}\hat x\right]t}|\psi(0)\rangle = e^{-\frac{i\Omega}{2}t}|\psi(0)\rangle$$

Постулаты измерения:



n кубитов (спинов)

измер-ный базис.
$|0\rangle, |1\rangle$

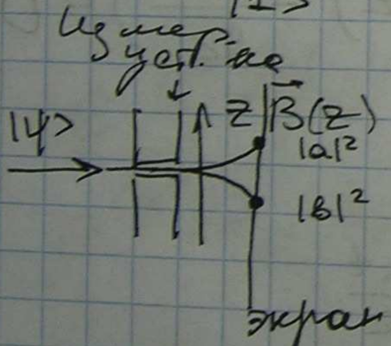


$$\mathcal{H} = \vec{\mu}_s \vec{B} = \mu_Б B \hat{z}$$

$$\hat{z}|0\rangle = |0\rangle \quad , \quad \hat{z}|1\rangle = -|1\rangle$$

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$$

(1) В рез-те измер. (состояния $|\psi\rangle$) получ. либо состояния либо
$|0\rangle$ с вер-ю $|a|^2$, либо
$|1\rangle$ с вер-ю $|b|^2$



$, \quad |a|^2 + |b|^2 = 1$

Если $\psi = \sum_n c_n \varphi_n$, $|c_n|^2 \to \varphi_n$
коллапс волн. ф-ции к одному собств. сост-ю

(2) Если в рез-те измерения вы получили $|0\rangle \Rightarrow$ кубит остаётся в этом состоянии $|0\rangle$
Аналогично с $|1\rangle$

16.04.

$\hat{z}\hat{z}|0\rangle = 1|0\rangle$

$\hat{z}|1\rangle = -1|1\rangle$

$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$

$|\psi\rangle \to |0\rangle$, $|a|^2$

$|\psi\rangle \to |1\rangle$, $|b|^2$

постулат измерен. фон Неймана

3. на с. зн. со. ф. опер-ра $\hat{A}$

$\hat{A}\varphi_n = A_n\varphi_n$; $\psi = \sum_n c_n\varphi_n$

$\int|\psi|^2dx = \sum_n |c_n|^2 = 1$

измен. ψ

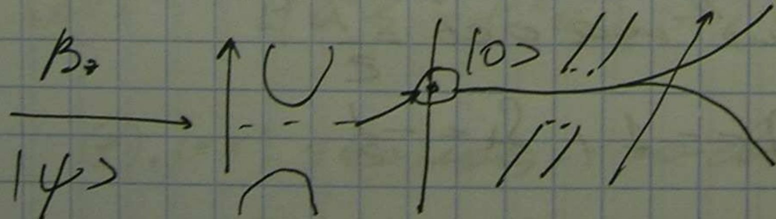
коллапс. $\psi \to \varphi_n$

A_n – выпадение A_n абс. случайно.

вер-ть выпадения – $|c_n|^2$

Классический эксперимент. (интуиция не срабатывает никак)

2 магнита:



← случайным образом

$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$

классич. нет подсказывает: он не отклоняется

=> энергии

=> м. пройти 2/3 поля, не отклон.

а вот что происходит ——

Объяснение: оператор измерения в приборе

$H \simeq -B_x(t)\hat{x}$

Надо найти базис по к-му надо разложить.

базис: набор 2-х с.в. опер. $\hat{x}$

$$\hat{x}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad ; \quad \begin{pmatrix} c_2 \\ c_1 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \lambda = 1, \quad c_1 = c_2$$
$$\lambda = -1, \quad c_1 = -c_2$$

$$\lambda = 1 \quad |\psi_+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |0\rangle + |1\rangle$$

$$\lambda = -1 \quad |\psi_-\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |0\rangle - |1\rangle$$

$\Rightarrow$ суперпозиция. $\langle\psi_\pm|\psi_\pm\rangle = 1$

$$\left.\begin{aligned} |\psi_+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \\ |\psi_-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \end{aligned}\right\} \text{изм. базис}$$

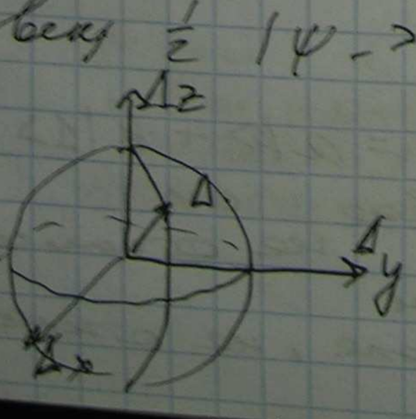
ψ_0 по базису.

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}\right) + \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_+\rangle + |\psi_-\rangle)$$

с вер. $\frac{1}{2}$ $|\psi_+\rangle$ с. зн. $\lambda = 1$, $S_x = \frac{1}{2}$

проекция на ось $= \frac{1}{2}$

вер. $\frac{1}{2}$ $|\psi_-\rangle$, $\lambda = -1$, $S_x = -\frac{1}{2}$

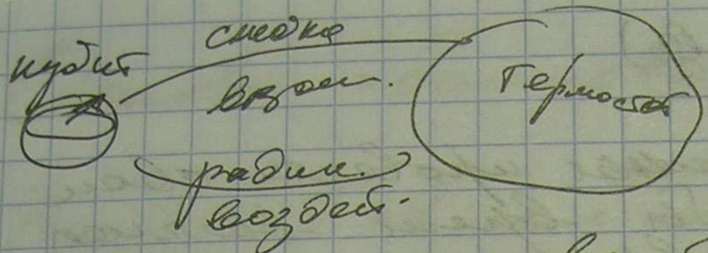


$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$$

$$\Delta_z = |a|^2 - |b|^2$$

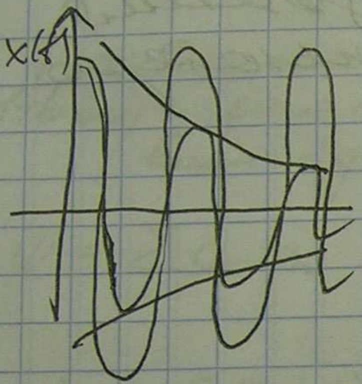
$$\Delta_x = (a^* b - a b^*)$$

$$\Delta_x^2 + \Delta_y^2 + \Delta_z^2 = 1$$

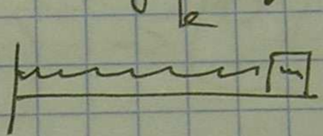


появл. трения

$\ddot{x} + \omega_0^2 x = 0$ $\qquad$ $\ddot{x} + 2\gamma\dot{x} + \omega^2 x = 0$



$\frac{1}{\gamma}$ – время



$m\ddot{x} = kx$

$\ddot{x} + \frac{k}{m}x = 0$

идеализ-я: нет трения.

Тоже и в кв. механике: вводим взаим. с термостатом, уходим от идеализации => надо усреднять.

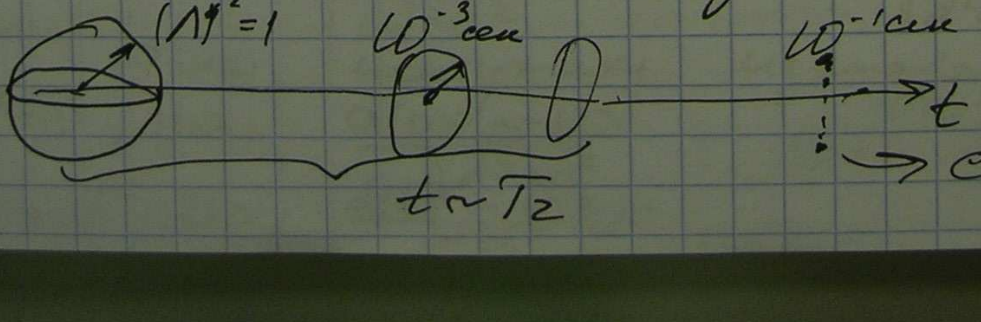
$$(*) \quad \underbrace{(\overline{|a|^2 - |b|^2})_t}_{\text{усреднение}} = (|a|^2 - |b|^2)\Big|_{t=0} e^{-\frac{t}{T_1}}$$

$$(\overline{a^*b} + \overline{b^*a})_t = (\overline{a^*b} + \overline{b^*a})_{t=0} e^{-\frac{t}{T_2}}$$

$$(**) \quad i(\overline{a^*b - b^*a})_t = i(\overline{a^*b} - \overline{b^*a})_{t=0} e^{-\frac{t}{T_2}}$$

(*), (**) эволюц-т по-своему

$T_1 >> T_2$ для мазера



→ схлопывание

→ T_1

$a^* b^* = |a||b| e^{i(\varphi_a - \varphi_b)}$

квант. комп. должны провести свои вычисления, чтобы время вычисл было меньше времени потери когерентности

— основная проблема создания квантового компьютера

Основы квантовых вычислений

Регистр в кв. компьютере — n кубит

м.б. $n = 1$

$\underbrace{\quad\quad\quad}_{n}$

Регистр данных — большой

Чтобы описать сис-му надо задать (волн. ф-я $\longrightarrow$) вектор состояний

$$\psi = \sum c_n \varphi_n \quad \rightarrow \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$|\psi\rangle = a\underbrace{|0\rangle + b|1\rangle}_{\text{баз. вект.}} \Rightarrow \text{надо опр-ть } a, b \Rightarrow \text{получим} \Rightarrow \psi$$

$|0\rangle \otimes |0\rangle = |00\rangle$ — первое баз. сост.-е сис-мы из 2-кубитов

$|01\rangle$

$|10\rangle$

$|11\rangle$

$2^2 = 4 \Longrightarrow$ для n-кубитов — 2^n

$\Rightarrow$ базисных состояние

$\Rightarrow$ континуум суперпозиц. состояний

$$|\psi\rangle = a|00\rangle + b|11\rangle + c|01\rangle + d|10\rangle$$

$$|a|^2 + |b|^2 + |c|^2 + |d|^2 = 1$$

Пусть сообщение закодировано

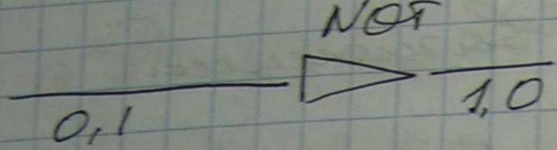
$$|\psi\rangle = |0\rangle \underset{\sqrt{a^2+c^2}}{\alpha} + |1\rangle \beta, \quad \underset{\sqrt{b^2+d^2}}{|\alpha|^2} + |\beta|^2 = 1$$

$$\psi = |0\rangle \frac{(a|0\rangle + c|1\rangle)}{\sqrt{a^2+c^2}} + |1\rangle \frac{(d|0\rangle + b|1\rangle)}{\sqrt{d^2+b^2}}$$

$\Rightarrow$ по постулату измерения $\Rightarrow$

$a^2 + c^2$, $|0\rangle$, $\dfrac{a|00\rangle + c|01\rangle}{\sqrt{a^2+c^2}}$; $\psi = \dfrac{a|00\rangle + c|01\rangle}{\sqrt{a^2+c^2}}$

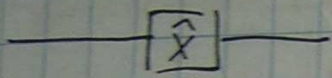
$b^2 + d^2$, $|1\rangle$, $\dfrac{d|10\rangle + b|11\rangle}{\sqrt{d^2+b^2}}$

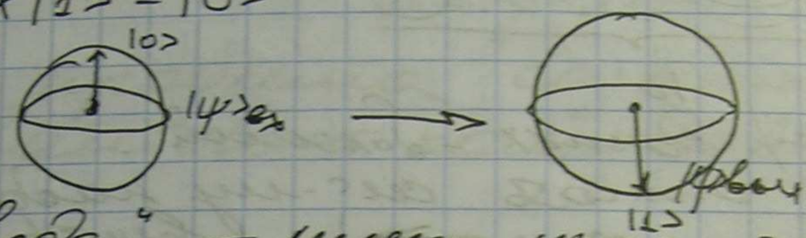


$\hat{x} = NOT = \begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$

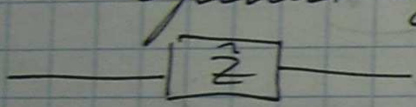
$\hat{x} = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|$

$\hat{x}|0\rangle = |1\rangle, \quad \hat{x}|1\rangle = |0\rangle$





"Квант. провода" — линии, указ-е послед-ть кв. операций, время измер-ся слева направо



$\hat{z} = \begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix} = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|$

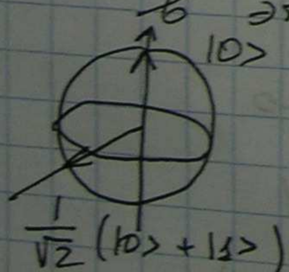
$\hat{z}\left(\frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt{2}}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle - |1\rangle\right)$

Оператор Адамара $\equiv H$: $\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\end{pmatrix} =$

$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left(|0\rangle + |1\rangle\right)\langle 0| + \left(|0\rangle - |1\rangle\right)\langle 1|\right)$

$H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + |1\rangle\right)$

Когда комп. стартует, все кубиты переводятся оператором Адамара в это сост. -е.

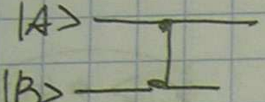


Обратно: $H\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + |1\rangle\right) = 0$

$H|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle - |1\rangle\right)$

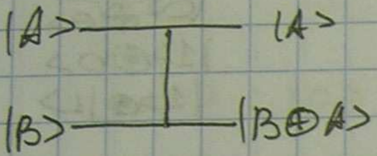
Мн-во однокубитовых операторов — континуум.

Теорема: для $\forall$ кв. алгоритма достаточно полного набора однокубит. операций и одного 2-кубит. оператора (для контроль CNOT) с помощью кот. можно реализовать $\forall$ состояние кубита



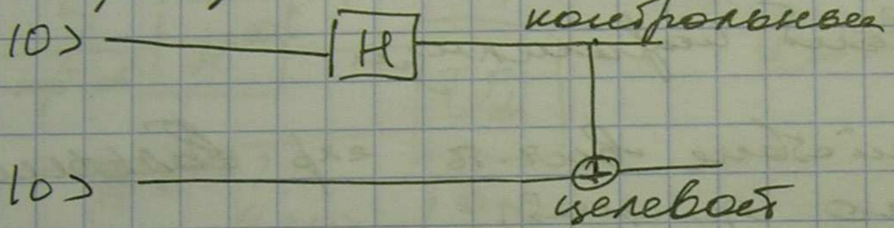
$$CNOT = |1\rangle\langle 1| \otimes NOT + |0\rangle\langle 0| \otimes \hat{I}$$

$$\hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|$$



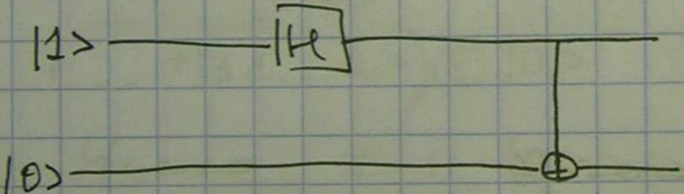
$$|0\rangle \oplus |A\rangle = |A\rangle$$
$$|1\rangle \oplus |A\rangle = |1-A\rangle$$

Перепут. сост-е кубита



$$\frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}$$

ЭПР



$$\frac{|00\rangle - |11\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$\left.\begin{matrix} |0\rangle \\ |1\rangle \end{matrix}\right\} \rightarrow \frac{|01\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}}; \quad \left\{\begin{matrix} |1\rangle \\ |1\rangle \end{matrix}\right\} \rightarrow \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}}$$

Проблема измер-я квант. механики.

Весь выигрыш кв. компьютеров — за счёт суперпозиц. состояний, в основном перепутанных

Плотное кодирование

1 - кубит передаёт 2 классических бита информации

0	00
1	01
2	10
3	11

1QB $\nwarrow$ $\boxed{A}$ $\boxed{B}$ $\nearrow$ 2QB

$$\underbrace{I, X, Z, XZ}_{A}\ \underbrace{\qquad\qquad}_{B}$$

I,	$\|00\rangle + \|11\rangle$	$\|00\rangle + \|10\rangle = (\|0\rangle + \|1\rangle)\cdot\|0\rangle$	$\|0\rangle \otimes \|0\rangle$
$\hat{X}$,	$\|10\rangle + \|01\rangle$	$\|11\rangle + \|01\rangle = (\|0\rangle + \|1\rangle)\cdot\|1\rangle$	$\|0\rangle \otimes \|0\rangle$
$\hat{Z}$	$\|00\rangle - \|11\rangle$	$\|00\rangle - \|10\rangle = \|0\rangle - \|00\rangle$	$\|1\rangle \otimes \|0\rangle$
XZ	$\|10\rangle - \|01\rangle$	$\|11\rangle - \|01\rangle$	$\|1\rangle \otimes \|1\rangle$

2^n, $n = 50, 500$

Квантовый параллелизм.

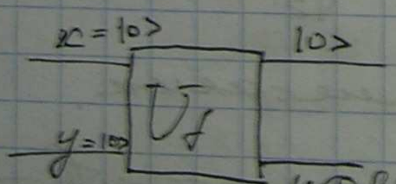
Способ-ть за 1 действие выч-ть exp большое число ф-ций.

$f(x)$, $x = 0, 1$

$f(x) = 0, 1$ $\quad 2^n$

2QB — квантовый компьютер.

U_f — чёрный ящик — некот. опер-р



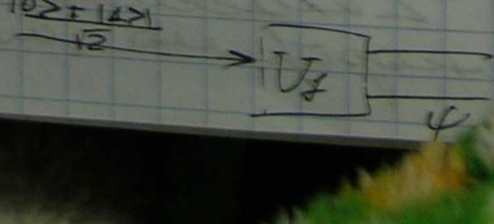
$y \oplus f(x) = |0\rangle \oplus f(x) = f(x)$

$|0\rangle \oplus f(x) = f(x)$

$|1\rangle \oplus f(x) = 1 - f(x)$

$|\psi_{in}\rangle = |00\rangle \xrightarrow{U_f} |\psi_{out}\rangle = |0, f(0)\rangle$

$|\psi_{in}\rangle = |10\rangle \xrightarrow{U_f} |\psi_{out}\rangle = |1, f(1)\rangle$



$$|\psi_{in}\rangle = \frac{|00\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}} \quad U_f \quad |\psi_{out}\rangle = \frac{|0, f(0)\rangle + |1, f(1)\rangle}{\sqrt{2}}$$

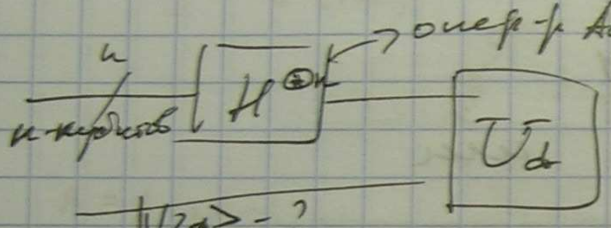
с вер-ю $\frac{1}{2} \Rightarrow |0, f(0)\rangle$

с вер-ю $\frac{1}{2} \Rightarrow |1, f(1)\rangle$

n кубитов.

$|0\rangle \quad |0\rangle \quad |0\rangle \quad |0\rangle \quad |0\rangle \quad |0\rangle$

$|\psi_0\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle \otimes \ldots \otimes |0\rangle$ — тензорное произв-е



$|0\rangle^{\otimes n} \otimes |0\rangle$

$$|\psi_1\rangle = \left(\frac{1+0}{\sqrt{2}}\right) \otimes \left(\frac{0+0}{\sqrt{2}}\right) \otimes |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}}\Big(|\underbrace{0\ldots0}_{n}\rangle + |\underbrace{1\ldots0}_{n}\rangle + \ldots$$

$$+ \ldots + |11\ldots1\rangle\Big) \otimes |0\rangle$$

Число x : $|x\rangle = |x_0, x_1 \ldots x_{n-1}\rangle$

$$x = x_{n-1} 2^{n-1} + x_{n-2} 2^{n-2} + \ldots + x_0 2^0 \qquad x_i = 0, 1$$

$$0 \le x \le 2^n - 1$$

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle \otimes |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x, 0\rangle$$

$$|\psi_{out}\rangle = \sum_{x=0}^{2^n-1} |x, |0\rangle \oplus |f(x)\rangle\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x, f(x)\rangle$$

2^n разл. ф-ций за одно действие.

Квантовые алгоритмы
① Дойча (разминка)
② Шора
③ Гровера (поиск)

Задача Дойча

Структура решения ??

2 корреспондента. У них нет кв. компьютера

A B

2^n $0 \le x \le 2^n - 1$

A выбир. число x из B выч-ть $f(x)$:

Пост: $f(x) = \underbrace{0 \dots 0}_{2^n}$, $\underbrace{1\,1\,11\dots1}_{2^n}$

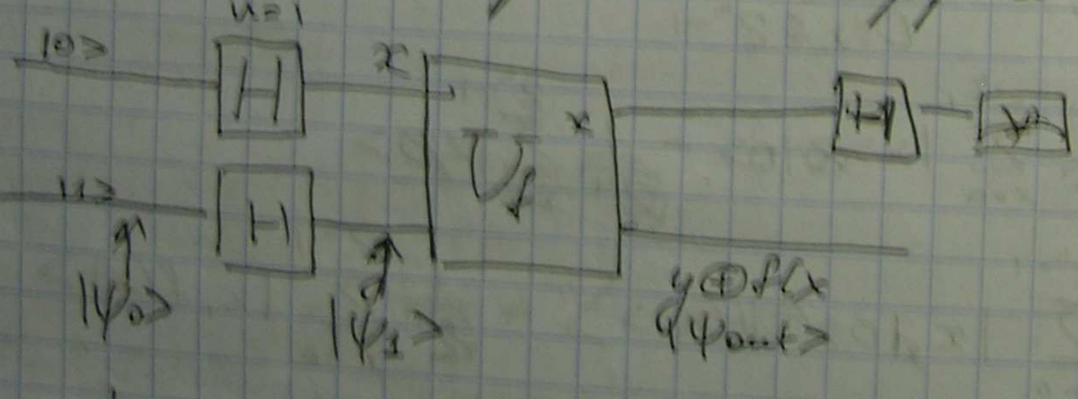
или

Сбаланс: $f(x) = \underbrace{0..0}_{\frac{2^n}{2}}\underbrace{1\,11..1}_{\frac{2^n}{2}}$

A должен угадать пост/сбаланс. способ выбрал B?

Без кв. компьютера $\frac{2^n}{2}+1$ корреспонденций

С кв. компьютером 1 корресп-ция



$|\psi_0\rangle = |01\rangle$

$|\psi_1\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$

$U_f\left[x \otimes \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}\right] = (-1)^{f(x)} |x\rangle \otimes \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$

5 мая $\boxed{\text{Теоретический минимум}}$ 30.04

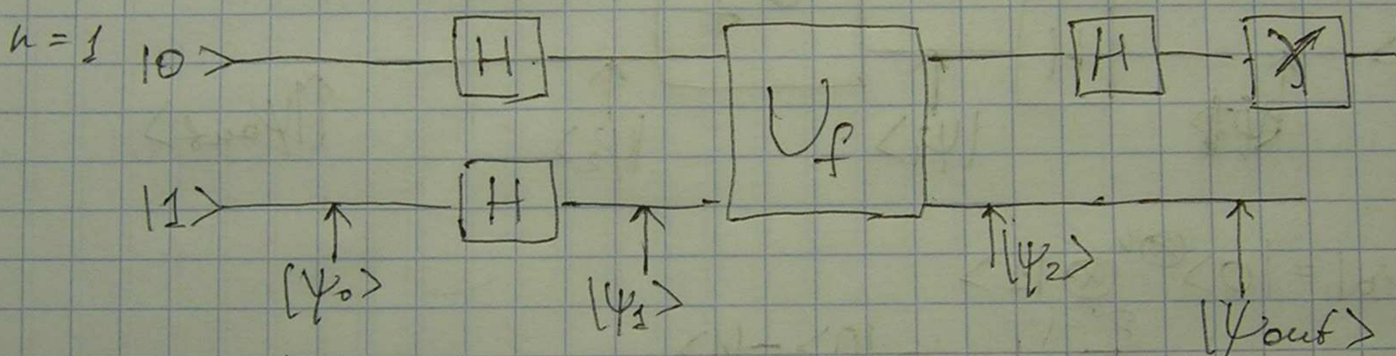
$2^n \qquad 0 \le x \le 2^n - 1$

$$f(x) = \begin{cases} f(x) = const\ (0, 1) \\ f(x) \text{ сбаланс. } (0, 1) \text{ на половине значений} \end{cases}$$

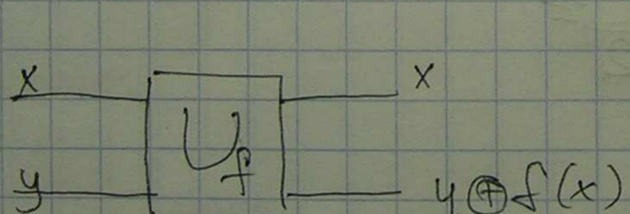
A B — корр. ты

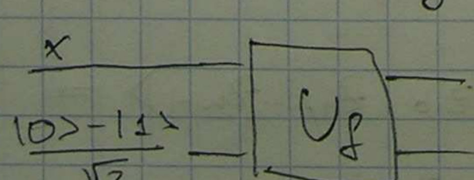
$$x_1 \longrightarrow f(x_1)$$
$$f(x_1) \longleftarrow f(x_1)$$
$$x_2 \longrightarrow f(x_2)$$
$$f(x_2) \longleftarrow f(x_2)$$

$$\frac{2^n}{2} + 1$$



$$|\psi_0\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle$$
$$|\psi_1\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$$





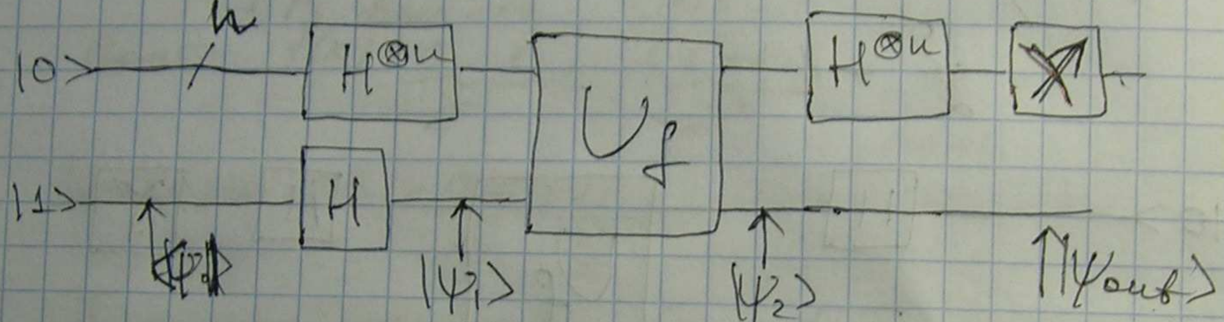
$$U_f |x\rangle \otimes \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} = (-1)^{f(x)} |x\rangle \otimes \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$|x\rangle = \frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$|\psi_2\rangle = \left((-1)^{f(0)}|0\rangle + (-1)^{f(x)}|1\rangle\right) \otimes \frac{|0\rangle-|1\rangle}{\sqrt{2}} =$$

$$= \begin{cases} \pm \dfrac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \dfrac{|0\rangle-|1\rangle}{\sqrt{2}}, & f = \text{const} \\ \pm \dfrac{|0\rangle-|1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \dfrac{|0\rangle-|1\rangle}{\sqrt{2}}, & f = \text{сбаланс} \end{cases}$$

$$|\psi_3\rangle = \begin{cases} \pm |0\rangle \otimes \dfrac{|0\rangle-|1\rangle}{\sqrt{2}}, & f = \text{const} \\ \pm |1\rangle \otimes \dfrac{|0\rangle-|1\rangle}{\sqrt{2}}, & f = \text{сбалансир.} \end{cases}$$



$$\langle\psi_0| = |0\rangle^{\otimes n} \otimes |1\rangle$$

$$\langle\psi_1| = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{n=0}^{2^n-1} |x\rangle \otimes \frac{|0\rangle-|1\rangle}{\sqrt{2}};$$

$$|x\rangle = |x_0, x_1, \dots x_{n-1}\rangle$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{n=0}^{2^n-1} (-1)^{f(x)} |x\rangle \otimes \frac{|0\rangle-|1\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$H|x_i\rangle = \sum_{z_i=0,1} (-1)^{x_i z_i} |z_i\rangle \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$|\psi_{out}\rangle = \frac{1}{2^n} \sum_{x, z_0, \dots z_{n-1}} (-1)^{f(x)+x_0z_0+\dots+x_{n-1}z_{n-1}} |z_0, z_1 \dots z_{n-1}\rangle =$$

$$= A_0 |0, \dots 0\rangle + \frac{1}{2^n} \sum_{x, z_0 \neq 0, z_n \neq 0} (-1)^{f(x)+x_0z_0+z_{n-1}x_{n-1}}$$

$$A_0 = \frac{1}{2^n} \sum_x (-1)^{f(x)} = \pm 1, \quad f = \text{const}$$

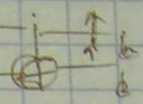
$$2^n + 1 + 1 + 2n + 2$$

$$\boxed{\langle\psi_3|\psi_3\rangle = 1!!!}$$

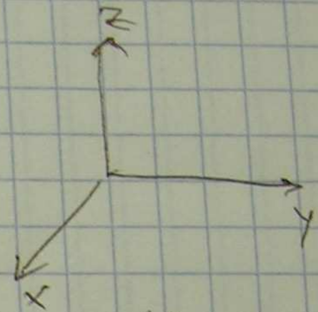
$H = -J \hat{z}_1 \hat{z}_2$ C(1) — control

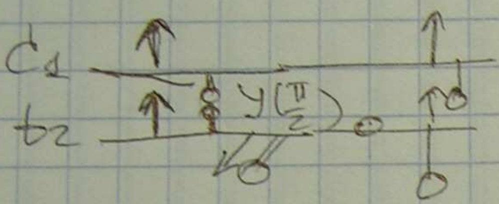
t(2) — целевой

→ 2 кубита



$+H_1 + H_2$





Поворот

и внешнее поле $+H_1 + H_2$