

# 3

## Kvantna mehanika

V klasični fiziki stanje sistema opišemo z njegovimi merljivimi lastnostmi, denimo z lego telesa  $\mathbf{r}(t)$ , v kvantni mehaniki pa z valovno funkcijo  $\psi(\mathbf{r}, t)$ , ki ni neposredno merljiva. Rečemo tudi, da je kvantno stanje določeno z *vektorjem v Hilbertovem prostoru*. Cilj tega poglavja je razjasniti, kaj to pravzaprav pomeni. V ta namen bomo spoznali nekaj pojmov iz linearne algebre in matematični *formalizem* kvantne mehanike. Ugotovili bomo, da kvantna teorija temelji na pojmih *informacije* in *verjetnosti*.

### 3.1 Vektorski prostor

*Skalar* je neko število,  $x \in \mathbb{R}$  ali  $z \in \mathbb{Z}$ . *Vektor* je  $n$ -terica števil, denimo v prostoru  $\mathbb{R}^n$  ali  $\mathbb{C}^n$ .  $n$  imenujemo *dimenzija* prostora. Vektor zapišemo kot stolpec *komponent*

$$\mathbf{v} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix}. \quad (3.1)$$

Vektor si lahko predstavljamo geometrijsko kot usmerjeno daljico v prostoru ali pa kot povsem abstrakten algebrajski pojem.

*Vektorski prostor* je množica vseh vektorjev z dvema zahtevama:

1. Vektorje lahko seštevamo po komponentah,

$$\begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 + b_1 \\ \vdots \\ a_n + b_n \end{bmatrix}. \quad (3.2)$$

2. Vektorje lahko pomnožimo s skalarjem  $k$ ,

$$k \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} ka_1 \\ \vdots \\ ka_n \end{bmatrix}. \quad (3.3)$$

Vektorski prostor je osnovni pojem *linearne algebre*, pomembne veje matematike.

*Baza* je nabor vektorjev  $\mathbf{e}_i$ , ki razpenjajo cel prostor: poljubni vektor v vektorskem prostoru lahko zapišemo kot linearno kombinacijo baznih vektorjev,

$$\mathbf{v} = v_1 \mathbf{e}_1 + \dots + v_n \mathbf{e}_n. \quad (3.4)$$

Količine  $v_i$  so skalarji, ki tvorijo *komponente* ali *koordinate* vektorja v izbrani bazi. Bazni vektorji morajo biti linearno neodvisni, kar pomeni, da nobeden izmed njih ne sme biti zapisan kot linearna kombinacija preostalih. Na primer  $\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$ ,  $\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$  in  $\begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}$  niso linearno neodvisni, saj je tretji vsota prvih dveh. Dimenzija vektorskega prostora je enaka številu baznih vektorjev. Obstajajo tudi neskončno dimenzionalni vektorski prostori.

*Standardna baza* je

$$\mathbf{e}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{e}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \dots, \quad \mathbf{e}_n = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (3.5)$$

Bazni vektorji določajo koordinatni sistem. Zapišemo lahko

$$\mathbf{v} = x_1 \mathbf{e}_1 + x_2 \mathbf{e}_2 + \dots + x_n \mathbf{e}_n = x_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + x_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + \dots + x_n \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}. \quad (3.6)$$

Koordinate  $x_i$  v standardni bazi se imenujejo tudi *kartezične* koordinate. Če si izberemo drugačno bazo  $\{\mathbf{f}_i\}$ , bodo komponente  $y_i$  v zapisu  $\mathbf{v} = \sum_i y_i \mathbf{f}_i$  drugačne od komponent  $x_i$  v zapisu  $\mathbf{v} = \sum_i x_i \mathbf{e}_i$ , čeprav imamo opravka z istim vektorjem  $\mathbf{v}$ .

## 3.2 Skalarni produkt

*Skalarni produkt* je predpis, ki dvema vektorjema priredi skalarno vrednost:  $\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_2 = c$ . V Evklidskem prostoru velja, denimo,  $\mathbf{AB} \cdot \mathbf{AC} = |\mathbf{AB}| |\mathbf{AC}| \cos \theta$ , kjer je  $\theta$  kot med daljicama  $AB$  in  $AC$ . Algebrajsko za  $\mathbb{R}^n$  velja

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} = a_1 b_1 + \dots + a_n b_n. \quad (3.7)$$

Posplošitev za  $\mathbb{C}^n$  se razlikuje v pomembni podrobnosti. Velja namreč

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} = a_1^* b_1 + \dots + a_n^* b_n, \quad (3.8)$$

kjer zvezdica označuje kompleksno konjugiranje,  $z^* = \bar{z}$ . Prednost te definicije je, da je  $\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}$  nenegativno realno število, zato lahko vpeljemo pojem *norme* (dolžine vektorja) podobno kot v realnih vektorskih prostorih:

$$\|\mathbf{v}\| = \sqrt{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}}. \quad (3.9)$$

Normirati vektor pomeni, da ga podaljšamo oziroma skrajšamo tako, da bo imel normo 1:

$$\mathbf{v} \rightarrow \frac{\mathbf{v}}{\|\mathbf{v}\|}. \quad (3.10)$$

Skalarni produkt pogosto zapišemo z oklepaji:

$$(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = a_1^* b_1 + \dots + a_n^* b_n. \quad (3.11)$$

Paziti pa moramo, da velja

$$(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = (\mathbf{b}, \mathbf{a})^*. \quad (3.12)$$

Če je skalarni produkt dveh vektorjev enak nič, sta vektorja med seboj *pravokotna* ali *ortogonalna*.

Dualni vektorji so vrstice  $[v_1^* \ \dots \ v_n^*]$ . Velja torej

$$(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \left( \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \right) = [a_1^* \ \dots \ a_n^*] \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} = a_1^* b_1 + \dots + a_n^* b_n. \quad (3.13)$$

Vektor vrstico si lahko tolmačimo tudi kot  $1 \times n$  matriko, vektor stolpec pa kot  $n \times 1$  matriko. Veljajo običajna pravila za matrično množenje: vsak element matrike rezultata dobimo kot produkt vrstice levega faktorja s stolpcem desnega faktorja.

*Ortonormirana baza* je baza, za katero velja

$$(\mathbf{f}_i, \mathbf{f}_j) = \delta_{ij}, \quad (3.14)$$

kjer je  $\delta_{ij}$  *Kroneckerjev simbol delta*, definiran kot  $\delta_{ij} = 1$ , če  $i = j$ , in 0 sicer. To pomeni, da so vektorji med seboj pravokotni, vsak izmed njih pa ima normo 1. Za standardno bazo to očitno velja.

### 3.3 Bra-ket (Diracov) zapis

Eleganten zapis vektorjev je iznašel Dirac. Uporabljali ga bomo tudi mi. Vektorje zapišemo kot *ket* (navpična črta in lomljeni desni oklepaj),  $|\psi\rangle$ . Dualne vektorje zapišemo kot *bra* (lomljeni levi oklepaj in navpična črta),  $\langle\psi|$ . Skalarni produkt je produkt braja z leve in keta z desne, pri čemer lahko eno izmed dveh navpičnih črt izpustimo, torej  $\langle\psi|\phi\rangle$  namesto  $\langle\psi||\phi\rangle$ . Imeni bra in ket prideta iz angl. bracket (oklepaj).

Pišemo lahko torej  $\langle A| = [a_1^* \dots a_n^*]$ ,  $|B\rangle = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$  in sledi

$$\langle A|B\rangle = (\langle A|, |B\rangle) = [a_1^* \dots a_n^*] \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^n a_i^* b_i. \quad (3.15)$$

*Norma* vektorja je torej  $\sqrt{\langle A|A\rangle}$ , kar zapišemo tudi kot  $\| |A\rangle \|$ .

### 3.4 Hilbertov prostor

*Hilbertov prostor* je vektorski prostor z definiranim skalarnim produktom. Med Hilbertove prostore spadajo navadni Evklidski prostor ter prostori realnih in kompleksnih vektorjev,  $\mathbb{R}^n$  in  $\mathbb{C}^n$ .

Sedaj smo si pripravili matematično podlago za naslednjo trditev:



#### postulat 1

I Kvantno stanje je element Hilbertovega prostora.

V nadaljevanju bomo pojma stanje in vektor uporabljali kot sinonima. Izbira ustreznega Hilbertovega prostora je odvisna od konkretnega problema, s katerim imamo opravka, kar je podobno izbiri nabora spremenljivk, potrebnih za opis klasičnega sistema. Hilbertov prostor mora biti kompleksen, ker faze kompleksnih komponent igrajo ključno vlogo v teoriji. Imaginarna enota  $i$  nastopa tudi v osnovni enačbi gibanja, Schrödingerjevi enačbi (razdelek 3.20). V klasični mehaniki stanje sistema opredelimo tako, da podamo vrednosti vseh spremenljivk, v kvantni mehaniki pa tako, da izberemo element Hilbertovega prostora.

### 3.5 Dvonivojski sistem

*Dvonivojski sistem* je kvantni sistem z dvodimenzionalnim Hilbertovim prostorom. Ta ima dve bazni stanji, ki ju označimo z  $|0\rangle$  in  $|1\rangle$ . Tudi poljubne linearne kombinacije

$|0\rangle$  in  $|1\rangle$  so dovoljena stanja, saj so ravno tako elementi Hilbertovega prostora. Velja torej načelo superpozicije tako kot pri valovanjih. Do danes ni še noben eksperiment nakazal možnosti, da bi v kvantni mehaniki obstajale kakšne nelinearnosti, ki bi kvarile veljavnost načela superpozicije.

Splošno stanje dvonivojskega sistema je torej

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle, \quad (3.16)$$

kjer sta  $\alpha$  in  $\beta \in \mathbb{C}$  koeficienta. Imenujemo ju tudi *verjetnostni amplitudi* in sta podobni kompleksnim amplitudam pri valovanjih. Stanje zapišemo tudi kot vektor stolpec

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}, \quad (3.17)$$

če se odločimo za uporabo baze

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (3.18)$$

## 3.6 Spin

Vrtilna količina točkastega telesa v klasični mehaniki se zapiše

$$\mathbf{\Gamma} = \mathbf{r} \times (m\mathbf{v}). \quad (3.19)$$

Tudi elektron, obravnavan v okviru kvantne mehanike, ima tirno vrtilno količino, povezano z njegovim gibanjem v prostoru. Ima pa tudi lastno (notranjo) vrtilno količino, *spin*. Uporabna je analogija s planetom Zemlja, ki kroži okrog Sonca (tirna vrtilna količina), hkrati pa se vrtilno okoli lastne osi (lastna vrtilna količina). Obstoj spina je presenetljiv, saj je elektron točkast (ali, bolje, nesestavljen) in ne moremo reči, da se vrtilno okoli lastne osi. Lastna vrtilna količina torej ni povezana z vrtenjem mase, temveč je intrinzična lastnost delca. To je razvidno tudi iz tega, da lahko spin pripišemo brezmasnim delcem; foton ima spin 1, čeprav nima mase.

Elektron je fermion in ima spin  $S = 1/2$ . Njegovo lastno vrtilno količino zapišemo kot  $\mathbf{\Gamma} = \hbar\mathbf{S}$ , kjer je  $\mathbf{S} = \{S_x, S_y, S_z\}$  vektor brezdimenzijskih komponent, Planckova konstanta  $\hbar$  pa ima ravno dimenzije vrtilne količine,  $[\text{Js}] = [\text{kgm}^2/\text{s}]$ . V kvantni mehaniki stanje vrtilne količine opredelimo s *spinskim kvantnim številom*, ki je projekcija spina na izbrano smer, recimo komponenta  $S_z$  vzdolž osi  $z$ . Dovoljene so samo diskretne vrednosti od  $-S$  do  $S$  s korakom 1: komponenta vrtilne količine je *kvantizirana* na  $2S + 1$  različnih vrednosti. Pri elektronu je lahko torej  $S_z = 1/2$  ali  $S_z = -1/2$ . Včasih rečemo, da spin elektrona »kaže gor« oziroma »dol«, zato spinsko stanje zapišemo tudi kot  $|\uparrow\rangle$  in  $|\downarrow\rangle$ . Komponenta vrtilne količine v smeri  $z$  je za faktor  $\hbar$  večja od brezdimenzijske količine  $S_z$ :

$$\Gamma_z = \hbar S_z = \pm \frac{\hbar}{2}. \quad (3.20)$$

V klasični fiziki krožeči nabiti delci ustvarijo *magnetni (dipolni) moment*

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{1}{2}q\mathbf{r} \times \mathbf{v}, \quad (3.21)$$

kjer je  $q$  naboj delca. Od tod sledi zveza

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{q}{2m}\boldsymbol{\Gamma}. \quad (3.22)$$

Izkaže se, da velja podobna zveza tudi za notranjo vrtilno količino elektrona:

$$\boldsymbol{\mu} = g_S \frac{-e_0}{2m}\boldsymbol{\Gamma} = -g_S \frac{e_0\hbar}{2m}\mathbf{S}, \quad (3.23)$$

kjer je koeficient  $g_S = 2,002\,319$ . Popravek k 2 se imenuje anomalni magnetni moment elektrona in ga je možno izračunati v okviru QED. Zaradi izjemnega ujemanja z meritvami predstavlja pomemben uspeh teorije.

### 3.7 Sternov in Gerlachov eksperiment

Stern in Gerlach sta leta 1922 raziskovala spremembo smeri delcev med letom skozi nehomogeno magnetno polje (slika 3.1). Poskuse sta opravljala z atomi, ki so električno nevtralni; nabiti delci imajo namreč v magnetnem polju ukrivljeno pot zaradi Lorentzeve sile  $\mathbf{F} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ , to pa ju ni zanimalo. Nekateri atomi imajo magnetni dipolni moment zaradi lastne vrtilne količine, torej se obnašajo kot drobne magnetnice, podobno kot zgoraj opisano za elektrone. Če je magnetno polje homogeno, na magnetni dipol ne deluje magnetna sila in polje ne vpliva na smer gibanja delca. Če pa je polje nehomogeno, recimo če njegova jakost narašča v smeri osi  $z$ , na dipol deluje magnetna sila in pride do odklona smeri gibanja. Naj kaže polje v smeri osi  $z$ , torej je od nič različna le komponenta  $B_z$ . Energija magnetnega momenta  $\boldsymbol{\mu}$  v magnetnem polju  $\mathbf{B}$  je

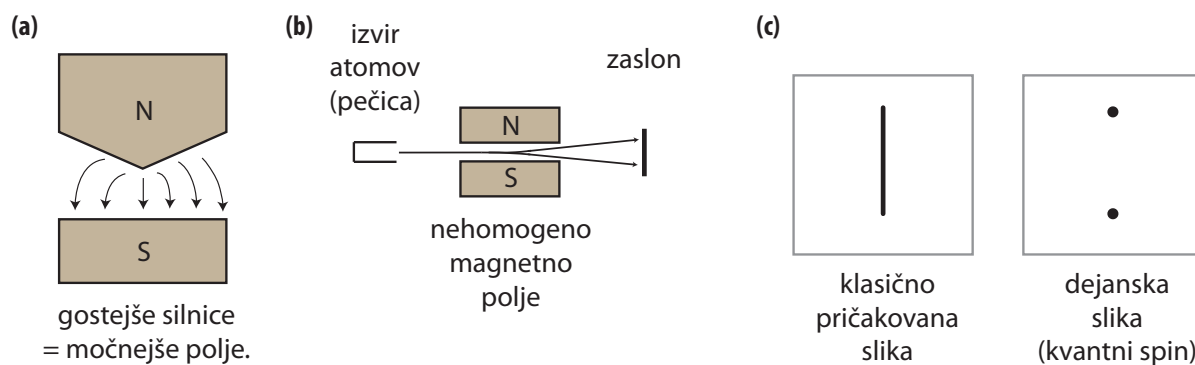
$$U = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\mu_z B_z, \quad (3.24)$$

sila v smeri  $z$  pa je

$$F_z = -\frac{dU}{dz} = \mu_z \frac{dB_z}{dz}. \quad (3.25)$$

Odvisno od predznaka momenta  $\mu_z$  se smer gibanja deleca odkloni v smeri proti močnejšemu polju ali v smeri proti šibkejšemu polju, glej sliko 3.1(b).

Za atom brez magnetnega momenta bi na zaslonu videli eno samo piko. Za atom z magnetnim momentom bi na temeljih klasične fizike na zaslonu pričakovali zvezno črto, ki ustreza vsem možnim komponentam  $\mu_z$  od minimalne  $-\mu$  do maksimalne  $\mu$ , kjer je  $\mu$  velikost magnetnega momenta atoma. Dejansko so v eksperimentu opazili dve ločeni piki, glej sliko 3.1(c). Tako so odkrili kvantizacijo vrtilne količine: lastni magnetni moment je neposredno povezan z lastno vrtilno količino (spinom), ki ima v tem primeru dve možni vrednosti komponente,  $S_z = \pm 1/2$ , zato velja  $\Gamma_z = \pm \hbar/2$ . To bomo bolje razumeli po obravnavi meritev v kvantni mehaniki v naslednjih razdelkih.



**Slika 3.1.** (a) Ustvarjanje nehomogenega magnetnega polja. (b) Postavitev pri eksperimentu Sterna in Gerlach. (c) Sliki na zaslonu, kot ju napovedujeta klasična oziroma kvantna mehanika.

Sternov in Gerlachov eksperiment je način merjenja komponente spina v smeri naraščajočega magnetnega polja. Aparaturo lahko obrnemo v različne smeri in merimo komponente  $\Gamma_x$ ,  $\Gamma_y$  in  $\Gamma_z$ . V nadaljevanju bomo spoznali, da ne moremo izmeriti več komponent sočasno (razdelek 6.6).

### 3.8 Verjetnostna interpretacija

Ko opravimo meritev neke lastnosti kvantnega dvonivojskega sistema, denimo določimo spinsko kvantno število  $S_z$ , ugotovimo, da kaže spin ali gor ali dol. Nikoli ne izmerimo »nekaj vmes«. Če ponavljamo meritve na povsem enako pripravljenem sistemu v stanju  $|\psi\rangle = \alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle$ , bomo včasih izmerili gor, včasih pa dol. Verjetnost je določena z  $|\alpha|^2$  oziroma z  $|\beta|^2$ . Veljati mora

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1, \quad (3.26)$$

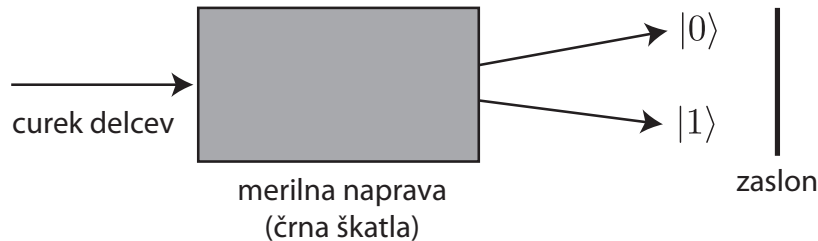
saj je vsota obeh verjetnosti enaka 1. Zato moramo vektorje, ki ustrezajo stanjem, vedno normirati. Rezultata posamezne meritve v naprej ne moremo napovedati (razen če je  $|\alpha|^2 = 1$  in  $\beta = 0$  ali pa  $|\beta|^2 = 1$  in  $\alpha = 0$ ). Da je verjetnost kvadrat absolutne vrednosti verjetnostne amplitude, je analogno temu, da je intenziteta valovanja kvadrat absolutne vrednosti kompleksne amplitude (glej razdelek 1.6).

Kot primer vzemimo stanje

$$|\psi\rangle = \frac{3}{5}|0\rangle + \frac{4}{5}|1\rangle. \quad (3.27)$$

Stanje je normirano, saj je  $(3/5)^2 = 0,36$  in  $(4/5)^2 = 0,64$ , torej je vsota 1. Če bi opravili meritev, ali je delec v stanju  $|0\rangle$  ali  $|1\rangle$ , na 100 popolnoma enako pripravljenih delcih, bi (najbolj verjetno) v 36 primerih dobili rezultat 0, v 64 primerih pa 1. Shematsko si lahko predstavljamo, da takšne meritve opravimo tako, da curek delcev pošljemo v merilno napravo, ki loči delce in ukloni njihovo pot v odvisnosti od stanja. Delci, ki letijo iz škatle, pristanejo na zaslonu v dveh različnih točkah, odvisno od

njihovega kvantnega stanja. Ker so delci, ki ustrezajo različnim kvantnim stanjem  $|0\rangle$  ali  $|1\rangle$ , prostorsko ločeni na celotni poti do zaslona, med seboj po izhodu iz merilne naprave ne morejo več interferirati, zato je njihova trajektorija (»gor« ali »dol«) že klasična informacija, torej rezultat meritve.



**Slika 3.2.** Meritev v kvantni mehaniki: kvantno stanje pomerimo tako, da delcu spremenimo trajektorijo skozi merilno napravo v odvisnosti od njegovega stanja.

### 3.9 Meritve v klasični in v kvantni mehaniki

V klasični fiziki lastnosti sistema obstajajo neodvisno od meritve, so elementi realnosti, spremenljivke, ki povsem opišejo sistem. Meritev jih le razkrije. Primer je položaj delca, ki je dobro določen ne glede na to, ali je sistem opazovan (»Luna obstaja, tudi če je nihče ne opazuje.«).

V kvantni mehaniki vektor stanja določa verjetnosti, da bomo pri meritvi dobili določen rezultat. »Merljive lastnosti« sistema nimajo neodvisnega obstoja, saj sam postopek meritve vpliva na realnost. Pomembno je poudariti, da dva delca iz množice lahko dasta različna rezultata, čeprav sta opisana pred vhomom v merilno napravo s povsem enakim vektorjem stanja  $|\psi\rangle$  in se pred meritvijo v prav ničemer ne razlikujeta. *Kvantna nedoločenost* je bistvena lastnost kvantnomehanskih sistemov.

V začetku razvoja kvantne mehanike so poskušali razviti *teorije skritih spremenljivk*. Predpostavljali so, da kvantno stanje ni popoln opis, temveč da obstajajo dodatne »skrite« spremenljivke, in da kvantna mehanika ni pravilna oziroma popolna, temveč da bi kompletna teorija morala biti *deterministična*, ne pa *verjetnostna*. Verjetnostna interpretacija kvantne mehanike je motila, denimo, A. Einsteina (»Bog ne kocka.«). Einstein, Podolski in Rosen so leta 1935 predlagali miselni eksperiment, ki naj bi pokazal absurdnost kvantne mehanike. Bell je kasneje, leta 1964, izpeljal neenačbe, ki opredeljujejo največjo mero korelacij v klasični teoriji ob predpostavki *lokalnega realizma* (lokalnost: na predmet vpliva samo njegova neposredna okolica; realizem: predmeti imajo lastnosti neodvisno od meritve). Eksperimentalni test je kasneje pokazal, da so Bellove neenačbe kršene, kar pomeni, da ni skritih spremenljivk in da je hipoteza lokalnega realizma napačna (glej razdelek 6.8).



### 3.10 Opazljivke in operatorji

Oglejmo si bolj podrobno, kako proces meritve v kvantni mehaniki opišemo formalno matematično. Vsaki merljivi količini (rečemo tudi fizikalni *opazljivki*) bomo priredili ustrezen linearni operator. *Operator*  $A$  je ukaz, ki deluje na vektor  $|\psi\rangle$  in kot rezultat vrne nek drug vektor  $|\phi\rangle$ , torej  $A|\psi\rangle = |\phi\rangle$ . Operatorju zato rečemo tudi *preslikava*. Operator je linearen, če velja

$$A\left(\sum_{i=1}^n a_i |e_i\rangle\right) = \sum_{i=1}^n a_i A(|e_i\rangle), \quad (3.28)$$

kjer so  $a_i$  konstante,  $|e_i\rangle$  pa tvorijo ortonormirano bazo za  $n$ -dimenzionalni Hilbertov prostor. Linearen operator je povsem definiran s svojim delovanjem na bazne vektorje. Pogoj linearnosti operatorjev je ključen v kvantni mehaniki, sicer ne bi veljalo načelo superpozicije.

Linearne operatorje lahko opišemo z njihovo *matrično upodobitvijo* (reprezentacijo). Naj velja

$$A|e_j\rangle = \sum_{i=1}^n A_{ij} |e_i\rangle. \quad (3.29)$$

Z matriko  $A_{ij}$ , ki ima  $n \times n$  elementov, smo delovanje operatorja povsem opredelili; obstaja ekvivalenca med operatorji in matrikami. Pogosto je bolj pripravno računati z matrikami kot z abstraktnimi operatorji.

**Primer:** V vektorskem prostoru dvonivojskega sistema naj za operator  $A$  velja  $A|0\rangle = |1\rangle$  in  $A|1\rangle = |0\rangle$ . Matrika operatorja je očitno

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.30)$$

Obstaja operator *identiteta*, ki vrne vektor nespremenjen  $\mathbb{I}|\psi\rangle = |\psi\rangle$ . Ker po definiciji velja  $\mathbb{I}|0\rangle = |0\rangle$ ,  $\mathbb{I}|1\rangle = |1\rangle$ , je

$$\mathbb{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (3.31)$$

To je torej kar enotska matrika.

V Diracovem bra-ket zapisu lahko zvezo med operatorjem in matrično upodobitvijo zapišemo tudi kot

$$A = \sum_{ik} |e_i\rangle A_{ik} \langle e_k|. \quad (3.32)$$

Izraz je popolnoma ekvivalenten izrazu (3.29). Preverimo: z desno stranjo enačbe (3.32) delujemo na  $|e_j\rangle$ . Dobimo

$$\begin{aligned} A|e_j\rangle &= \sum_{ik} |e_i\rangle A_{ik} \langle e_k|e_j\rangle = \sum_{ik} |e_i\rangle A_{ik} \delta_{kj} \\ &= \sum_{ik} |e_i\rangle A_{ij} \delta_{kj} = \sum_i |e_i\rangle A_{ij}, \end{aligned} \quad (3.33)$$

kar je enako desni strani enačbe (3.29). Pri dokazu smo upoštevali, da tvorijo  $|e_j\rangle$  ortonormirano bazo (vrstica 2), da je  $k = j$  pri od nič različnih prispevkih (vrstica 3), in da je  $\sum_k \delta_{kj} = 1$ , ker je vedno en sam  $\delta_{kj}$  (tisti pri  $k = j$ ) enak ena, vsi ostali pa nič (vrstica 4).

### 3.11 Hermitska konjugacija

Pomembna operacija v linearni algebri je *hermitska konjugacija* operatorja  $A$ , ki jo označimo z  $A^\dagger$  in je definirana preko skalarnega produkta z

$$(|a\rangle, A|b\rangle) = (A^\dagger|a\rangle, |b\rangle) = (|b\rangle, A^\dagger|a\rangle)^* \quad (3.34)$$

ali v Diracovem zapisu

$$\langle a|A|b\rangle = (\langle b|A^\dagger|a\rangle)^*. \quad (3.35)$$

Znak  $\dagger$  imenujemo *bodalo*. Hermitska konjugacija je posplošitev pojma kompleksne konjugacije kompleksnih števil na operatorje in matrike. V matričnem zapisu hermitsko konjugacijo dosežemo s transpozicijo in kompleksno konjugacijo matričnih elementov:

$$(A^\dagger)_{ij} = (A^*)_{ij}^T = A_{ji}^*. \quad (3.36)$$

**Primer:**

$$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}^\dagger = \begin{bmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{bmatrix}. \quad (3.37)$$

Velja  $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$  in  $(A^\dagger)^\dagger = A$ . Definiramo lahko še  $|v\rangle^\dagger = \langle v|$ . Potem smemo zapisati  $(A|v\rangle)^\dagger = \langle v|A^\dagger$ .

*Hermitski* (ali *sebi-adjungirani*) operatorji so tisti, za katere velja  $A^\dagger = A$ . Hermitski operatorji so posplošitev pojma realnih števil, ki so enaka svojim kompleksno konjugiranim vrednostim ( $z = \bar{z} \rightarrow z \in \mathcal{R}$ ), na operatorje.

Sedaj lahko zapišemo

#### postulat 2

I V kvantni mehaniki opazljivkam ustrezajo hermitski operatorji.

## 3.12 Operatorji za spin

Kot konkreten primer si oglejmo operatorje za spin elektrona. Elektron je fermion z  $S = 1/2$ , kar ustreza dvonivojskemu sistemu s stanjema  $|\uparrow\rangle$  in  $|\downarrow\rangle$ . Hilbertov prostor je dvodimenzionalen, zato lahko operatorje za komponente vrtilne količine  $S_x$ ,  $S_y$  in  $S_z$  zapišemo z nekimi  $2 \times 2$  matrikami. Pravo izbiro je našel Pauli okoli leta 1925:

$$S_x = \begin{bmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{2}\sigma_x, \quad S_y = \begin{bmatrix} 0 & -i/2 \\ i/2 & 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{2}\sigma_y, \quad S_z = \begin{bmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{bmatrix} = \frac{1}{2}\sigma_z. \quad (3.38)$$

Uvedli smo hermitske matrike  $\sigma$ , ki se imenujemo *Paulijeve matrike*:

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (3.39)$$

Včasih k naboru Paulijevih matrik dodamo še identiteto  $\mathbb{I}$ , ki jo tedaj označimo z  $\sigma_0$ . Paulijeve matrike so izjemno pomembne v kvantnem računalništvu.

## 3.13 Lastna stanja, lastne vrednosti

Problem lastnih vrednosti je iskanje vektorjev  $|v\rangle$  in vrednosti  $\lambda$ , da za operator  $A$  velja

$$A|v\rangle = \lambda|v\rangle. \quad (3.40)$$

Takšen  $|v\rangle$  se imenuje *lastni vektor*, vrednost  $\lambda$  pa *lastna vrednost*. Učinek  $A$  na  $|v\rangle$  je torej, da lastni vektor zgolj podaljša ali skrajša, ne spremeni pa mu smeri.

Rezultat meritve količine, opisane z operatorjem  $A$ , je ena izmed njegovih lastnih vrednosti (glej naslednji razdelek 3.14 o Bornovem pravilu). Ker je rezultat meritve realna količina, morajo biti vse lastne vrednosti operatorja realne. Hermitski operatorji ta pogoj izpolnjujejo.

Linearno neodvisnih lastnih vektorjev hermitskega operatorja je toliko, kot je dimenzija Hilbertovega prostora. Lastni vektorji za različne lastne vrednosti so ortogonalni. Iz njih lahko tvorimo ortonormirano bazo. Lastna vrednost  $\lambda$  je lahko enaka za več lastnih vektorjev; rečemo, da je takšna lastna vrednost *degenerirana*.

Lastne vrednosti najlažje določimo za diagonalne matrike, pri katerih so vsi izven-diagonalni matrični elementi enaki nič. Lastne vrednosti so kar diagonalni elementi, pripadajoči lastni vektorji pa so bazni vektorji. Primer je matrika  $\sigma_z$ . Obstajata dva lastna vektorja, eden pripada lastni vrednosti  $\lambda = 1$ , drugi lastni vrednosti  $\lambda = -1$ , saj velja

$$\sigma_z \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = +1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \text{in} \quad \sigma_z \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = -1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (3.41)$$

V splošnem pa lastne vrednosti določamo s *karakteristično enačbo*  $\det(A - \lambda\mathbb{I}) = 0$ , ki je polinom reda enakega dimenziji matrike. Množica vseh lastnih vrednosti se imenuje *spekter* operatorja. Za velike matrike lastne vrednosti računamo numerično.

**Primer:**  $\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ . Velja  $\sigma_x - \lambda \mathbb{I} = \begin{bmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{bmatrix}$ , torej  $\det(A - \lambda \mathbb{I}) = \lambda^2 - 1 = 0$ . Lastni vrednosti sta dve,  $\lambda_1 = 1$  in  $\lambda_2 = -1$ . Lastne vektorje nato določimo tako, da rešujemo sistem  $A|v\rangle = \lambda|v\rangle$ . Za  $\lambda_1 = 1$  dobimo

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \rightarrow x = y, \quad \text{torej} \quad |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (3.42)$$

Vrednost  $x$  smo izbrali tako, da je lastni vektor normiran na 1. Za  $\lambda_2 = -1$  pa dobimo

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \rightarrow x = -y, \quad \text{torej} \quad |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}. \quad (3.43)$$

Določanje lastnih vrednosti in lastnih vektorjev imenujemo tudi *diagonalizacija matrice*, saj ob spremembi baze iz standardne baze v bazo lastnih vektorjev postane matrika operatorja diagonalna. Bra-ket zapis operatorja v diagonalni bazi je

$$A = \sum_{i=1}^n \lambda_i |i\rangle \langle i|, \quad (3.44)$$

pri čemer morajo biti lastni vektorji  $|i\rangle$  ortonormirani. Temu zapisu rečemo tudi *razvoj operatorja po lastnih stanjih*.

**Primer:** Preverimo to za  $\sigma_x$ . Res velja

$$1 \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} [1 \quad 1] - 1 \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} [1 \quad -1] = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} - \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

### 3.14 Bornovo pravilo

Zanima nas opazljivka, ki jo opisuje hermitski operator  $A = \sum_{i=1}^n \lambda_i |i\rangle \langle i|$ .

#### postulat 3: Bornovo pravilo

Pri meritvi opazljivke  $A$  v stanju  $|\psi\rangle$  bomo dobili rezultat  $\lambda_j$  z verjetnostjo

$$p_j = |\langle j|\psi\rangle|^2. \quad (3.45)$$

Z drugimi besedami: če je  $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n c_i |i\rangle$ , tako da velja  $\sum_{i=1}^n |c_i|^2 = 1$ , potem je  $p_j = |c_j|^2$ .

Če izmerimo spin elektrona vzdolž poljubne smeri, bo rezultat vedno  $+1/2$  ali  $-1/2$ , saj imajo vsi trije operatorji  $S_x$ ,  $S_y$  in  $S_z$  enaki lastni vrednosti,  $\pm 1/2$ .

**Primer:** Naj bo sistem v stanju

$$|\psi\rangle = |\uparrow\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (3.46)$$

Če opravimo meritev z aparatom Sterna in Gerlacha s poljem v smeri osi  $z$ , je ustrezna opazljivka

$$S_z = \begin{bmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} |\uparrow\rangle \langle\uparrow| - \frac{1}{2} |\downarrow\rangle \langle\downarrow|. \quad (3.47)$$

Takoj vidimo, da je  $p_{\uparrow} = 1$  in  $p_{\downarrow} = 0$ .

Če pa opravimo meritev s poljem v smeri osi  $x$  na sistemu v istem stanju, je ustrezna opazljivka

$$S_x = \begin{bmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} |+\rangle \langle+| - \frac{1}{2} |-\rangle \langle-|, \quad (3.48)$$

kjer smo lastni stanji označili z

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \quad \text{in} \quad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle). \quad (3.49)$$

Po Bornovem pravilu ugotovimo, da je

$$p_+ = |\langle+|\psi\rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle\uparrow| + \langle\downarrow|) |\psi\rangle \right|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2}, \quad (3.50)$$

in

$$p_- = |\langle-|\psi\rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle\uparrow| - \langle\downarrow|) |\psi\rangle \right|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2}. \quad (3.51)$$

Ta primer je zelo poučen, saj kaže na to, kako močno so rezultati meritve odvisni od orientacije magnetnega polja. Stanje  $|\uparrow\rangle$ , ki je lastno stanje operatorja  $S_z$ , se v bazi lastnih stanj operatorja  $S_x$  zapiše kot superpozicija lastnih stanj  $|+\rangle$  in  $|-\rangle$ , saj velja

$$|\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle), \quad (3.52)$$

zato je tudi rezultat meritve 50 % verjetnosti za odklon v smer  $+x$  in 50 % za odklon v smer  $-x$ .

Pogosto nas ne zanimajo verjetnosti za posamezne izide meritve operatorja  $A$ , temveč zgolj povprečna (oziroma, bolj natančno, pričakovana) vrednost izida, če enako meritev velikokrat ponovimo, kar zapišemo kot

$$\langle A \rangle = \sum_i \lambda_i p_i, \quad (3.53)$$

kjer so  $p_i$  verjetnosti za izide  $\lambda_i$ . Z uporabo Bornovega pravila lahko pokažemo, da za *pričakovano vrednost* opazljivke  $A$ ,  $\langle A \rangle$ , velja

$$\langle A \rangle = \sum_i \lambda_i |\langle i|\psi\rangle|^2 = \sum_i \lambda_i \langle\psi|i\rangle \langle i|\psi\rangle = \langle\psi| \left( \sum_i \lambda_i |i\rangle \langle i| \right) |\psi\rangle = \langle\psi| A |\psi\rangle. \quad (3.54)$$

Upoštevali smo, da je  $|z|^2 = z^*z$ , ter lastnost skalarnega produkta  $\langle a|b\rangle = (\langle b|a\rangle)^*$ , nato smo samo preuredili izraz, na koncu pa upoštevali razvoj operatorja  $A$  po lastnih vrednostih.

Pri meritvi spina v smeri  $x$  stanja  $|\uparrow\rangle$  je tako pričakovana vrednost meritve

$$\langle \uparrow | S_x | \uparrow \rangle = [1 \quad 0] \begin{bmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = [1 \quad 0] \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 0. \quad (3.55)$$

### 3.15 Faze verjetnostnih amplitud

Ker verjetnosti pri meritvah računamo kot absolutne vrednosti verjetnostnih amplitud  $\alpha$  in  $\beta$ , se pojavi vprašanje, ali so razlike v predznakih oziroma fazah sploh pomembne. Vzemimo primer dveh stanj

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \frac{3}{5} |0\rangle + \frac{4}{5} |1\rangle, \\ |\psi_2\rangle &= \frac{3}{5} |0\rangle - \frac{4}{5} |1\rangle. \end{aligned} \quad (3.56)$$

V obeh primerih je 36 % verjetnost, da bomo sistem našli v stanju  $|0\rangle$  in 64 % v stanju  $|1\rangle$ . Pa vendar se stanji močno razlikujeta! Zadostuje, da pomerimo v kakšni drugi bazi, recimo  $|+\rangle$  in  $|-\rangle$ . Za prvo stanje dobimo verjetnosti

$$\begin{aligned} p_+ &= \left| \frac{3}{5} \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{4}{5} \frac{1}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{49}{50}, \\ p_- &= \left| \frac{3}{5} \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{4}{5} \frac{1}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{50}, \end{aligned} \quad (3.57)$$

za drugo stanje pa ravno obratno,  $p_+ = 1/50$  in  $p_- = 49/50$ .

Omenimo še, da po drugi strani »globalne« faze kvantnih stanj nimajo popolnoma nobenega vpliva na meritev. Imejmo stanji  $|\psi_1\rangle$  in  $|\psi_2\rangle = e^{i\phi} |\psi_1\rangle$ , ki se razlikujeta zgolj v globalni fazi  $\phi$ . Velja

$$|\langle i|\psi_2\rangle|^2 = |\langle i|e^{i\phi} |\psi_1\rangle|^2 = |e^{i\phi} \langle i|\psi_1\rangle|^2 = |e^{i\phi}|^2 |\langle i|\psi_1\rangle|^2 = |\langle i|\psi_1\rangle|^2, \quad (3.58)$$

torej dasta po Bornovem pravilu obe stanji povsem identične rezultate pri čisto vseh meritvah. Fazne razlike med posameznimi verjetnostnimi amplitudami pa so pomembne. Denimo pri  $|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta e^{i\phi} |1\rangle$  lahko *relativno fazo*  $\phi$  določimo v interferenčnih poskusih. Če povzamemo, pri stanju

$$\alpha e^{i\phi_\alpha} |0\rangle + \beta e^{i\phi_\beta} |1\rangle = e^{i\phi_\alpha} \left( \alpha |0\rangle + \beta e^{i(\phi_\beta - \phi_\alpha)} |1\rangle \right) \quad (3.59)$$

ima merljive posledice samo razlika faz  $\phi_\beta - \phi_\alpha$ , ne pa posamezni fazi  $\phi_\alpha$  in  $\phi_\beta$ .

## 3.16 Kubit

*Bit* je količina informacije, ki jo nosi klasični sistem z dvema stanjema, ki ju označimo z binarnima vrednostima 0 in 1. Primeri so številni: dve različni napetosti v digitalni logiki, dve smeri magnetizacije v magnetnem mediju, vtisnjene luknjice na zgoščenci, naboj na kondenzatorju v pomnilnikih DRAM, položaj klecnega stikala in podobno. Opazimo, da je konkretna informacija vedno vezana na svojo fizično reprezentacijo. To pomeni, da je vezana na zakone fizike. To velja tudi za obdelavo podatkov: če nek predlagani algoritem krši zakone fizike, potem zagotovo ni izvedljiv.

*Kubit* je pojem, vpeljan kot mera za *kvantno informacijo*. Kubit je namreč količina informacije, ki jo nosi kvantni dvonivojski sistem. Kubit lahko obravnavamo kot abstrakten matematični pojem ali kot opis stanja konkretnega fizičnega dvonivojskega sistema.

Klasični bit ima lahko dve vrednosti, 0 ali 1. Podobno je lahko kubit v stanjih  $|0\rangle$  ali  $|1\rangle$ , lahko pa je tudi v poljubni linearni kombinaciji obeh,

$$\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \quad (3.60)$$

z  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ , kar je ključna razlika med bitom in kubitom.

Koliko spremenljivk potrebujemo, da popolnoma opredelimo kubit?  $\alpha$  in  $\beta$  sta kompleksni spremenljivki, torej imamo štiri realne količine. Zaradi normalizacije mora veljati  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ , torej ena prostostna stopnja odpade. Zapišemo lahko

$$|\alpha| = \cos(\theta/2), \quad |\beta| = \sin(\theta/2). \quad (3.61)$$

Torej je  $\alpha = e^{i\phi_a} \cos(\theta/2)$  in  $\beta = e^{i\phi_b} \sin(\theta/2)$ , kjer sta  $\phi_a$  in  $\phi_b$  dve fazi. Videli smo že, da globalne faze niso merljive, zato vpeljemo razliko faz  $\phi = \phi_b - \phi_a$  in fiksiramo globalno fazo, tako da velja

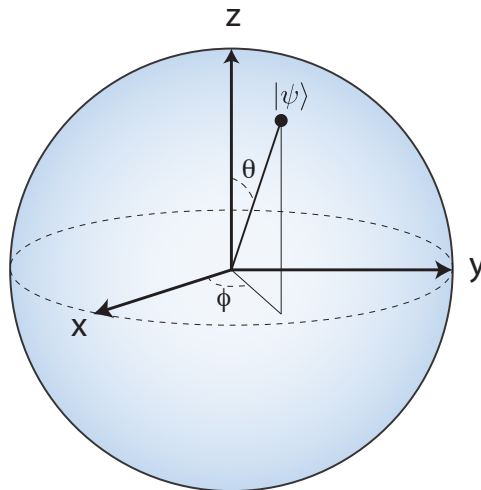
$$\alpha = \cos(\theta/2), \quad \beta = e^{i\phi} \sin(\theta/2), \quad (3.62)$$

torej je

$$|\psi\rangle = \cos(\theta/2) |0\rangle + e^{i\phi} \sin(\theta/2) |1\rangle. \quad (3.63)$$

Obstajata natanko dva prosta parametra, kota  $\theta$  in  $\phi$ . Stanje lahko prikažemo kot točko na krogelni lupini, ki jo imenujemo *Blochova sfera*, slika 3.3. Kota  $\phi$  in  $\theta$  sta ravno *azimut* in *polarni kot* v krogelnem koordinatnem sistemu. Severni pol  $\theta = 0$  je stanje  $|0\rangle$ , južni pol  $\theta = \pi$  pa stanje  $|1\rangle$ .

Vsaka točka na sferi predstavlja možno stanje kubita. Čeprav je na površini sfere neskončno mnogo točk, to ne pomeni, da je možno s kubitom shraniti neskončno veliko klasične informacije. Omejitev je namreč merjenje v kvantni mehaniki. Ob meritvi stanja enega spina v smeri osi  $z$  sta možna zgolj dva izida. Skrita informacija se ob meritvi izgubi zaradi *kolapsa valovne funkcije* (glej spodaj). Če lahko pripravimo neskončno veliko identičnih kubitov, lahko opravimo veliko meritev v različnih smereh in tako izluščimo vrednosti  $\alpha$  in  $\beta$ ; postopek se imenuje *kvantna tomografija*. Če pa imamo v posesti zgolj en kubit, lahko opravimo eno samo meritev in fazna informacija ostane skrita.



**Slika 3.3.** Blochova sfera in točka, ki ustreza stanju  $|\psi\rangle = \cos(\theta/2)|0\rangle + e^{i\phi}\sin(\theta/2)|1\rangle$ .

### 3.17 Kolaps valovne funkcije

Bornovo pravilo dopolnimo:

#### postulat 4

Če pri meritvi opazljivke  $A = \sum_i \lambda_i |i\rangle \langle i|$  izmerimo vrednost  $\lambda_i$ , potem je takoj po meritvi sistem v lastnem stanju  $|i\rangle$ .

Rečemo tudi, da je meritev *destruktivna*. Po Copenhagenski (Københavnski) interpretaciji kvantne mehanike (Bohr, Heisenberg, 1924–27) opisuje valovna funkcija verjetnosti za izide. Ko meritev dejansko opravimo, vrednost merjene količine izvemo, zato negotovosti ni več in valovna funkcija doživi *kolaps* v stanje, ki ustreza izmerjeni vrednosti. Sprememba je hipna.

**Primer:** imejmo stanje  $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ . Če merimo  $\sigma_z$  in izmerimo 1, potem je takoj po meritvi sistem v stanju  $|\psi'\rangle = |0\rangle$ .

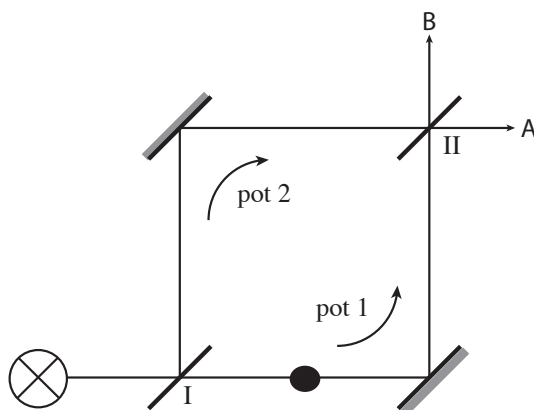
Merilne naprave so klasične. Rezultat meritve je klasična lastnost, kot je, denimo, položaj kazalca na merilnem instrumentu, ki je dobro določeno stanje in ne superpozicija, kot je možno v kvantni mehaniki. Vprašanje povezave med kvantnim in klasičnim svetom je še vedno odprto vprašanje, ki pa presega samo fiziko in je bolj filozofske narave, saj med različnimi *interpretacijami* vsaj za zdaj ne znamo eksperimentalno razlikovati. Copenhagenska interpretacija je še vedno najbolj sprejeta, gotovo pa najbolj predavana interpretacija.

Možni ugovor je, da kvantna mehanika opisuje ves svet, zato bi skupaj z merjenim kvantnim sistemom morali tudi merilno napravo in opazovalca obravnavati kvantno-mehansko. Celota bi tedaj bila deterministična. To je temelj *interpretacije številnih svetov*, po kateri se dejansko zgodijo vse možnosti, vendar se ob vsakem dogodku razveji vesolje glede na različne izide. Različna vesolja po daljšem času med seboj ne interferirajo, zato zaznamo en sam rezultat meritve.



## 3.18 Preizkuševalec bomb

Zanimiv miselni eksperiment sta predlagala Elitzur in Vaidman leta 1993. Imamo množico bomb, ki imajo zelo občutljiv detonator, saj jih aktivira že absorbcija enega samega fotona, vendar so nekatere izmed njih pokvarjene in fotona ne zaznajo. Radi bi dobili nekaj bomb, za katere bi z gotovostjo vedeli, da delujejo, ne da bi ob preizkusu eksplodirale. Je to sploh mogoče? V klasični fiziki nikakor ne.



**Slika 3.4.** Mach-Zehnderjev interferometer v postavitvi za opravljanje meritev brez interakcije. Narisan je žarek iz svetila, ki se razcepi na polprepustnem zrcalu (polne črta), potuje po dveh krakih (sivo senčeni črti sta navadni zrcali), in ponovno združi na izhodnem polprepustnem zrcalu, kjer pride do interference. A in B sta merilnika. V spodnji krak interferometra postavimo bombo (črna pika).

Poskusimo kvantno. Bombo postavimo v en krak Mach-Zehnderjevega interferometra skiciranega na sliki 3.4. To je naprava, v kateri žarek s polprepustnim zrcalom I razcepimo na dva, ki potujeta po ločenih poteh (1 in 2 na skici), nato pa se na izhodu naprave ponovno združita na polprepustnem zrcalu II in interferirata. Dolžine poti nastavimo tako, da v odsotnosti bombe vedno dobimo signal samo na merilniku A. Nato zmanjšamo intenziteto valovanja, tako da skozi napravo letijo posamezni fotoni. V spodnji krak (pot 1) postavimo bombo, ki bi jo želeli preizkusiti. Če je bomba pokvarjena, foton leti nemoteno in vedno ga zaznamo na senzorju A, kot če bombe sploh ne bi bilo. Če pa bomba deluje, pride do kolapsa valovne funkcije, ko prileti valovni paket fotona do detonatorja. Ker je foton v superpoziciji stanj (z enako verjetnostjo leti kot valovni paket v zgornjem ali v spodnjem kraku interferometra), sta možna dva izzida. Če je foton zaznan v spodnjem kraku (na poti 1), bo aktiviral bombo in jo izgubimo. Če pa foton ni zaznan v spodnjem kraku, se očitno nahaja v zgornjem kraku (na poti 2). V tem primeru do eksplozije ne pride, temveč foton leti naprej po poti 2 in se na zadnjem polprepustnem zrcalu (II) razcepi na valovna paketa, ki letita proti senzorjem A in B. Obstaja torej 50 % možnost, da dobimo signal na senzorju B. Desktruktivne interference na senzorju B, ki bi to možnost izničila, v tem primeru ni, saj foton zagotovo ni letel po spodnjem kraku (to vemo, ker ni bilo eksplozije). Vsak signal na senzorju B nam torej z gotovostjo pove, da bomba deluje. (Signal na senzorju A pa ne pomeni nujno, da je bomba pokvarjena.) Na ta način lahko torej iz

množice dobimo četrtno vseh delujočih bomb. Obstajajo bolj zapleteni postopki, s katerimi se da odbrati še večji delež.

Pomembno je poudariti, da detonator opravi meritev, ki poruši superpozicijo stanj, ni pa nujno, da je rezultat meritve, da foton obstaja na mestu detonatorja, temveč je lahko drugje. Po interpretaciji več svetov bi rekli, da vedno obstaja svet, v katerem delujoča bomba eksplodira, obstaja pa možnost, da smo mi v svetu, v katerem ni eksplodirala, vseeno pa vemo z gotovostjo, da je bomba delujoča.

Eksperiment, ki je potrdil pravilnost tega razmišljanja, je opravila skupina Zeilingerja leta 1994 (sicer brez eksplozivnih teles). Takšnim postopkom danes rečemo *meritev brez interakcije*.

### 3.19 Izrek o prepovedi kloniranja

Izrek o *prepovedi kloniranja* (angl. »no-cloning theorem«) je trditev, da ni mogoče pripraviti identične kopije nekega kvantnega stanja  $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ . Izrek sta dokazala Wootters in Zurek leta 1982. Opazovati stanja ne smemo, ker bi prišlo do kolapsa valovne funkcije in bi izgubili informacijo o amplitudah  $\alpha$  in  $\beta$ . Tudi drugi postopki kopiranja niso možni. Izrek ima globoke posledice za kvantno računalništvo in kvantno komuniciranje.

### 3.20 Schrödingerjeva enačba in stacionarna stanja

Spreminjanje kvantnega stanja s časom opisuje Schrödingerjeva enačba

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle, \quad (3.64)$$

ki igra podobno vlogo kot drugi Newtonov zakon v klasični mehaniki.  $H$  je hermitski operator, ki ustreza celotni energiji sistema (kinetična plus potencialna energija):

$$H = H_{\text{kin}} + V. \quad (3.65)$$

Imenuje se *Hamiltonov operator* (rečemo tudi hamiltonka ali hamiltonian). Njegove lastne vrednosti so energije, ki jih lahko dobimo ob meritvi celotne energije sistema. Najnižja se imenuje energija osnovnega stanja, ustrezno lastno stanje pa *osnovno stanje*; podobno je ravnovesnemu stanju v klasični fiziki. Stanja pri višjih energijah imenujemo *vzbujena stanja*. Reševanje problema lastnih vrednosti

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (3.66)$$

je osrednji problem kvantne mehanike.

Oblika hamiltonke je odvisna od lastnosti obravnavanega sistema (mas delcev, interakcij med njimi). Običajno jo dobimo tako, da v izrazu za energijo iz klasične mehanike klasične količine nadomestimo z ustreznimi operatorskimi.

Če operator  $H$  ni odvisen od časa, je splošna rešitev za časovno odvisnost stanja

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle, \quad (3.67)$$

v kar se zlahka prepričamo z odvajanjem po času. Operator  $U = e^{-iHt/\hbar}$  je unitaren (glej razdelek 4.7). Ker pa je  $H$  operator in ne navadno število, je potrebno eksponentno funkcijo pravilno tolmačiti in biti pazljiv pri računanju. Funkcije operatorjev računamo tako, da razvijemo izraz v Taylorjevo vrsto. Razvoj eksponentne funkcije je

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots, \quad (3.68)$$

kjer je  $n! = 1 \times 2 \times \dots \times n$  funkcija fakulteta, torej je

$$|\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle + \left(\frac{-it}{\hbar}\right) H |\psi(0)\rangle + \frac{1}{2!} \left(\frac{-it}{\hbar}\right)^2 H^2 |\psi(0)\rangle + \dots \quad (3.69)$$

Najbolj enostaven primer je, kadar je  $|\psi(0)\rangle$  lastno stanje hamiltonke z energijo  $E$ , saj tedaj velja  $H |\psi(0)\rangle = E |\psi(0)\rangle$ ,  $H^2 |\psi(0)\rangle = E^2 |\psi(0)\rangle$ , itd., in sledi

$$|\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle + \left(\frac{-iEt}{\hbar}\right) |\psi(0)\rangle + \frac{1}{2!} \left(\frac{-iEt}{\hbar}\right)^2 |\psi(0)\rangle + \dots = e^{-iEt/\hbar} |\psi(0)\rangle, \quad (3.70)$$

kjer smo vrsto sešteli nazaj v eksponentno funkcijo, katere argument je sedaj število. Izraz  $|\psi(t)\rangle = e^{-iEt/\hbar} |\psi(0)\rangle$  pomeni, da se pri lastnih stanjih s časom spreminja le faza. Ker pa globalna faza ni pomembna, je sistem pravzaprav ves čas v istem stanju, zato lastna stanja energije imenujemo tudi *stacionarna stanja*.

Če sta  $|\psi_1\rangle$  in  $|\psi_2\rangle$  stacionarni stanji,  $H |\psi_1\rangle = E_1 |\psi_1\rangle$  in  $H |\psi_2\rangle = E_2 |\psi_2\rangle$ , potem za linearno kombinacijo  $|\psi(0)\rangle = \alpha |\psi_1\rangle + \beta |\psi_2\rangle$  velja

$$|\psi(t)\rangle = \alpha e^{-iE_1 t/\hbar} |\psi_1\rangle + \beta e^{-iE_2 t/\hbar} |\psi_2\rangle. \quad (3.71)$$

Ob poljubnem času še vedno velja, da z verjetnostjo  $p = |\alpha|^2$  dobimo energijo  $E_1$ , z verjetnostjo  $p = |\beta|^2$  pa  $E_2$ , zato je pričakovana vrednost energije  $\langle H \rangle = |\alpha|^2 E_1 + |\beta|^2 E_2$ . Če sta energiji  $E_1$  in  $E_2$  različni, potem se s časom spreminja relativna faza  $(E_1 - E_2)t/\hbar$  med stanjema  $|\psi_1\rangle$  in  $|\psi_2\rangle$ , kar ima merljive posledice. Superpozicija lastnih stanj energije torej ni stacionarno stanje.

## 3.21 Dinamika dvonivojskega sistema

Oglejmo si preprost primer: spin v magnetnem polju. Pomemben je za razumevanje tehnik, kot sta *elektronska paramagnetna resonanca* (EPR) in *jedrska magnetna resonanca* (JMR, angl. NMR), uporabnih v različnih znanstvenih vedah (fiziki, kemiji, biologiji), v medicini za slikanje mehkih tkiv ter v kvantnem računalništvu.

Energija magnetnega dipola z momentom  $\boldsymbol{\mu}$  v polju  $\mathbf{B}$  je

$$E = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}, \quad (3.72)$$

spinski magnetni dipolni moment elektrona pa je (glej razdelek 3.6)

$$\boldsymbol{\mu} = g_s \frac{-e_0}{2m_e} \boldsymbol{\Gamma} = -g_s \frac{e_0 \hbar}{2m_e} \mathbf{S} = -g_s \mu_B \mathbf{S}. \quad (3.73)$$

Uvedena količina  $\mu_B$  se imenuje Bohrov magneton,

$$\mu_B = \frac{e_0 \hbar}{2m_e} = 9,27 \times 10^{-24} \text{ J/T} = 5,8 \times 10^{-5} \text{ eV/T}. \quad (3.74)$$

Velja še  $g_s \approx 2$ . Hamiltonov operator za elektronski spin v polju je torej

$$\begin{aligned} H &= -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = \frac{g_s \mu_B}{2} (B_x \sigma_x + B_y \sigma_y + B_z \sigma_z) \\ &= \frac{g_s \mu_B}{2} \left( B_x \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} + B_y \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} + B_z \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \right) \\ &= \frac{g_s \mu_B}{2} \begin{bmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (3.75)$$

Produkt  $\mu_B B$ , kjer je  $B = |\mathbf{B}|$ , ima enoto energije. Definirajmo  $\hbar\omega_0 \equiv g_s \mu_B B$ . Energija  $\hbar\omega_0$  se imenuje *Zeemanova energija*, frekvenca  $\omega_0$  pa *Larmorjeva frekvenca*. Če je polje usmerjeno vzdolž osi  $z$ , se enačba (3.75) poenostavi:

$$H = \frac{\hbar\omega_0}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (3.76)$$

Lastni stanji z energijama  $E_\uparrow = \hbar\omega_0/2$  in  $E_\downarrow = -\hbar\omega_0/2$  sta kar  $|\uparrow\rangle$  in  $|\downarrow\rangle$ .

Izberimo za začetno stanje poljubno točko na Blochovi sferi:

$$|\psi(0)\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} |\uparrow\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{+i\phi/2} |\downarrow\rangle. \quad (3.77)$$

Izkoristili smo svobodno izbiro globalne faze (standardni izraz smo pomnožili z  $e^{-i\phi/2}$ ), da bi dobili bolj simetričen zapis. Časovni razvoj je, po enačbi (3.71),

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} e^{-iE_\uparrow t/\hbar} |\uparrow\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi/2} e^{-iE_\downarrow t/\hbar} |\downarrow\rangle \\ &= \cos \frac{\theta}{2} e^{-i(\phi+\omega_0 t)/2} |\uparrow\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i(\phi+\omega_0 t)/2} |\downarrow\rangle, \end{aligned} \quad (3.78)$$

torej velja  $\theta(t) = \theta$ ,  $\phi(t) = \phi + \omega_0 t$ . Takšno kroženje po Blochovi sferi vzdolž geografskega vzporednika  $\theta$  imenujemo *Larmorjeva precesija*.

Oglejmo si pričakovane vrednosti operatorjev spina v odvisnosti od časa:

$$\begin{aligned} \langle S_z \rangle &= \langle \psi(t) | \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} | \psi(t) \rangle = \\ &= \left[ \cos \frac{\theta}{2} e^{i(\phi+\omega_0 t)/2} \quad \sin \frac{\theta}{2} e^{-i(\phi+\omega_0 t)/2} \right] \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i(\phi+\omega_0 t)/2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i(\phi+\omega_0 t)/2} \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \left( \cos^2 \frac{\theta}{2} - \sin^2 \frac{\theta}{2} \right) = \frac{1}{2} \cos \theta, \end{aligned} \quad (3.79)$$

in

$$\begin{aligned}
 \langle S_x \rangle &= \langle \psi(t) | \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} | \psi(t) \rangle \\
 &= \left[ \cos \frac{\theta}{2} e^{i(\phi+\omega_0 t)/2} \quad \sin \frac{\theta}{2} e^{-i(\phi+\omega_0 t)/2} \right] \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-(\phi+\omega_0 t)/2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i(\phi+\omega_0 t)/2} \end{bmatrix} \quad (3.80) \\
 &= \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} \left[ e^{i(\phi+\omega_0 t)} + e^{-i(\phi+\omega_0 t)} \right] = \frac{1}{2} \sin \theta \cos(\phi + \omega_0 t).
 \end{aligned}$$

Podobno dobimo še

$$\langle S_y \rangle = \frac{1}{2} \sin \theta \sin(\phi + \omega_0 t). \quad (3.81)$$

Pričakovane vrednosti  $\langle S_x \rangle$ ,  $\langle S_y \rangle$  in  $\langle S_z \rangle$  se obnašajo natanko tako kot komponente klasične vrtilne količine, ki precedira.

Larmorjeva precesija je ključnega pomena pri meritvah z jedrsko magnetno resonanco. Larmorjeva frekvenca  $\omega_0$  je neodvisna od kota  $\theta$ , ima pa majhne popravke zaradi okolice magnetnega jedra (*kemijski premik*), zato lahko iz premikov določimo strukturo molekul.