4. KVANTNA MEHANIKA

Cilj: osnove KM, postulati. Kaj so možne meritve in problem lastnih vrednosti.
Kubit in Blochova sfera

Vloga in pomen: 1.) teorija pojavov na atomski skali

2.) temelj kvantne kemije, k. elektronike, k. optike in k. informatike

3.) korespondenčno načelo: klasična fizika je limita kvantne mehanike (velika delci)

4.) Makroskopske lastnosti so posledica kvantnih lastnosti snovi, npr. mehanske, električne, optične, itd.
Načeloma so izračunljive ⇒ EMERGENCA

5.) Izredno natančna teorija z odličnim ujemanjem z eksperimenti, npr. 10^{-8} za mag. moment $\bar{e}$

velikost \ hitrost	$\ll c$	$\sim c$
$\gg 1\,nm$	klasična mehanika	relativistična mehanika
$\sim 1\,nm$	kvantna mehanika	kvantna teorija polja

Definicije:

→ Fizikalni sistem: del prostora, ki ga obravnavamo in ostalo je okolica

→ Izolirana sistem: sistem, ki nima interakcije z okolico (idealizacija, ker vedno imamo sevanje okolice, gravitacijo, itd.)

→ Odprt sistem: sistem, ki izmenjuje toploto / energijo / snov z okolico

→ Prostostna stopnja: parameter, ki opredeljuje stanje fizikalnega sistema. število koordinat, da opredelimo položaj N teles → 3N (možne vezi)

Klasičen opis $\vec{r}(t)$; $r_i(t) \in \mathbb{R}$ za zvezne probleme

$r_i(t) \in \mathbb{Z}$ za diskretne probleme, npr. z jamici

kvanten opis $\psi(\vec{r}, t)$: valovna funkcija (vektor v Hilbertovem prostoru)

4.1) <u>Kvantno stanje</u>: Kvantno stanje opišemo kot element kompleksnega Hilbertovega prostora ψ in sledenji je odvisen od problema/sistema.

kompleksna amplituda $\psi(\vec{r})$ opiše stanje in intenziteta $|\psi(\vec{r})|^2$ verjetnost za meritev.

Vektor v Hilbertovem prostoru zapišemo preko baze $\vec{v} = v_1\hat{e}_1 + \dots + v_n\hat{e}_n$ in predpostavimo, da je baza ortonormirana $(\hat{e}_i, \hat{e}_j) = \delta_{ij}$

Zapišemo ga tudi kot $\vec{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}$

Dualni vektor $\vec{v}^+ = (v_1^*, \dots, v_n^*)$ in velja

$$(\vec{a}, b) = (a_1^*, \dots, a_n^*)\begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = a_1^* b_1 + \dots + a_n^* b_n$$

<u>Diracov (bra-ket) zapis</u>: vektor $|\psi\rangle$, dualni vektor $\langle\varphi|$ in skalarni produkt $\langle\varphi|\psi\rangle$

Torej: $\langle A| = (a_1^*, \dots, a_n^*)$ $\quad |B\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$ $\quad \langle A|B\rangle = (a_1^* \dots a_n^*)\begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = (|A\rangle, |B\rangle)$

Norma $\langle A|A\rangle = \sum_i a_i^* a_i$ $\qquad \| |A\rangle \| = \sqrt{\langle A|A\rangle}$

Normirani vektor je vektor $\| |A\rangle \| = 1$; vedno lahko vektor normiramo kot $|A\rangle \to \frac{|A\rangle}{\| |A\rangle \|}$

4.2) AKSIOMI

a) Stanje ustreza vektorju v n-dim Hilbertovem prostoru $|\psi\rangle \in H_n$

b) Fizikalne opazljivke ustrezajo hermitskim operatorjem $\hat{A}^+ = \hat{A}$.

c) Meritev ustreza lastnim vrednostim operatorja $\hat{A} = \sum_i \lambda_i |i\rangle\langle i|$ in možni rezultati so λ_i z verjetnostjo $p_i = |\langle i|\psi\rangle|^2$

d) Po meritvi končamo v lastnem stanju $|i\rangle$ ("kolaps valovne funkcije") in meritev je destruktivna.

4.3 Dvonivojski sistem: dve možni bazni stanji

Primeri: 1.) spin e^-, "vrtilna količina" $\Gamma = \pm\frac{\hbar}{2}$

(klasično $\vec{\Gamma} = \vec{r} \times (m\vec{v})$)

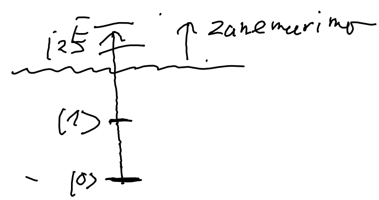
Čeprav je $\bar{e}$ točkast delec ima lastno vrtilno količino, ki jo opišemo s spinskim kvantnim številom.

Spinsko kvantno število je projekcija spina na izbrano smer $\Gamma = \hbar S^z$ $\quad S^z = \pm\frac{1}{2}$

Zapis: $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ ali $|\frac{1}{2}\rangle, |-\frac{1}{2}\rangle$.

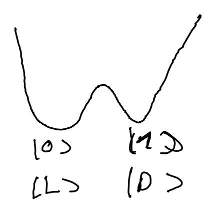
Spin delca ni povezan z maso, tudi foton ima spin 1.

2.) Stanje atoma: v osnovnem ali vzbujenem stanju $|0\rangle$ in $|1\rangle$, če lahko ostala višja stanja zanemarimo



3.) Položaj $\bar{e}$ v potencialu z dvema minimumoma

4.) Tokovi v superprevodniku $|\circlearrowright\rangle$ ali $|\circlearrowleft\rangle$



Načelo superpozicije:

Stanje $\in H_n \Rightarrow$ poljubna linearna kombinacija so dovoljena stanja

$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ in $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$; α, β imenujemo verjetnostne amplitude

ali $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$, če so $|0\rangle$ in $|1\rangle$ bazni vektorji

Kaj to pomeni?

Verjetnostna interpretacija:

→ Po meritvi je atom ali v $|0\rangle$ ali v $|1\rangle$. Če ponavljam meritev na enako pripravljenem sistemu bomo dobili z verjetnostjo $|\alpha|^2$ stanje $|0\rangle$ in $|\beta|^2$ stanje $|1\rangle$.

→ Normalizacijo zagotovi $|\alpha|^2+|\beta|^2=1$

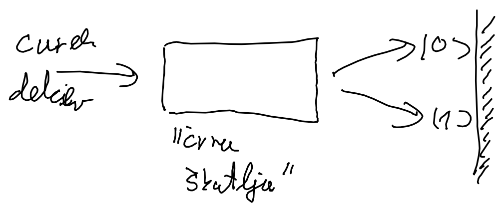
→ Ne moremo izmeriti samih amplitud, le $|\alpha|^2, |\beta|^2$

→ kvantna nedoločenost: merimo le verjetnost za stanje in tako je verjetnost fundamentalna lastnost, ne napaka meritve

Primer: $|\psi\rangle = \frac{3}{5}|0\rangle + \frac{4}{5}|1\rangle$; $\left(\frac{3}{5}\right)^2 + \left(\frac{4}{5}\right)^2 = 1$

v 36% izmerimo $|0\rangle$ in v 64% izmerimo $|1\rangle$.

Eksperiment



od 10^6 delcev

⇓

360k v točko $|0\rangle$ in

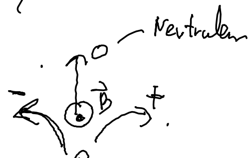
640k v točko $|1\rangle$

4.4 Stern-Gerlachov eksperiment (1922)

Zgodovina: Še leta '20 so mislili, da je kvantizacija vrtilne količine matematični konstrukt. Skoraj se ne bi zgodil eksperiment Sterna-Gerlacha, ker je bila inflacija. Goldman (od Goldman-Sachs) je prispeval ček za nekaj \$100.

Delec v magnetnem polju

$$\vec{F} = e\vec{v}\times\vec{B}$$



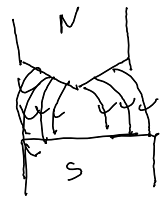
Homogeno polje ne vpliva na trajektorijo za nevtralne delce.

Nehomogeno polje $V = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}$

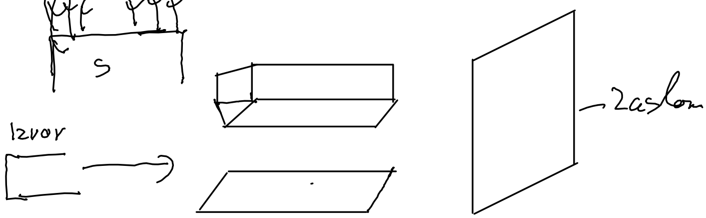
$$F_z = -\frac{\partial}{\partial z}(V) = \pm \mu^z \frac{\partial V}{\partial z}$$

Različna sila za $\mu_z = \pm \frac{\hbar}{2}$

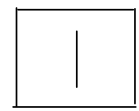
Eksperiment



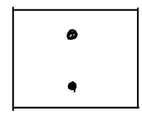
Gostejše silnice = večje polje



Klasični rezultat

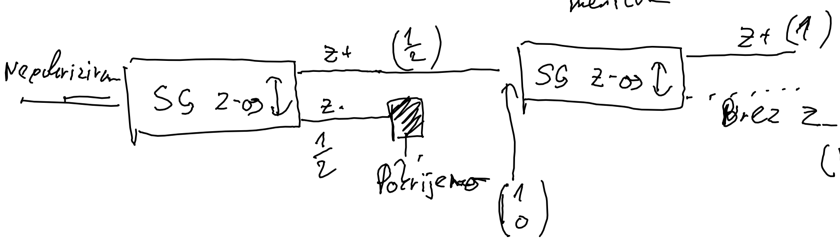


Kvantni rezultat



Iz Schrödingerjeve enačbe bi za H pričakovali le eno piko, ker je $\mu=0$, a eksperiment pokaže 2. Potreba po uvedbi spina (Pauli). Spin je bil potreben za razumevanje atomske strukture (Paulijevo izključitveno načelo) in Zeemanovega pojava.

Primer: Imamo curek H atomov in jih pošiljamo skozi zaporedne SG aparate. Kolikšna je verjetnost za posamezne meritve



Motivacija, da razumemo matematično teorijo meritve v KM.

4.5 Meritev v kvantni mehaniki

Merljive količine ("opazljivke") opišemo z linearnimi Hermitskimi operatorji. $A|\psi\rangle = |\varphi\rangle$

Matrična upodobitev (ekvivalenca med operatorji in matrikami)

$$A|e_j\rangle = \sum_i A_{ij} |e_i\rangle$$

Primer $A|0\rangle = |1\rangle$ $\quad A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

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

Skalarni produkt

$(|a\rangle, A|b\rangle)$ zapišemo $\langle a|A|b\rangle$

Hermitska konjugacija

$$\langle a|A|b\rangle^* = \langle b|A^+|a\rangle$$

Matrično $(A^+)_{ij} = A_{ji}^*$ ali $A^+ = (A^T)^*$

Hermitski (samo-adjungirani) operator $A^+ = A$.

Paulijeve matrike (W. Pauli ki je preučeval spin v KM ~1925)

$$\sigma_0 = \mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

So Paulijeve matrike hermitske?

$$\sigma_0: \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}^+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad \sigma_x^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \sigma_x; \quad \sigma_y^+ = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \sigma_y$$

$$\sigma_z: \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}^+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Da.

4.5.1) Lastna stanja (vektorji) in lastne vrednosti

Problem lastnih vrednosti (eigenvalue problem)

$A|v\rangle = \lambda|v\rangle$ in iščemo $\lambda_i, |v_i\rangle$

Lastnosti: a) Lastnih vektorjev je toliko kot dim prostora (za pohlevne matrike, ki so važne v fiziki)

b) Lastne vrednosti so lahko enake za več vektorjev. Rečemo, da so vrednosti degenerirane.

c) Lastne vrednosti hermitskih matrik so realne.

Dokaz: (izpusti)

$A|v\rangle = \lambda|v\rangle$ $\qquad$ $A^\dagger|v\rangle = \lambda'|v\rangle$

$\langle v|A|v\rangle = \lambda \underbrace{\langle v|v\rangle}_{1}$ $\qquad$ $\langle v|A^\dagger|v\rangle = \lambda' \underbrace{\langle v|v\rangle}_{1}$

$$\lambda = \langle v|A|v\rangle = \left(\langle v|A^\dagger|v\rangle\right)^* = \lambda^*$$

d) Množico vseh lastnih vrednosti imenujemo spekter operatorja.

e) Diagonalizacija matrik je ~50% dela v numerični KM. Polinomsko scaliranje z velikostjo matrike $O(N^3)$, kjer je N velikost Hilbertovega prostora. $N \propto e^L$, kjer je L število prostostnih stopenj.

Primer: Lastne vrednosti Paulijevih matrik

$\rightarrow \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ $\qquad \lambda = \pm 1$ $\qquad \sigma_z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

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

$\rightarrow \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ $\qquad \det(\sigma_x - \lambda 1\!\!1) = 0 = \det\begin{pmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - 1 = 0$

$\lambda = \pm 1$

$\sigma_x |v\rangle = 1|v\rangle$

$\lambda = 1$ $\qquad \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 1\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \Rightarrow x = y \Rightarrow \psi_{+1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = |\rightarrow\rangle$

$\lambda = -1$ $\qquad \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = -1\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \Rightarrow x = -y \Rightarrow \psi_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = |\leftarrow\rangle$

Bra-ket zapis operatorja $\hat{A} = \sum_i \lambda_i |i\rangle\langle i|$, kjer

$$|a\rangle\langle b| = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} b_1 & b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 b_1 & a_1 b_2 \\ a_2 b_1 & a_2 b_2 \end{pmatrix}$$

Primer $\sigma_x = 1 \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = \sigma_x$

4.5.2 Bornovo pravilo za meritev:

Pri meritvi operatorja $\hat{A} = \sum_i \lambda_i |i\rangle\langle i|$ dobimo vrednost λ_i z verjetnostjo $p_i = |\langle i|\psi\rangle|^2$

Lastni vektorji so polna baza $\Rightarrow$ vsak operator lahko zapišemo $A = \sum_i \lambda_i |i\rangle\langle i|$

Primer spina v SG eksperimentu

Začetno stanje $|\psi\rangle = |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

1.) Meritev v z smeri $\quad \sigma_z = 1\,|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - 1\,|\downarrow\rangle\langle\downarrow|$

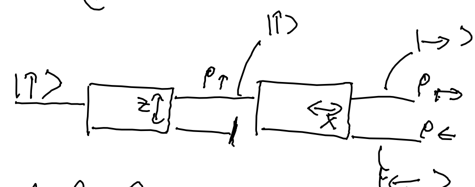
$$p_\uparrow = 1, \quad p_\downarrow = 0$$

2.) Meritev v x smeri

$$A = \sigma_x = 1\,\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle\right)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\langle\uparrow| + \langle\downarrow|\right) - 1\,\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle\right)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\langle\uparrow| - \langle\downarrow|\right)$$

$$p_\rightarrow = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\langle\uparrow| + \langle\downarrow|\right)|\uparrow\rangle\right|^2 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 = \frac{1}{2}$$

$$p_\leftarrow = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\langle\uparrow| - \langle\downarrow|\right)|\uparrow\rangle\right|^2 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 = \frac{1}{2}$$



Pričakovana vrednost = povprečje opazljivke $\hat{A}$

$$\langle A\rangle = \sum_i \lambda_i p_i = \sum_i \lambda_i |\langle i|\psi\rangle|^2 = \sum_i \lambda_i \langle\psi|i\rangle\langle i|\psi\rangle =$$

$$= \langle\psi|\sum_i \lambda_i |i\rangle\langle i|\,|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle$$

pričakovana vrednost je skalarni produkt $|\psi\rangle$ in $A|\psi\rangle$

Primer: $A = \sigma_x \quad |\psi\rangle = |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \langle A\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle = (1\ 0)\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = (1\ 0)\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0.$

Merljivost faz

$\boxed{\text{Globalna faza}}$: Če je razlika med valovnimi funkcijami globalna faza

$|\psi_1\rangle$ in $|\psi_2\rangle = e^{i\varphi}|\psi_1\rangle$. Verjetnost za $|i\rangle$-to lastno stanje

$$p_i = |\langle i|\psi_2\rangle|^2 = |\langle i|e^{i\varphi}|\psi_1\rangle|^2 = |e^{i\varphi}|^2|\langle i|\psi_1\rangle|^2 =$$

$$= 1\,|\langle i|\psi_1\rangle|^2.$$

Nauk: Globalna faza ni merljiva

$\boxed{\text{Relativna faza}}$: $|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i\varphi}|1\rangle)$ za lastno stanje

$$|\rightarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$$

$$\left|\frac{1}{\sqrt{2}}(\langle 0| + \langle 1|)\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i\varphi}|1\rangle)\right|^2 = \frac{1}{4}|1 + e^{i\varphi}|^2 =$$

$$= \frac{1}{4}(1+e^{i\varphi})(1+e^{-i\varphi}) = \frac{1}{4}(1 + e^{i\varphi} + e^{-i\varphi} + 1) = \frac{1}{2}(1+\cos(\varphi)) = \cos^2\left(\frac{\varphi}{2}\right)$$

Nauk: Relativna faza merljiva.

4.6 kubit (Ben Schumacher 1995)

→ bit = (binary digit) binarna številka, 0 ali 1.

Informacija ima vedno fizikalen zapis: dve različni napetosti, smeri magnetizacije, vtisnjene luknjice na CD, itd

Entropija je mera za količino informacije, ki jo potrebujemo za opis sistema. Količina informacije je $\log_2 N$ bitov, če je N možnih konfiguracij. Primer: $N=4 \Leftrightarrow$ 2 bita.

→ kubit = mera za kvantno informacijo: $|0\rangle$ ali $|1\rangle$ ali njena poljubna linearna kombinacija $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$

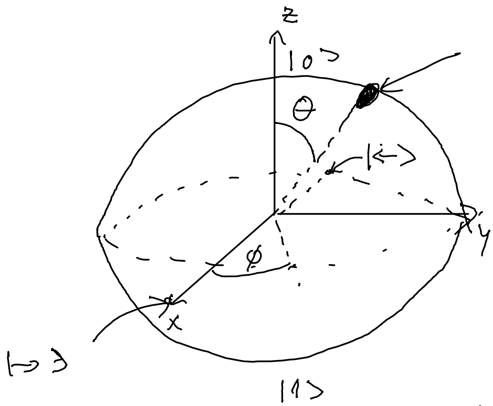
$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$

<u>Blochova sfera</u> je reprezentacija stanj enega kubita.

Pogoji: a) $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \Rightarrow \alpha = \cos(\frac{\theta}{2})$; $\beta = \sin(\frac{\theta}{2})$

b) Globalna faza ni pomembna.

c) Izberemo fazo, da je $\alpha \in \mathbb{R}$ in $\beta = \sin(\frac{\theta}{2}) e^{i\phi}$



Blochov vektor $(\cos\phi \sin\theta, \sin\phi \sin\theta, \cos\theta)$

Pola sta $|1\rangle$ in $|0\rangle$.

Vsaka točka na sferi predstavlja stanje kubita.

Dva prosta parametra.

Čeprav je na Blochovi sferi ∞ točk, ni mogoče shraniti ∞ velik informacije zaradi <u>merjenja</u> v KM.

kvantna tomografija: če ∞ velikov identičnih kubitov, lahko določimo α in β

4.7 Kolaps valovne funkcije

- Takoj po meritvi opazljivke A je sistem v lastnem stanju $|i\rangle$, če smo izmerili λ_i

Primer: $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ Izmerimo λ_0 : $|\psi\rangle = |0\rangle$

Meritev je destruktivna, saj naredimo projekcijo in meritna naprava je razumljena kot klasični (makroskopski) sistem.

Merimo klasične lastnosti: položaj, gibalno količino, itd.
To je t.i. Copenhagenska interpretacija KM (Bohr, Heissenberg '24-'27)
Najbolj sprejeta in predavana interpretacija.
za profesionalce se priporoča "Shut up and calculate."

4.9 Lastnosti kvantne informacije:

a) superpozicija

b) destruktivno branje

c) kloniranje ni možno ("no-cloning" rnež) (1982)

Ni možno izdelati identične kopije neznanega kvantnega stanja.
(Naslednje poglavje)

Ponovimo aksiome KM:

1.) Stanje ustreza vektorju $|\psi\rangle \in H_n$, kjer je H_n n-dim Hilbertov prostor

2.) Opazljivke so opisane s hermitskimi operatorji $A = A^+$

3.) Meritev opazljivke $A = \sum_i \lambda_i |i\rangle\langle i|$ vodi do rezultat λ_i z verjetnostjo $p_i = |\langle i|\psi\rangle|^2$.

4.) Meritev je destruktivna.