

Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова



Конспект лекций по основам квантовой физики и квантовых вычислений

Лектор: Емельянов В.И.

Конспект подготовлен:

Гусейнов А.Т.

Косовец Д.А.

Петрушкина А.А.

Константинов Д.Н.

Москва 2009

Вступление

Данный документ является конспектом лекций по основам квантовой физики и квантовых вычислений, читаемых Емельяновым Владимиром Ильичом в 2009 году.

Это последний курс в области физического образования. Лектор надеется, что он будет небезынтересен. В последние годы в области информации произошли революционные изменения, появилось понятие квантовой информации. Именно в аспекте квантовой информации и будет направлен данный курс. Он позволит понять, как работают квантовые приборы, а в настоящий момент даже созданы серийные коммерческие квантовые устройства.

А понять это невозможно без развития квантовой интуиции, которая радикально отличается от нашей обычной интуиции. Курс в первую очередь направлен именно на это развитие.

По окончании курса будет зачет, в мае. Поскольку число слушателей огромно (приближается к 400), будет организована проверка посещаемости, а посещаемость приравнена к успеваемости. Те, кто будут фигурировать в списках, представят конспект и, ответив на пару вопросов из теоретического минимума, получают зачет автоматом. Большинство успешно проходит этот тест. Но всегда есть хвост — порядка 150 человек. Этот хвост тянется в течение всего мая, бывает, приходят по 3 раза.

Оглавление

1		5
1.1	Введение в квантовую механику	5
1.2	Квантовая теория информации	6
1.3	Биты и кубиты	7
1.3.1	Частица как материальная точка	7
1.3.2	Частица как волна	8
1.4	Дифракция микрочастиц	9
2		15
2.1	Соотношение неопределенности	15
2.2	Второй постулат квантовой механики	18
2.2.1	Оператор координат	18
2.2.2	Оператор импульса	18
2.2.3	Остальные операторы	19
2.3	Важные свойства операторов квантовой механики	20
2.4	Совместные физические величины	20
2.5	Уравнение Шредингера	21
2.6	Стационарные системы	22
2.7	Алгоритм нахождения волновой функций	23
3		25
3.1	Бесконечная потенциальная яма	25
3.1.1	В классической физике	25
3.1.2	В квантовой физике	26
3.2	Конечная потенциальная яма	27
3.3	Туннелирование через барьер	29
3.3.1	Пример из жизни	30
4		31
4.1	Движение электрона в твердом теле	31
4.1.1	Волновая функция электрона в кристаллической решетке	31
4.1.2	Энергетический спектр электрона в кристаллической решетке	35
4.2	Разрешенные и запрещенные зоны	38
4.2.1	Металлы, полупроводники и диэлектрики	38

4		Оглавление
5		41
5.1	Транзистор	41
5.2	Электроны и дырки в полупроводниках	41
5.3	Легирование полупроводников. Доноры и акцепторы.	43
5.4	Энергия ионизации примесного центра.	44
5.5	Принципы работы р-п перехода и транзистора	46
5.6	Реализация бита транзистором в классическом компьютере	47
6		49
6.1	Атом водорода	49
6.2	Понятие кубита	54
7		57
7.1	Орбитальный магнитный момент	57
7.2	Спин	60
7.3	Матричная формулировка	61
8		63
9		69
9.1	Теория квантовых измерений	72
10		75

Лекция 1

1.1 Введение в квантовую механику

Квантовая механика как принципиально новая схема родилась в самом начале 20 века с появлением формулы Планка. Интенсивное развитие началось в 20-х гг., когда физика перешла к исследованию микроскопического мира, где размеры имеют порядок 1 ангстрем¹, то бишь к электронам, атомам, молекулам. Возникли противоречия между классической физикой и экспериментом. Физики долго пытались разрешить противоречия в рамках классической физики.

Гипотеза Планка. Квант энергии, энергия определяется постоянной Планка. Порядка 10^{-27} эрг·сек.

Но какой объект считать микроскопическим? Рассмотрим атом водорода, электрон локализован в пространстве порядка $r \sim 10^{-8}$ см (радиус Бора) и движется по орбите. Его скорость можно оценить, она получится порядка $v \sim 10^8$ см/сек. Масса электрона $m \sim 9,1 \cdot 10^{-28}$ г, то есть около 10^{-27} г.

Введем понятие действия. Действием называют произведение импульса на радиус локализации:

$$\vec{v} \cdot m \cdot r = \vec{p}r$$

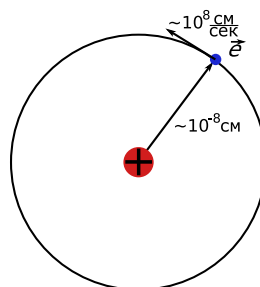


Рис. 1.1: Атом водорода

Посчитав действие для электрона получим результат порядка 10^{-27} , а это порядок постоянной Планка. Если действие порядка постоянной Планка, то такая частица должна описываться в терминах квантовой механики, иначе, если действие существенно больше, то это макрообъект и он описывается в терминах классической механики. Возьмем, например, объект с $\vec{v} \sim 1$ см/сек, $m \sim 1$ г, $r \sim 1$ см. Его действие будет около 1 эрг·сек $\gg \hbar$, то есть перед нами типичный макрообъект.

¹1 ангстрем = 10^{-10} м, что приблизительно равно размеру атома водорода.

1.2 Квантовая теория информации

Начала развиваться с середины 1990. Представление об этой области дает следующая схема:

- Квантовая механика. Это основа всех нижеперечисленных наук, идейный багаж и математический аппарат.
 - Квантовые вычисления. Некоторые правила, законы, приемы, квантовая логика, квантовые алгоритмы. Развивались намного более интенсивно, чем экспериментальная область.
 - * Квантовые компьютеры. Пока теоретически, но прообразы квантовых компьютеров порядка 10 кубитов уже реализованы.
 - Квантовая криптография. Благодаря теоретическому успеху в этой области вся квантовая информация получила такое гигантское развитие в эти годы. Для нужд квантовой криптографии выделялось большое финансирование. В настоящий момент есть не только теоретический, но и экспериментальный опыт, более того, уже есть фирмы, которые предоставляют коммерческое оборудование. Основное предназначение этого оборудования - передача информации с гарантией, что её не получили третьи лица. Это не значит, что они её не могут получить, могут, но это сразу же станет известно легитимному отправителю и получателю и они смогут принять меры.
 - Квантовая телепортация. Передача квантового состояния на расстояние. Это не только теоретические предположения, расчеты, но и реальные эксперименты. Квантовая телепортация уже была реализована в эксперименте.

Все 3 пункта вместе — квантовая информация. Нас, в первую очередь, интересуют квантовые вычисления.

Основные вехи интересующего нас информационного аспекта:

- 1900 г Зарождение, формула Планка
- 20-е гг Интенсивное развитие квантовой механики. Был создан математический аппарат квантовой механики, также идейное содержание.
- 40-е гг Изобретение транзистора (полупроводникового) — основа современных компьютеров. Используются законы квантовой физики, но это еще макроприбор.
- 1960 г Изобретение лазера.
- 1994 г Квантовая информация (теория). В этом году Шор опубликовал свой знаменитый алгоритм, и после этого начался бум в области квантовых компьютеров. Квантовый компьютер дает экспоненциальный выигрыш во времени, что, в теории, позволит производить взлом шифров значительно быстрее, чем на обычных компьютерах.

2000 г Создание коммерческих криптографических устройств. Также около этого времени появились первые прототипы квантовых компьютеров (но всего на 10-20 кубит). Для алгоритма Шора нужно 1000 кубит, и пока прогресс минимальный. Почему это так будет рассмотрено позднее.

1.3 Биты и кубиты

Рассмотрим график, показывающий изменение размеров транзисторов в зависимости от года. Экстраполируя уменьшение транзисторов, можно предположить, что к середине нашего века можно будет реализовать 1 бит 1 атомом. Сейчас на один бит требуется около 10^9 атомов. 1 бит реализуется одним транзистором.

Если мы подойдем к размеру 1 атом на бит, то начнут действовать законы квантовой физики, а в квантовой логике все по-другому. Как же описывать кубит? Давайте ретроспективно посмотрим на частицу. Какие модели есть в классической физике для описания частицы? Если мы переберем все модели, то увидим, что модели две: модель частицы-корпускулы и частицы-волны.

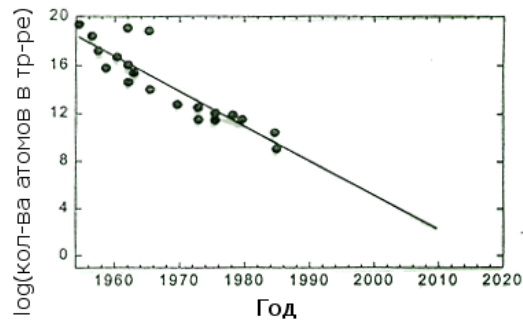


Рис. 1.2: Количество атомов, реализующих один транзистор. Можно предположить, что к 2020 году транзистор будет реализовываться одним атомом.

1.3.1 Частица как материальная точка

Если рассматривать частицу как материальную точку, то она характеризуется радиус-вектором, массой, скоростью ($\frac{d\vec{r}}{dt}$), импульсом $\vec{p} = m\vec{v}$.

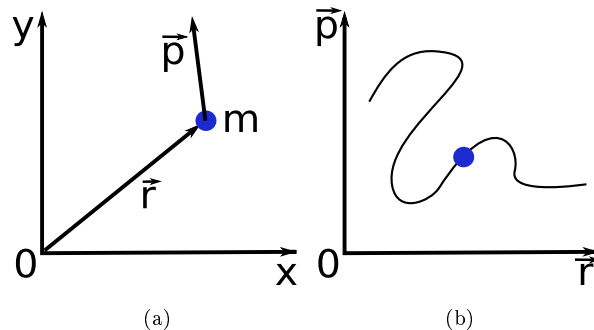


Рис. 1.3: Материальная точка (a) и её траектория на фазовой плоскости (b)

Частицу как материальную точку рассматривает классическая физика. Можно ли использовать модель частиц для описания кубита? Кубит можно реализовать разными макрообъектами. Классическая модель говорит о следующем: Электрон движется со скоростью \vec{v} . У него есть дипольный момент, который меняет направление так как электрон движется по замкнутой орбите, проекция его на ось осциллирует по времени с частотой вращения.

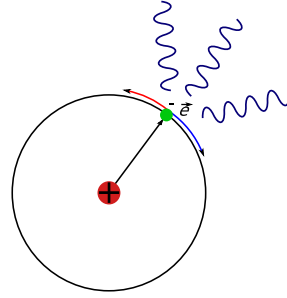


Рис. 1.4: Излучающий атом

А что такое антенна? Антенна — это осциллирующий дипольный момент. Значит, атом является непрерывным излучателем электромагнитной энергии. В силу закона сохранения энергии, она берется из кинетической, последняя должна уменьшаться, электрон должен приближаться к ядру и в конечном счете на него упасть. В итоге атом коллапсирует. Нехитрые расчеты показывают, что если бы атом излучал, то коллапс наступал бы очень быстро, за доли секунды. Вещество состоит из атомов, и если бы оно описывалось классическими законами, оно бы коллапсировало и нашего мира не существовало.

1.3.2 Частица как волна

Вторая и последняя классическая модель частицы — это модель волны. Волны бывают локальные, то есть ограниченные в пространстве, а бывают неограниченные. С этой точки зрения идеальная модель — плоская волна. Есть поле, скалярная величина, заданная в любой момент времени в любой точке пространства.

$$\phi(x, t) = A \sin(\omega t - kx)$$

$$K = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{k} > 0$$

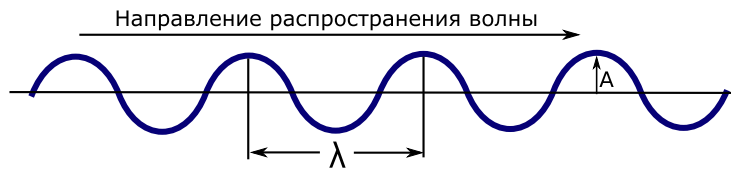
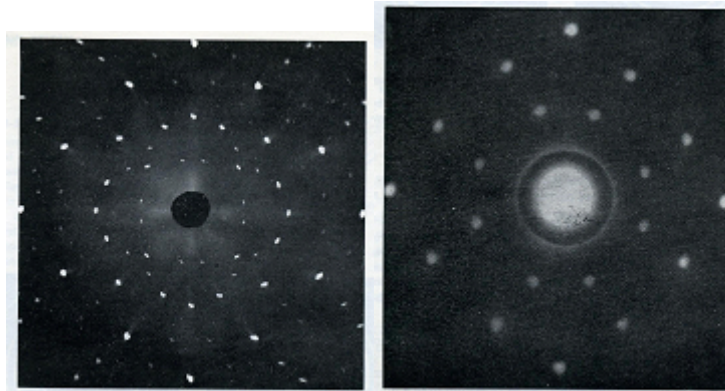


Рис. 1.5: Волна

Волна локализована, существует в каждой точке пространства. Можно волновую модель принять для описания микрообъектов? Как ни парадоксально это звучит, ответ положительный. Это была гипотеза теоретиков, предвидение де Бройля.

Естественно принятие волновой модели диктуется экспериментом. Были поставлены эксперименты, объяснить которые в рамках корпускулярной теории не получалось, частицы вели себя как волны. Например, при бомбардировке кристаллических решеток нейтронами, тяжелыми частицами, наблюдается дифракционная картина, аналогичная возникающей при облучении рентгеновскими лучами.



(а) Дифракция рентгеновских луч- (б) Дифракция нейтронного пучка чей

Рис. 1.6: Дифракция на кристалле NaCl

1.4 Дифракция микрочастиц

Как частицы дифрагируют? Несколько минут потратим на рассмотрение самой простой модели дифракции. Перед вами схема опыта Юнга, в котором демонстрируется дифракция электромагнитных волн. Когерентные волны падают на две щели и образуют два источника когерентного излучения, за счет разности длин путей Δ , которые проходит свет образуется смещение фаз волн, в следствие чего на фотопластинке образуется интерференционная картина.

Поозже аналогичные опыты производились для электронов и были получены аналогичные результаты. Но вернемся к самому явлению дифракции. При прохождении волны через две щели образуется две волны и они интерферируют на экране. Если в точку экрана они приходят в фазе, при сложении они удвоят амплитуды, если в противофазе, погасят друг друга.

$$\psi_1 = Ae^{ikx}$$

$$\psi_2 = Ae^{ik(x+\Delta)}$$

$$\psi = \psi_1 + \psi_2$$

Пластинка реагирует на квадрат ψ

$$|\psi|^2 = |\psi_1 + \psi_2|^2 = 4A^2 \cos^2 \left(\frac{kd \sin \theta}{2} \right).$$

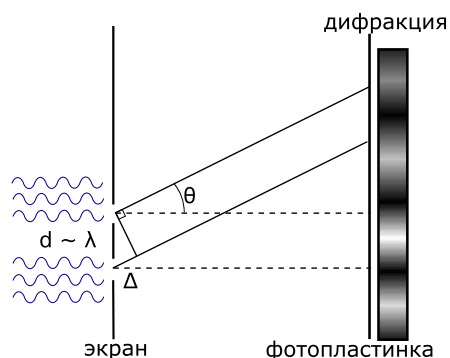


Рис. 1.7: Схема опыта Юнга

Из этой формулы следует, что максимумы мы будем наблюдать в точках, в которых выполнено условие:

$$\frac{kd \sin \theta}{2} = \pi n, n = \pm 1, \pm 2 \dots$$

$$d \sin \theta_n = n \cdot \lambda, n = \pm 1, \pm 2 \dots \quad (1.1)$$

Формула 1.1 называется формулой Брэгга и она нам потом пригодится.

В 1927 году К.Девиссон и Л.Джермер исследовали рассеивание электронов на кристаллах никеля при бомбардировании электронами. Как это делается? Катод разогревается, скорость электронов увеличивается и они вылетают из него с тепловыми скоростями, образуя электронное облако. Электрическое поле между катодом и анодом действует на них и они устремляются к аноду, проходят через коллиматор и... пролетают через анод, так как в нем дырка. При этом электрон получает импульс $\vec{p} = m\vec{v}$, где v можно найти из соотношения

$$E_e = eU = \frac{m\vec{v}^2}{2}$$

Если посчитаем, то получим $v \gg v_T$, т.е. электрон будет двигаться со скоростью значительно большей тепловой.

Так вот, в одном из опытов (рисунок 1.9) К.Девиссон и Л.Джермер, к своему удивлению, обнаружили четко выраженное чередование светлых и темных полос. Объяснить это явление удалось только рассматривая электрон как волну.

Электроны очень легкие, они не проникают в кристалл, а рассеиваются на поверхности. На рисунке изображена поверхность кристалла, кружками показаны атомы никеля. Падает пучок, испытывает рассеяние. При этом возникает эффект, аналогичный опыту Юнга: волна, отраженная от соседних атомов проходит различное расстояние в зависимости от угла, под

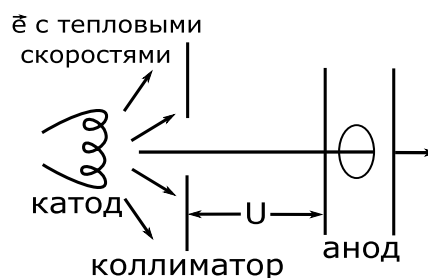


Рис. 1.8: Схема электронной пушки

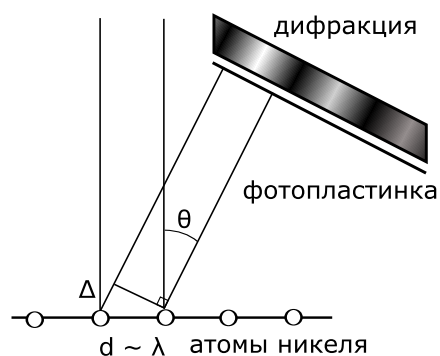


Рис. 1.9: Дифракция на кристалле никеля

которым она отразилась. В результате этого возникает интерференционная картина, изображенная на рисунке 1.10

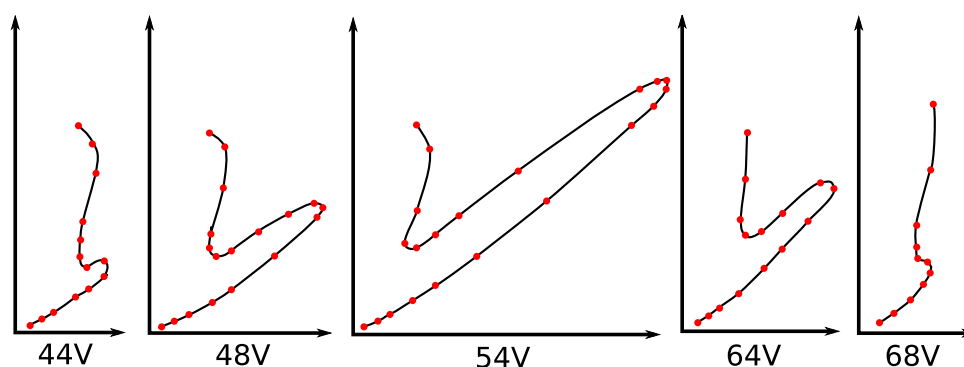


Рис. 1.10: Полярные диаграммы интенсивности упруго рассеянных электронов для ряда энергий первичного пучка

Так, при $E_v \sim 54\text{эВ}$ и расстоянии между атомами $d \sim 2,15 \cdot 10^{-8}\text{см}$ пик наблюдался при 50°

К тому времени де Бройль уже выдвинул гипотезу о том, что с электроном связана волна. Более того, он выписал уравнения, описывающие эту волну:

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

$$\hbar \vec{k} = \vec{p} \quad (1.2)$$

$$\hbar \omega = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (1.3)$$

Причем формулы 1.2 и 1.3 некоторое время оставались постулатами. Формула 1.2 А формула 1.3 постулирует связь частоты волны с кинетической энергией.

Результат опыта К.Девиссона и Л.Джермера, никак не согласовавшийся с классической теорией, замечательно описывается этими формулами.

Оценим длину волны де Бройля.

$$\hbar \frac{2\pi}{\lambda} = p; \lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2meU}} = 1,67\text{\AA}$$

Эта длина имеет тот же порядок, что и расстояние между атомами никеля, т.е. имеются все условия для формирования интерференционной картины. В дальнейшем мы будем заниматься изучением волновых функций микрочастиц, и простейшая функция — волна де Бройля.

Недавно такой эксперимент, давно проведенный со светом, провели с электроном, причем использовался источник единичных электронов, что позволило отследить динамику возникновения интерференционной картины. Использование источника единичных электронов имеет еще одну важную особенность. Если мы наблюдаем дифракцию пучка электронов, то можно было бы предположить, что через щели проходят различные электроны и затем интерferируют друг с другом. Но когда мы имеем дело с единичным электроном, мы можем со всей уверенностью сказать что он каким-то образом проходит через обе щели одновременно и интерferирует сам с собой.

Каждый отдельно взятый электрон засвечивает маленькую точку, когда электронов мало, кажется, что точки разбросали по пленке случайным образом, но чем больше их становится, тем четче вырисовывается дифракционная картина. Получается, что в совокупности электроны начинают вести себя как волна. С этим связано принципиальное деление квантовой механики на два направления: волновую механику и теорию измерения. Микрочастицы ведут себя как волны, но в момент, когда вы проводите измерения, происходит химическая реакция, частица ведет себя как материальная точка и наблюдаете вы материальную точку.

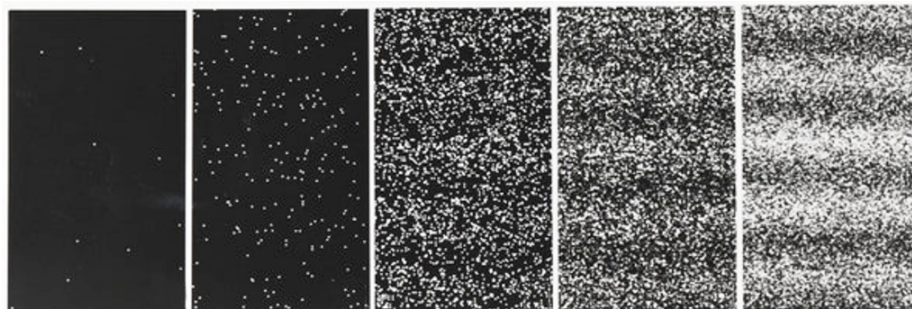


Рис. 1.11: Дифракция электронов на двух щелях

Если с частицей связана волна, какой физический смысл она имеет? Рассмотрим известные в классической физике примеры волн. В электромагнитной волне колеблются векторы электрического и магнитного поля. В звуковой волне колеблется физическая величина, связанная со средой распространения — плотность. Обычные волны на поверхности воды — это смещения, распределенные в пространстве.

Что же за волна связана с электроном? М. Борн высказал гипотезу, которая впоследствии стала постулатом квантовой механики, а позже его

гипотезу подтвердили опыты по дифракции. Идея, им высказанная, состоит в следующем. Электрон после прохождения щелей случайным образом попадает в какую-то точку на экране. Здесь мы имеем дело со случайным событием. Затем мы обращаемся к теории вероятности, причем не к классической теории вероятности, а соединенной с волновой физикой.

Есть поле событий — фотопластинка, на которую падают электроны. В классической теории вероятностей рассматриваются конечные поля событий. Например, подбрасывается монетка, выпадает орел или решка. Подбрасывание производится N раз. Здесь N раз происходит прохождение единичного электрона. В опыте с монеткой число решек делится на полное число бросаний и получаем вероятность решки. Точно так же с этим экспериментом. Разобьем фотопластинку на элементарные площадки dy . Подсчитаем количество электронов N , которые попали на пластинку во время эксперимента. Поделив на размер площадки получим $dN(y)$ — число точек, попавших в интервал.

Мы можем определить вероятность попадания точки в каждый из интервалов:

$$dP(N) = \frac{dN(y)}{N} = \omega(y)dy$$

Дальше мы постулируем, что эта величина равна квадрату амплитуды волнового интерференционного поля.

$$\omega(y_z) = |\psi(y, t)|^2$$

То есть вероятность того, что при измерении во время t электрон попадет в точку y периодическая. С большей вероятностью электрон попадает в область с большим значением ω . Таким образом, физический смысл волновой функции в том, что это не материальная волна, а волна вероятности. Впервые это предложил Макс Борн, за что и получил нобелевскую премию в 1954г. Какая простая формула, а на сколько продвинулся фронт исследований.

Первый постулат квантовой механики
Любой микрообъект полностью характеризуется заданием своей волновой функции $\psi(\vec{r}, t)$

Волновая функция имеет статистический смысл. $|\psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r}$ - вероятность того, что частица будет обнаружена в области пространства $d\vec{r}$ в момент времени t . Мы употребляем термин «обнаружится», а не «находится», когда говорим о частицах. «Вероятность нахождения частицы» — неверная формулировка. «Вероятность обнаружения» — верная формулировка. С точки зрения классической физики может быть непонятно, в чем разница. С точки зрения квантовой физики частица может не иметь точного места нахождения, а значит и не находится в какой-то определенной точке, так как она — волна. Однако когда мы её обнаруживаем, она ведет себя как частица, а значит мы можем говорить о точке обнаружения.

Сейчас имеется несколько разрозненных школ. Почти все физики придерживаются Копенгагенской интерпретации. Однако есть и критика, так как альтернативным школам принадлежали Эйнштейн и даже сам Шредингер.

Вероятность обнаружения частицы во всем пространстве равна 1.

$$\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r} = 1$$

Электрон нельзя представлять себе как шарик, движущийся по траектории. Если бы электрон был шариком и двигался обычным образом, он должен был бы пройти через щель 1 или щель 2, но не сразу в обе. Волна же может вести себя таким образом, так как она распределенная. В случае поведения электрона как частицы, мы бы имели картину единичных максимумов, но не волновую картину дифракции.

Но если у нас есть волновая функция, то говорить, где сейчас электрон, где заряд, где масса, неправильно. Есть просто волновая функция, есть уравнение волновой эволюции. Это то, что не удовлетворяло Эйнштейна и большинство людей, занимающихся квантовой механикой. В Копенгагенской интерпретации этот вопрос считается ненаучным и не рассматривается.

Волновая механика Шредингера — это решение уравнений в частных производных, описывающих поле. Когда же мы переходим от теории к практике, хотим измерить поле, извлечь информацию из него, мы ставим пластинку, с Теперь электрон — реальный объект, материальная точка, имеющая массу, заряд и прочие характеристики. Он попал в пластинку и произвел взаимодействие. Это и есть корпускулярно-волновой дуализм частиц. Это недостаток — исчезает материя, ведь мы не можем ответить на вопрос: где масса на этапе распространения волны? Это лишь один из аспектов непонятности квантовой механики. В теории информации мы будем иметь дело с почти мистическими выводами, подтверждающимися экспериментами. Квантовая механика все объясняет, становится возможным строить все новые и новые приборы. Все описанное квантовой механикой существует независимо от измерения, наблюдателя и т.д., подтверждено многочисленными экспериментами, проводившимися независимыми учеными.

Лекция 2

Кроме рассмотренной в первой лекции волновой квантовой механики существует еще и матричная квантовая механика. В теории квантовой информации удобнее работать именно в матричной формулировке, а вот в физике твердого тела, химии, биологии волновая механика удобнее.

Сменив парадигму (набор основополагающих идей, лежащих в основе направления) с классической на квантовую мы получили новые особенности, в частности, корпускулярно-волновой дуализм. Причем существуют объекты, поведение которых описывается именно волновой теорией. Следует отметить, что и волновое, и вероятностное описания были приняты под давлением опыта. Это результат многолетних попыток описать явления, возникающие в экспериментах, а не прихоть. Мы будем ставить естественные вопросы и увидим, что аппарат квантовой механики развивается под влиянием естественных логических шагов.

2.1 Соотношение неопределенности

В начале займемся соотношением неопределенности. Рассмотрим предельный частный одномерный случай для того, чтобы понять общие принципы. Пусть электрон имеет импульс \vec{p} . С ним связана волновая функция:

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

Мы знаем, что $p = \hbar k$, а значит k фиксированно. Но тогда плотность вероятности нахождения электрона в точке пространства x в момент времени t будет

$$|\psi(x, t)|^2 = |A|^2 = \text{const}$$

А это значит, что координата полностью не определена, если импульс задан точно.

Теперь попробуем локализовать волновую функцию, при этом мы получим так называемый волновой пакет (сумму волн). Для этого воспользуемся принципом суперпозиций, будем составлять волновое поле, суммируя волновые функции. Принцип суперпозиции присутствует везде в природе, с ним связаны различные парадоксы, например экспоненциальный выигрыш в скорости квантовых компьютеров по сравнению с традиционными.

Принцип суперпозиции

Если микробъект может находиться в состоянии функции $\varphi_1(x, t)$ и может находиться в состоянии функции $\varphi_2(x, t)$, то он может находиться в суперпозиционном состоянии

$$\psi(x, t) = c_1\varphi_1(x, t) + c_2\varphi_2(x, t)$$

То есть волновая функция может быть представлена в виде

$$\varphi(x, t) = \sum_n c_n \varphi_n$$

Причем зачастую получается так, что C_n зависит только от времени, а φ_n только от координат.

В частности, интерференция — это проявление такого сложения. Ее смысл в том, что волны либо гасят, либо усиливают друг друга. Единственная особенность заключается в том, что когда принцип суперпозиции формулируется для волн вероятности, складываются не вероятности ($|\varphi^2|$), а амплитуды вероятностей, а потом уже берется модуль в квадрате. Поэтому взаимная разность фаз играет роль.

Используя этот принцип, мы можем организовать волновой пакет. Допустим, что импульс нам известен с некоторой погрешностью, а раз известен импульс, то известно $k_0 = p/\hbar$ и отрезок длиной Δk и центром в k_0 , в пределах которого находится k . Определим $\varphi(x, t)$ как суперпозицию по всем допустимым k :

$$\varphi(x, t) = \frac{1}{\Delta k} \int_{k_0 - \frac{\Delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\Delta k}{2}} A(k) e^{i(kx - \omega t)} dk$$

Положим $\Delta k \ll k_0$, то есть погрешность, с которой мы знаем импульс мала по сравнению с самим импульсом. Тогда можно сделать следующие упрощения:

$$\omega = \omega(k) = \omega(k_0) + \frac{\partial \omega}{\partial k} (k - k_0)$$

$$A(k) \simeq A(k_0)$$

Обозначим

$$A_0 \equiv \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar \omega$$

Тогда для волновой функции получим

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

где

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

Определим где же находится частица, для этого найдем плотность вероятности:

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

Построим график этой функции по оси ординат. Он состоит из большого горба в середине и затухающих горбов влево и вправо, причем следующий рядом с центральным имеет высоту около $\frac{1}{20}$ от основного. Частица в основном сосредоточена где-то внутри центрального максимума.

Положим $y = 0 = x - v_0 t$. При этом $\frac{dx}{dt} = v_0 > 0$, что говорит о том, что точка пространства, в которой достигается максимум вероятности нахождения частицы, движется. То есть движется и весь волновой пакет со скоростью v_0 , но его положение остается неопределенным. Насколько велика эта неопределенность? Она скорее всего расположена в главном максимуме, то есть $-\pi/2 < \Delta y < \pi/2$:

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

При фиксированном t получим $\Delta k \Delta x = 2\pi$, откуда и выразим соотношение неопределенности Гейзенберга

$$\Delta p \Delta x = 2\pi \hbar$$

На самом деле мы выполняли вычисления довольно грубо и более точное соотношение выглядит так:

Соотношение неопределенности гейзенберга

$$\Delta p \Delta x = \frac{\pi \hbar}{2}$$

Тогда становится ясным наше определение микрообъекта. Если $\vec{p}r \gg \hbar$, то неопределенность мала по сравнению с величинами, описывающими объект, и мы можем рассматривать его как макрообъект, в противном случае, неопределенность велика и ответ, даваемый классической физикой становится неточным — мы имеем дело с микрообъектом.

Отсюда же следуют выводы, полученные в начале лекции: если в точности известен импульс, координата абсолютно не определена, если в точности известна координата, то импульс не определен.

$$\Delta p = 0 \Rightarrow \Delta x = \infty$$

$$\Delta x = 0 \Rightarrow \Delta p = \infty$$

Если формально устремить \hbar к нулю, то квантовая механика превращается в классическую, а уравнение Шредингера переходит в классическое уравнение Гамильтона-Якоби.

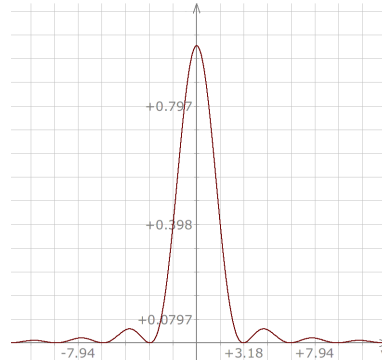


Рис. 2.1: Вероятность обнаружить частицу в различных точках пространства.

2.2 Второй постулат квантовой механики

До сих пор мы имели дело с самой волновой функцией. Но в опытах мы измеряем не её, а физические величины. Получаются числа, действительные числа, зависимости, параметры, кривые. Как извлекать из квантовой механики эти числа? На этот вопрос отвечает аппарат квантовой механики, который мы хотим развить.

Второй постулат квантовой механики

Каждой физической величине соответствует оператор, а его среднему значению соответствует среднее значение физической величины, получаемой в эксперименте.

Далее мы будем обозначать операторы с помощью крышки: \hat{A} , а среднее значение угловыми скобками: $\langle A \rangle$. Впрочем, крышечку у A будем иногда опускать. Оператор действует на записанную после него волновую функцию. Далее будет показано, что физическая величина, соответствующая оператору может принимать только собственные значения этого оператора.

Нам известны такие физические величины, как координата, скорость, импульс, момент импульса, энергия. Как построить операторы, соответствующие этим физическим величинам?

2.2.1 Оператор координат

Оператор координаты является простейшим оператором. Он заключается в умножении волновой функции на соответствующую координату:

$$\hat{X} = x; \hat{X}\psi = x\psi$$

Проверим, что такое определение вполне согласуется с определением оператора, подсчитаем среднее значение оператора на всем пространстве:

$$\langle X \rangle_t = \int_x \omega(x)x dx = \int_x |\psi(x, t)|^2 x dx = \int_x \psi^*(x, t)x\psi(x, t) dx$$

Но это просто математическое ожидание для координаты частицы, среднее значение наблюдаемой физической величины, что и требовалось получить. Значит наше предположение было верно.

2.2.2 Оператор импульса

Для начала рассмотрим одномерный случай. Среднее значение оператора импульса должно записываться также, как оператор координаты:

$$\langle P \rangle_t = \int \psi^*(x, t)\hat{p}\psi(x, t) dx \quad (2.1)$$

Но мы пока не знаем, что такое \hat{p} . Возьмем такое состояние, в котором импульс точно определен:

$$\psi_p(x, t) = Ae^{i\frac{p}{\hbar}x - \omega t} = P \quad (2.2)$$

Предположим, что \hat{p} - это оператор дифференцирования по координате. Тогда подставим 2.2 в 2.1 и в качестве \hat{p} возьмем $\frac{\partial}{\partial x}$

$$\begin{aligned}\langle P \rangle_t &= \int A(e^{i\frac{p}{\hbar}x-\omega t})^* \left(\frac{\partial}{\partial x} A e^{i\frac{p}{\hbar}x-\omega t} \right) dx = \int A^2 \frac{i}{\hbar} (e^{i\frac{p}{\hbar}x-\omega t})^* e^{i\frac{p}{\hbar}x-\omega t} dx = \\ &= \int A^2 \frac{i}{\hbar} dx = \frac{i}{\hbar} \int A^2 dx \quad (2.3)\end{aligned}$$

Но мы априори знаем, что $\langle P \rangle_t = p$, а кроме того, мы знаем, что $\int A^2 dx = 1$. Это значит, что мы угадали оператор импульса с точностью до константы:

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

Для трёхмерного случая оператор импульса будет выглядеть так:

$$\vec{\hat{P}} = -i\hbar \nabla \quad (2.4)$$

Где ∇ - оператор Лапласа

$$\nabla = \hat{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \hat{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \hat{e}_z \frac{\partial}{\partial z}$$

2.2.3 Остальные операторы

Для нахождения операторов остальных функций воспользуемся принципом, заключающемся в том, что отношения между операторами повторяют отношения между величинами в классической физике. А в классической физике любая физическая величина выражается через координаты, импульс и время.

$$f(\vec{p}, \vec{r}, t) \implies f(\hat{p}, \vec{r}, t)$$

Оператор Гамильтона

Без гамильтониана невозможно жить в квантовой механике. Определить систему — значит определить гамильтониан, поэтому давайте его построим. Функция Гамильтона отражает полную энергию системы, то есть сумму кинетической и потенциальных энергий.

$$H = \frac{P^2}{2m} + U(\vec{r}, t)$$

Подставим вместо импульса оператор импульса 2.4

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + U(\vec{r}, t) = \hat{K} + \hat{U}$$

Заметим, что \hat{K} - это оператор двухкратного дифференцирования.

$$\hat{K} = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m}$$

где

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

2.3 Важные свойства операторов квантовой механики

1. Операторы квантовой механики линейны.
2. Операторы квантовой механики эрмитовы.

$$\int \psi^* \hat{A} \psi d\vec{r} = \int (\hat{A} \psi)^* \psi d\vec{r}$$

А из этого следует, что среднее значение и собственные значения оператора действительны. Это хорошо согласуется с тем, что физические величины также принимают только действительные значения.

Напомним, что A_n называется собственным значением, а φ_n собственной функцией оператора \hat{A} , если $\hat{A} \varphi_n = A_n \varphi_n$.

3. Полнота набора φ_n : любая волновая функция может быть разложена в ряд по набору собственных функций оператора.

В дальнейшем мы будем этим активно пользоваться.

$$\psi(r, t) = \sum_n c_n(t) \varphi_n(\vec{r})$$

$$1 = \int \varphi_m^* \varphi_n d\vec{r} =$$

$$\int |\psi|^2 dr = \sum_n \sum_m c_n^* c_m \int \varphi_n^* \varphi_m dr = \sum_n |c_n|^2 = 1$$

То есть c_n — это вероятность обнаружить микрообъект в состоянии φ_n

Остатся вопрос: какие значения может принимать физическая величина A ? Нужно поставить задачу на собственные значения оператора, соответствующего этой величине. Решив её, получим спектр A_n . Этот набор чисел и дает набор возможных значений величины A , причем принимать она их будет с вероятностями $|c_n|^2$

2.4 Совместные физические величины

Пусть у нас есть две физические величины и мы хотим их измерить. Как мы уже убедились на примере координат и импульса, иногда измерить обе величины одновременно невозможно. Такие величины называют несовместными. Если же одновременному измерению ничто не мешает, то они называются совместными.

Как определить совместны ли величины? В момент измерения частица принимает одно из состояний, характеризующихся собственными волновыми функциями оператора измеряемой величины. При этом сама физическая величина принимает значение, равное собственному вектору оператора. Естественно, что принять сразу два состояния частица не может. Отсюда следует, что если операторы A и B коммутируют, то есть

$$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$$

эти операторы имеют один и тот же набор волновых функций, то соответствующие им величины совместны, а в противном случае не совместны.

В качестве примера рассмотрим импульс и гамильтониан.

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

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + U(x)$$

Если потенциальная энергия постоянна, то эти величины совместны, а если частица движется в потенциальном поле, то тогда они не совместны.

2.5 Уравнение Шредингера

Согласно уравнению де Бройля

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

Воспользуемся формулой Максвелла, отлично работающей для электромагнитных волн. Можно предположить, что её аналог действителен и для волновых функций.

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (2.5)$$

Из нее следует, что функция ψ имеет вид $ce^{i(kx-\omega t)}$, причем $\omega^2 = k^2 c^2$. Выразим c^2 и подставим в 2.5, используя выражение для ω . Также произведем однократное дифференцирование ψ по t . Получим

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \cdot \frac{\hbar^2}{2m} \quad (2.6)$$

Обратим внимание, что справа у нас фактически стоит гамильтониан для случая нулевой потенциальной энергии.

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

Перепишем 2.6 в виде

Уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi$$

Или

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) + E_p(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t)$$

Шредингер прославился не только тем, что вывел это уравнение, но и тем, что сразу же записал его для атома водорода и решил. При этом результаты совпали с давно накопленными эмпирическими данными.

Мы записали уравнение Шредингера для одной частицы, но, теоретически, мы можем записать его и для системы частиц и для материального

тела. И такое уравнение будет полностью описывать его поведение. Другое дело, что оно станет настолько сложным, что его будет невозможно решить. Но, тем не менее, мы нашли путь к описанию системы квантов любой степени сложности.

2.6 Стационарные системы

Существует очень широкий класс систем, для которого уравнение Шредингера существенно упрощается. Это класс стационарных систем.

Система называется стационарной, если её гамильтониан не зависит от времени

Оператор гамильтона, в общем случае, зависит от координат и времени ($\hat{H} = \hat{H}(\vec{r}, t)$), а для стационарной системы только от координат ($\hat{H} = \hat{H}(\vec{r})$).

Выведем стационарное уравнение Шредингера. Для этого выпишем волновую функцию и разделим её на части, зависящие только от \vec{r} или только от t .

$$\psi = f(t)\varphi(\vec{r})$$

Подставим его в уравнение Шредингера

$$i\hbar\varphi(\vec{r})\frac{df}{dt} = f(t)\hat{H}\varphi(r)$$

Произведем разделение переменных путем деления на $f(t)\varphi(t)$

$$i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{df(t)}{dt} = \frac{\hat{H}\varphi(x)}{\varphi(x)} = const$$

Причем первое равенство верно при любых значениях переменных, а значит мы имеем дело с константой. Из условия стационарности у нас следует, что

$$i\hbar\frac{df}{dt} = Ef(x)$$

И в итоге получим

Стационарное уравнение Шредингера

$$\hat{H}\varphi(x) = E\varphi(x)$$

Отсюда следует, что энергия принимает собственные значения оператора гамильтона. Для простейших случаев мы будем находить решения этой задачи на собственные значения явно, для остальных будем проводить качественный анализ.

Например, рассмотрим случай, когда волновая функция имеет вид

$$f(t) = Ce^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

И отсюда сразу получим постулат де Бройля.

$$E = \hbar\omega$$

С этим уравнением интересная история. Шредингер был молодым человеком, и был теоретик де Байль, зрелый, известный. Он вел семинар в Цюрихе и де Байлю попала работа де Бройля. Он почувствовал, что здесь что-то есть и сказал Шредингеру, чтобы тот, попытался понять, откуда следует такая волна. При попытке найти ответ Шредингер и вывел свое знаменитое уравнение. И, что намного сложнее, решил его для атома водорода и получил его спектры, которые к тому моменту были хорошо изучены. Таким образом была теоретически описана теория Бора. Шредингер получил те же результаты из своей волновой механики. И это было начало квантовой механики.

А Гейзенберг, будучи таким же молодым ученым, за год до Шредингера создал матричную квантовую механику.

Но вернемся к стационарному уравнению Шредингера. Если оно решено, то значит нам известен спектр $\varphi_n(x)$

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n \varphi_n(\vec{r}) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t}$$

Но это и есть полное решение уравнения Гейзенберга. Причем $|c_n|^2$ — это вероятности того, что при измерении мы обнаружим квантовую систему в состоянии φ_n . Это решение общего вида.

2.7 Алгоритм нахождения волновой функций

1. Находим гамильтониан нашей системы
2. Записываем уравнение Шредингера этой системы
3. Ищем решение уравнения
4. Ищем волновую функцию как взвешенную сумму собственных функций
5. Нормируем полученную функцию исходя из условия нормировки $\sum_n |C_n|^2 = 1$

Все возникающие при решении задач системы, описываются уравнением Шредингера. В том числе им описывается и эволюция кубита. По сути, работа ученых, занимающихся квантовой механикой, сводится к решению различных вариантов уравнения Шредингера.

Лекция 3

3.1 Бесконечная потенциальная яма

3.1.1 В классической физике

Для начала рассмотрим максимально упрощенный вариант потенциальной ямы. Конечно в реальности она не встречается, но она является прообразом реальных систем и несет в себе свойства этих систем. Что такое потенциальная яма? Будет ли для вас открытием, что наша Земля движется в потенциальной яме? Яма подобного типа возникает, когда есть притяжение. Электрон в атоме также движется в потенциальной яме. Мы будем рассматривать движение в простом виде, допускающем аналитическое решение.

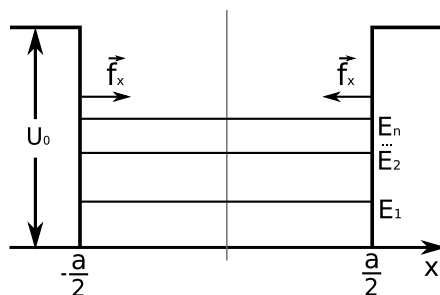


Рис. 3.1: Потенциальная яма в классической физике.

Для этого мы сделаем следующие упрощения:

- Первое упрощение — уменьшение степеней свободы, будем рассматривать одномерный случай.
- Второе упрощение — симметрия, возьмем симметричную прямоугольную потенциальную яму.

Полная энергия частицы в классическом варианте будет равна

$$E_{\text{полн}} = K + U(x), K > 0$$

$$E_{\text{полн}} \geq U(x)$$

Полная энергия всегда больше, чем $U(x)$ (потенциальная энергия).

В классическом варианте возникает недоступная область, в нее электрон никогда не может попасть т.к. его энергия слишком мала. Для начала возьмем яму бесконечной глубины, устремив параметр в бесконечность. Это самый простой случай для анализа.

$$U_0 \rightarrow \infty$$

Когда частица подходит к границе стенки, на нее будет действовать сила

$$\vec{f}_x = -\frac{\partial U}{\partial x}$$

Эту формулу легко проверить, уменьшив крутизну стенок и проведя дифференцирование. Возникающие силы не будут давать частице возможности выйти за пределы ямы. Таким образом, частица не может выходить из ямы. Отообразим это в граничных условиях.

$$\varphi\left(-\frac{a}{2}\right) = \varphi\left(\frac{a}{2}\right) = 0 \quad (3.1)$$

3.1.2 В квантовой физике

Теперь рассмотрим описанную ситуацию с точки зрения квантовой физики. Требуется записать уравнения Шредингера для разных областей (дно ямы и ее стенки). Возникает гамильтониан:

$$\begin{aligned} H &= -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} \\ \hat{H}\varphi &= E\varphi \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} &= E\varphi \\ \varphi(x) &= A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx} \\ K &= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \end{aligned}$$

Так как мы рассматриваем симметричную потенциальную яму $|A_1| = |A_2|$. Хотя их модули должны быть равны, знак может быть разный, поэтому мы будем получать либо \sin , либо \cos :

$$\varphi(x) = A \cos kx$$

$$\varphi(x) = B \sin kx$$

Используя граничные условия 3.1 получим квантованный набор функций

$$\cos \frac{kQ}{2} = 0$$

$$K_n = \frac{\pi}{2} n, n = 1, 3, 5, \dots$$

Таким образом, мы получили квантованный набор собственных волновых функций

$$E_n = \frac{\hbar^2 K_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} n^2$$

n называется квантовым числом.

Разложим волновую функцию по собственным функциям оператора импульса

$$\varphi_n(x) \sim \cos k_n x \sim (e^{ik_n x} + e^{-ik_n x})$$

и получим суперпозиционное состояние. Отсюда следует, что импульс не имеет определенного значения.

Аналогичные операции проведем для \sin :

$$\sin \frac{k_m a}{2} = 0$$

$$\frac{k_m a}{2} = \pi m; m = 1, 2, 3 \dots$$

И это не очень удобно. Для единообразия положим $m = \frac{n}{2}$ и тогда

$$\frac{k_m a}{2} = \frac{\pi n}{2}; n = 2, 4, 6 \dots$$

$$K_n = \frac{\pi n}{a}; n = 2, 4, 6 \dots$$

То есть мы полностью решили задачу. Какой можно сделать вывод? Если система находится в связанном состоянии, мы имеем финитное движение в конечной области пространства, находимся в потенциальной яме, то спектр энергий такой системы дискретный. Интересен ли полученный результат физически? Да, мы получили интуитивное понимание, откуда возникает дискретный спектр. Для финитного движения мы ставим граничные условия, которым удовлетворяет не любое решение, а квантованный набор. В макромире аналогичная ситуация возникает когда скрипач, перебирая пальцами, изменяет длину струны. Тем самым он задает граничные условия, что приводит к тому, что струна издает не все звуки подряд, а лишь квантованный набор частот.

Рассмотрим различные уровни решения. Низший уровень ямы соответствует квантовому числу $n = 1$. График выглядит как одногорбая функция с максимумом в середине. Второе решение соответствует квантовому числу $n = 2$. Здесь уже появляются осцилляции (одна волна с двумя горбами, направленными вверх и вниз). Если добавим модуль и возведем в квадрат (нас интересует вероятность обнаружения частицы), функция будет иметь два горба, направленных вверх. При дальнейшем увеличении числа n количество горбов будет возрастать, в конце концов их станет очень много и в пределе мы получим равномерное распределение. Можно сделать вывод о том, что квантовое распределение стремится к равномерному распределению, а значит, к классической модели.

3.2 Конечная потенциальная яма

Теперь рассмотрим аналогичную яму конечной глубины. U_0 конечно, а значит, возникают конечные границы ямы. В рассмотренном ранее случае волновые функции на границах должны были зануляться, т.к. яма была бесконечной глубины. Сейчас же ситуация иная. Волновая функция будет сохранять максимумы в центре, но у нее появятся экспоненциально затухающие «хвосты». Такой вывод можно получить решая уравнение Шредингера, мы это делать не будем.

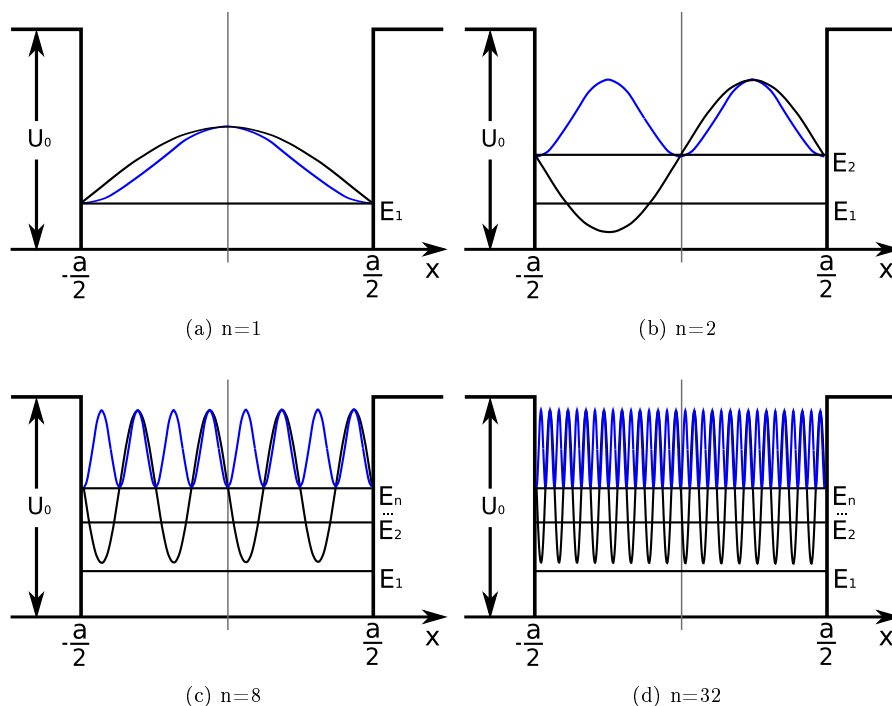


Рис. 3.2: Волновая функция (черный) и плотность вероятности (синий) при различных значениях квантового числа n .

Мы имеем отдельные решения для областей I, II и III, в сумме дающие 6 неизвестных констант. Но в классически недоступной области решение будет экспоненциально убывать. Нарастающие части нужно выбросить. Таким образом, две константы зануляются и мы имеем 4 неизвестные константы. Кроме того есть еще неизвестное значение энергии E . Итого 5 неизвестных.

С учетом двух граничных условий имеем 4 уравнения для нашего решения, дающие неизвестные. В результате волновая функция определяется с точностью до амплитуды. Если мы вычислим спектр энергии, то получим, что волновые функции уходят в классически недоступные области, при этом «хвост» описывается следующей экспонентой:

$$e^{-x \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}}$$

- Чем больше квантовое число мы берем, тем ближе решение будет к классическому

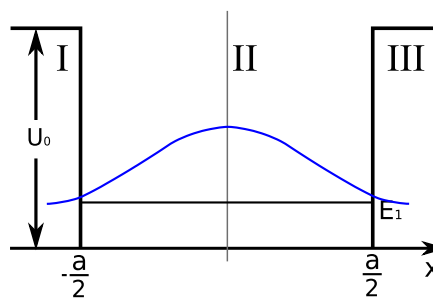


Рис. 3.3: Случай конечной потенциальной ямы

- Чем больше E , тем дальше частица может проникать в классически запрещенную область

3.3 Туннелирование через барьер

Потенциальный барьер является своего рода перевернутой потенциальной ямой. У нас есть обширная разрешенная зона, затем короткая запрещенная зона и снова длинная разрешенная. В классической физике электрон не может преодолеть барьер и перейти из одной разрешенной зоны в другую, однако в квантовой физике (а также в окружающей нас действительности) электрон может преодолевать барьер.

Запишем стационарное уравнение Шредингера

$$\begin{aligned}\hat{H}\varphi &= E\varphi \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + U_0\varphi &= E\varphi \\ \frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} &= \frac{2m}{\hbar^2}(U_0^2 - E)\varphi\end{aligned}\quad (3.2)$$

В области $-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}$ $U_0 > E$, а значит правая часть 3.2 неотрицательна, поэтому мы можем выписать собственные функции

$$\varphi(x) \sim e^{\pm\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)}x}$$

Для точного решения, конечно, необходимо брать комбинацию этих функций, однако для качественной оценки отбросим нарастающую, как в случае барьера бесконечной толщины.

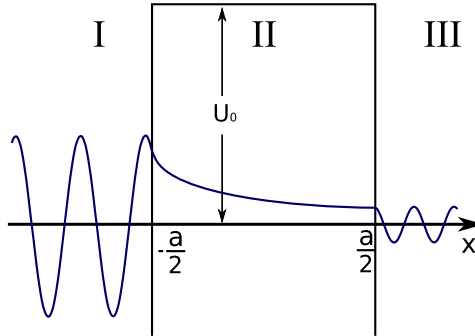


Рис. 3.4: Потенциальный барьер

$$\varphi(x) \sim e^{-\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)}x}$$

На рисунке 3.4 схематично изображена волновая функция частицы, преодолевающей потенциальный барьер. Так как толщина барьера конечна, то на выходе из него амплитуда составит

$$\varphi(x) \sim e^{-\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E)}a}$$

И при $x > \frac{a}{2}$ электрон будет иметь волновую функцию с этой амплитудой.

Таким образом, все наши рассуждения говорят о том, что:

Волновая функция может проникать, экспоненциально затухая, в классически недоступные области

3.3.1 Пример из жизни

Туннелирование через барьер — достаточно распространенное явление. Например, рассмотрим медный провод. Он состоит из вещества, которое очень хорошо проводит ток. Но медь покрыта слоем окисла, действительно, на металле всегда есть слой окисла вследствие содержания некоторого количества кислорода в атмосфере. Окисел меди, в отличие от чистой меди, является хорошим изолятором. Но толщина слоя окисла очень мала (порядка 10^{-6} см).

Когда два провода соединяются, например в месте контакта вилки с розеткой или скрутки проводов, между двумя металлическими контактами возникает потенциальный барьер из окисла. Структура получившейся системы будет следующая: металл — окисел — металл. Если изобразить это на рисунке (3.4), то график потенциальной энергии будет близок к нулю, пока электрон движется в меди (областях I и III) и резко возрастет, когда электрон будет двигаться в окисле (область II). За счет описанного выше квантового эффекта электроны могут проникать через барьер. Сопротивление такой системы будет существенно меньше сопротивления, рассчитанного по законам классической физики.

Лекция 4

4.1 Движение электрона в твердом теле

4.1.1 Волновая функция электрона в кристаллической решетке

Рассмотрим модель движения электрона в кристалле (полупроводнике, диэлектрике, металле). Кристалл образован периодическим чередованием ионов. Такое чередование образует кристаллическую решетку. Расстояние между элементами решетки называется периодом. Потенциал кристалла выглядит как горбы, направленные вверх, и потенциальные ямы. Расположение потенциальных ям соответствует расположению положительно заряженных ионов. Мы рассматриваем именно положительно заряженные ионы так как кристалл можно рассматривать как совокупность неподвижных атомов без электронов проводимости и собственно обобществленных электронов проводимости, перемещающихся в кристалле.

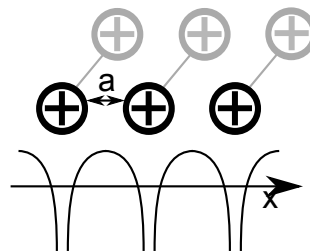


Рис. 4.1: Атомная решетка

Рассмотрим идеальный кристалл. Для него будет верно условие периодичности.

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

А значит мы можем разложить $U(x)$ в ряд Фурье.

$$U(x) = \sum_g U(g) e^{igx}$$

$$g = \frac{2\pi}{a} n \text{ где } n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

Обратное пространство

Под обратным пространством (k-пространством) будем понимать пространство, получаемое из данного в результате преобразования Фурье

Для простоты мы рассмотрим кубическую решетку: возьмем куб с ребром a , соответствующий одной ячейке и составим из таких кубов решетку,

располагая в углах кубов узлы сетки. Разным узлам будут соответствовать различные значения n . Положение каждого узла определяется вектором трансляции

$$l = \hat{e}_x a \cdot n_x + \hat{e}_y a n_y + \hat{e}_z a n_z$$

Где e_x, e_y и e_z — единичные вектора, а $n_x, n_y, n_z = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$. Мы можем применить к l преобразование Фурье и в результате прямой решетке будет соответствовать обратная решетка в k -пространстве, задаваемая векторами \vec{g} .

$$\vec{g} = n_x \frac{2\pi}{a} \hat{e}_x + n_y \frac{2\pi}{a} \hat{e}_y + n_z \frac{2\pi}{a} \hat{e}_z$$

Эти вектора обладают тем свойством, что их скалярное произведение равно $2\pi m$

$$\vec{g} \cdot \vec{l} = 2\pi m, m \in \mathbb{Z}$$

Что позволяет написать

$$e^{i\vec{g}\vec{l}} = 1 = e^{i2\pi m} \quad (4.1)$$

В дальнейшем это свойство будет существенно использовать.

Теперь у нас все готово и мы можем записать уравнение Шредингера, для этого запишем гамильтониан. Мы изучаем стационарные системы, по крайней мере сейчас.

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x)$$

Далее мы рассмотрим одномерный случай. Уравнение Шредингера, стационарное, которое соответствует этому гамильтониану, имеет следующий вид:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U(x) \psi = E \psi \quad (4.2)$$

Разложим в ряд Фурье потенциальную функцию $U(x)$ и искомую волновую функцию.

$$U(x) = \sum_g U_g e^{igx}$$

$$\psi(x) = \sum_k C_k e^{ikx}$$

Подставим эти разложения в 4.2 и, после некоторых вычислений, получим

$$\sum_{k'} \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} C'_k e^{ikx} + \sum_{k'} \sum_g U(g) C_k e^{i(k'+g)x} = E \sum_{k'} C_k e^{ikx}$$

В этом уравнении нам не известны все C_k , а также значение энергии, их и нужно найти. Умножим обе части уравнения на e^{-ikx} и проинтегрируем, можно по всему кристаллу, можно по одной ячейке, результат будет одинаков. Можно показать, что получаемые интегралы будут представлять из себя символы Кронекера, они будут равны 1 при $k = k'$ и 0 при остальных значениях k' , поэтому сумма по k' снимается. В результате, после всех упрощений получим:

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) C_k + \sum_g U_g C_{k-g} = 0 \quad (4.3)$$

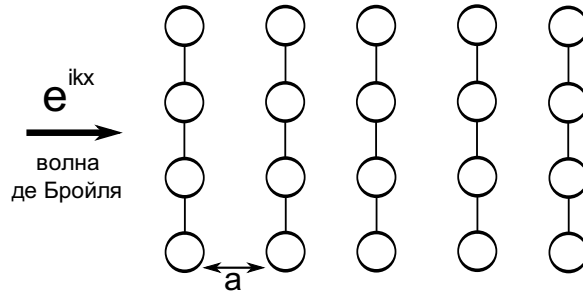


Рис. 4.2: Атомные плоскости

Вот какой простой вид принимает уравнение Шредингера. На самом деле простота здесь кажущаяся: это система зацепляющихся уравнений, k здесь может принимать множество значений. Каких именно зависит от граничных условий. Допустим, что наш кристалл имеем длину L . Тот факт, что электрон не могут выходить за его пределы, говорит о том, что $\psi(0) = \psi(L) = 0$. Так можно сделать, но неудобно, самыми удобными граничными условиями являются, так называемые, условия Борна-Кармана $\psi(0) = \psi(L)$ — периодические граничные условия. Они кажутся странными: на ограниченном кристалле значения функции на концах почему-то совпадают. Как можно такое объяснить с физической точки зрения? Кристалл должен быть свернут в кольцо.

Вопрос граничных условий исследовался довольно глубоко и в результате физики пришли к выводам, что для достаточно больших кристаллов, более десятков ячеек, граничные условия не влияют на поведение волновой функции внутри кристалла. Т.е. объемные свойства твердых тел не должны зависеть от граничных условий.

А вот когда мы исследуем поверхностные эффекты, например в популярных нынче наноструктурах, то граничные условия становятся очень важны. Мы же занимаемся только объемными задачами, поэтому воспользуемся граничными условиями Борна-Кармана. Это дает следующий набор волновых векторов (пока примем их на веру, а потом проверим, когда найдем волновую функцию)

$$K_n = \frac{2\pi}{L}n$$

Вектора обратной решетки содержат a — очень маленький размер, а вектора прямой решетки L — очень большой размер. Значит вектора прямой решетки расположены очень густо, а обратной, наоборот, очень редко.

Главное здесь то, что K_n квантовано. В ?? мы получаем систему зацепляющихся уравнений. Ее можно решить, только обрывая. Но даже если не решая ее, можно получить важные качественные результаты. Одномерный кристалл — можно представить себе как периодическое повторение атомных плоскостей, расстояние между которыми a .

И в этот кристалл инжектируется плоская волна. e^{ikx} . Т.е. волна де Бройля, так как свободный электрон описывается волной де Бройля. Мы знаем, что на этих плоскостях происходит дифракция. В результате дифракции по-

рождаются дифрагированные волны. Это плоские волны, вектор которых сдвинут на вектор обратной относительно решетки. Это явление и описывается уравнением Шредингера. $C_k - g$ это амплитуды дифрагированных волн, ведь у них волновой вектор равен $k - g$, то есть сдвинут на вектор обратной решетки.

Электрон испытывает дифракцию и превращается в волновой пакет, вектора волн которого равны $k - g$. Это важный качественный вывод, так означает, что в Фурье-разложении волновой функции фигурируют не все k , а лишь одно k и совокупность всех $k - g$, где g пробегает дискретный ряд значений.

$$\psi_k(x) = \sum_g (C_{k-g} e^{-igx}) e^{ikx} \quad (4.4)$$

Где $g \in \mathbb{Z}$, причем при $g = 0$ мы получаем C_k , то есть инжектированную волну, а при остальных значениях дифрагированные волны. Просуммируем все волны, включая исходную и получим волновую функцию электрона в кристалле. В классическом виде она записывается вот так:

$$A_k(x) e^{ikx}$$

Это квазиплоская волна, почти волна де Бройля, но её амплитуда зависит от x следующим образом.

$$A_k(x) = \sum_g C_{k-g} e^{-igx}$$

Мы не решили задачу полностью, так как C_{k-g} не определены. Для полного решения задачи нужно определить потенциал, но для нас это сейчас неактуально, а актуален вид этой функции, из него вытекают два свойства амплитуды:

1.

$$A_{k \pm g}(x) = A_k(x)$$

Амплитуда периодична и периодом равным любому вектору обратной решетки.

2.

$$A_k(x) = A_k(x + a)$$

Амплитуда периодична с периодом с периодом, равным периоду прямой решетки. Но сама волновая функция не периодична, так как появляются фазовые сдвиги.

То, что волновая функция имеет такой вид является сутью теоремы Блоха.

Теорема Блоха

У электрона, движущегося в периодическом потенциале, волновая функция задается Блоховской функцией

$$\psi_k(x) = A_k(x) e^{ikx} \sum_g C_{k-g} e^{-igx} \quad (4.5)$$

и амплитуда обладает двумя вышеприведенными свойствами.

Каково основное физическое свойство этой теоремы? Кристалл — это ящик, набитый тяжелыми заряженными частицами-ионами. В одном кубическом см частиц порядка 10^{23} . В этом ящике движется частица с другим зарядом, кулоновское взаимодействие огромно. Но теорема Блоха и квантовая физика утверждают, что электрон движется в ящике, испытывая кулоновское взаимодействие без какого-либо рассеяния.

Величина $\hbar\vec{k}$ называется квазиимпульсом и обозначается \vec{p} . Часто приставку "квази" опускают и просто говорят "импульс электрона".

Теорема Блоха говорит о том, что если мы возьмем электрон, придадим ему импульс, то он пройдет через кристалл абсолютно не почувствовав ионов. Это фантастический результат, противоречащий классической физике. Но основное условие его — строгая периодичность кристалла. Причина в том, что дифрагированные волны, интерферируя друг с другом, гасятся. Остается только одна волна, инжектированная. В квантовых компьютерах используется такой же принцип — неверные результаты гасят друг друга, а верный имеет наибольшую вероятность.

Если бы кристаллы были идеальными, они бы проводили электрический ток без сопротивления. Но мы все знаем, что кристалл обладает сопротивлением. Причина этого — нестрогая периодичность решетки. Атомы в реальном кристалле совершают тепловые колебания, и на нерегулярностях решетки возникает сопротивление. Но есть явление сверхпроводимости, когда кристаллы становятся идеально проводящими. Это более сложное квантово-механическое явление, объясняющееся по-другому. Сейчас обсуждается обычная проводимость.

Таким образом мы установили вид стационарной волновой функции. Число k называется также квантовым числом и описывается волновой функцией. Говорят, что электрон находится в состоянии с квазиимпульсом k или просто в K -состоянии.

4.1.2 Энергетический спектр электрона в кристаллической решетке

Теперь, когда нам известна волновая функция электрона мы можем поставить второй, чрезвычайно важный, вопрос: "каков энергетический спектр электрона?" Ответ на этот вопрос привел к изобретению транзистора, созданию полупроводникового лазера и целого ряда квантово-механических приборов.

При ответе на него мы будем использовать приближение почти свободных электронов. Представим себе потенциальный ящик — ту же потенциальную яму. Когда есть достаточно большое количество электронов, получается электронный газ. Можно ли рассматривать электроны независимо, ведь между ними сильное кулоновское взаимодействие? Энергия его огромна — несколько электронвольт. Если электроны находятся в пустоте, то ни в коем случае, однако, если речь идет о кристалле, то вполне можно.

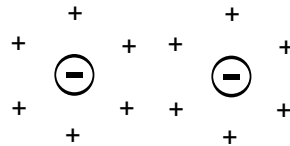


Рис. 4.3: Экранирование

Дело в том, что в твердом теле есть решетка ионов. Она — равномерно размазанный по пространству заряд. Рассмотрим два электрона. Допустим,

они находятся на малых расстояниях, будут ли они взаимодействовать? Оказывается, что в кристалле взаимодействия между ними практически нет. Электрон отталкивает окружающие электроны, в результате он находится в окружении нескомпенсированного положительного заряда. Когда заряд электрона и окружающих его ионов уравнивается, наступает равновесие, возникает эффект экранировки. Снаружи такая система зарядов не создает электрического поля. Аналогичная ситуация возникает и со вторым электроном, в результате чего взаимодействие исчезает. А раз они независимы, то мы можем воспользоваться одноэлектронным приближением и далее рассматривать одиночный электрон.

Спектр энергий или зависимость энергии от квантового числа одиночного свободного электрона мы уже находили

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

Это парабола, но волновое число квантовано. Для выполнения граничных условий Борна-Кармана для функции 4.5 нам нужно поставить условие периодичности:

$$e^{ikL} = 1$$

Значит $kl = 2\pi n, n \in \mathbb{Z}$, что дает размер ячейки квантования равный $\frac{2\pi}{L}n$. Это очень маленькая ячейка. Каждому k соответствует свой разрешенный энергетический уровень.

Пока у нас электрон двигался в потенциальном ящике с размазанным зарядом, никакой периодичности расположения ионов мы не учитывали. Как изменится спектр, когда мы добавим периодичность? Расположим в ящике атомные плоскости на расстоянии a порядка ангстрема (10^{-8} см), а сам кристалл возьмем размером порядка миллиметра (10^{-2} см). Что произойдет со спектром?

Электрон описывается волной 4.5. Мы будем просто считать волну плоской. Волна отразится от первой плоскости, пройдет дальше, отразится от второй плоскости. Достаточно рассмотреть эти две волны, из-за периодичности рассмотрение остальных не даст изменения результата анализа. Волны интерферируют и могут либо усилить друг друга, либо погасить. Запишем условие конструктивной интерференции, то есть когда волны усиливают друг друга. Разность хода должна (в нашем случае $2a$) должна равняться целому числу волн.

$$2a = n\lambda = m \frac{2\pi}{k}, m \in \mathbb{Z}$$

Переформулируем условие.

Условие конструктивной интерференции

$$\lambda_m = m \frac{\pi}{a}$$

При таких условиях возникает сильная отраженная волна.

Если электрон находится в ящике, то спектр имеет следующий вид. Ось K квантована, размер — $\frac{2\pi}{L}$. Возьмем k_m соответствующее самому малому

значению m . Ему соответствуют точки $\frac{\pi}{a}$ и $-\frac{\pi}{a}$. Пока электрон находится в состоянии, лежащих между этими точками, конструктивной интерференции нет, волны гасят друг друга.

В самих же точках возникает сильная отраженная волна, в кристалле распространяются падающая и отраженная волна и у них одинаковая амплитуда.

Зона, заключенная в интервале

$$-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$$

называется первой зоной Бриллюэна. Ее ширина — $\frac{2\pi}{a}$. На это ни что иное, как вектор обратной решетки. И на границе зоны Бриллюэна существует только две волны: прямая и отраженная. Значит в волновом пакете 4.4 нужно оставить только две волны. Падающая волна имеет волновой вектор $\frac{\pi}{a} = \frac{g_1}{2}$.

Следовательно оставляем слагаемые, относящиеся к падающей волне

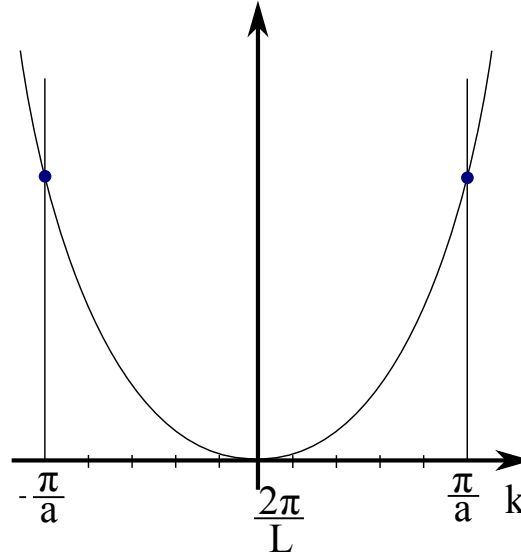


Рис. 4.4: Энергия в 1^{ой} зоне Бриллюэна без учета потенциального поля

$$C_{\frac{g_1}{2}} e^{i \frac{g_1}{2} x}$$

и отраженной волне

$$C_{k-g_1} e^{-i \frac{g_1}{2} x} = C_{-\frac{g_1}{2}} e^{-i \frac{g_1}{2} x}$$

Тогда в уравнении Шредингера 4.3 остается только два коэффициента

$$(E_{\frac{g_1}{2}}^0 - E) C_{\frac{g_1}{2}} + U_{g_1} C_{-\frac{g_1}{2}} = 0$$

а из зацепляющихся уравнений только два уравнения и их уже легко выписать:

$$E_{\frac{g_1}{2}}^0 = \left(\frac{\hbar^2 x^2}{2m} \right), k = \frac{g_1}{2}$$

$$U_{-\frac{g_1}{2}} C_{\frac{g_1}{2}} + E_{-\frac{g_1}{2}}^0 C_{\frac{g_1}{2}} = 0$$

Из них найдем неизвестную нам энергию в точке $\frac{g_1}{2}$

$$E_{\pm \frac{g_1}{2}} = E_{\frac{g_1}{2}}^0 \pm |U_{g_1}| \tag{4.6}$$

То есть при помещении электрона в потенциальное поле мы получили добавку $|U_{g_1}|$, причем для одного значения волнового вектора получили два значения энергии. Это и позволяет работать транзисторам, лазерам и многим другим приборам.

4.2 Разрешенные и запрещенные зоны

То, что в 4.6 мы получили два значения энергии говорит о том, как изменится график 4.7, если мы учтем потенциальное поле. Нужно симметрично сдвинуть значение энергии вверх и вниз. Пока мы далеки от точек, в которых возникает конструктивная интерференция, график меняется не сильно, но в самих этих точках функция имеет разрыв.

Мы получили важнейший физический эффект, коорый обеспечивает работу всех квантовых приборов: мы получили зоны разрешенных и запрещенных энергий. Они возникают из-за того, что вектор k квантован и каждому значению k соответствует энергетический уровень. Ширина запрещенной зоны равна $E_g = 2|U_{g1}|$, то есть зависит от электрон–решеточного взаимодействия, это же фурье–компонента электрон–ионного взаимодействия. И таких зон много: мы рассмотрели только $m = 1$, при других значениях m будем получить другие запрещенные зоны.

Таким образом спектр электрона, движущегося в периодическом потенциале, зонный. Нам уже известны непрерывный и дискретный спектры, теперь к этому списку можем добавить зонный спектр.

Та схем, которую мы рисовали до этого называется расширенной схемой зон. В учебниках чаще рисуют приведенную схему. Волновая функция обладает свойством периодичности. Если волновая функция периодична, то все ее свойства должны быть периодичны, а значит спектр можно сдвигать на любой вектор обратной решетки. Добавим в нашу схему её же, сдвинутую на вектор обратной решетки и возьмем ту её часть, которая относится к разрыву функции, и получим приведенную схему.

Важным обстоятельством является тот факт, что ось k является квантованной.

Полученная схема помогает объяснить, как работает лазер. Электроны переходят из зоны в зону, при уменьшении потенциальной энергии происходит выделение энергии. Также мы можем объяснить, как работает транзистор, но этому будет посвящена отдельная лекция.

4.2.1 Металлы, полупроводники и диэлектрики

Как с точки зрения зонной картины объяснить тот факт, что в природе есть три типа твердых тел: металлы, полупроводники и диэлектрики? Зонная

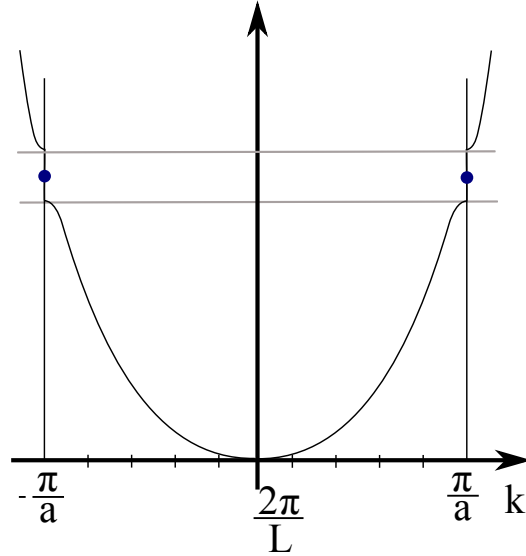


Рис. 4.5: Энергия в 1^{ой} зоне Бриллюэна

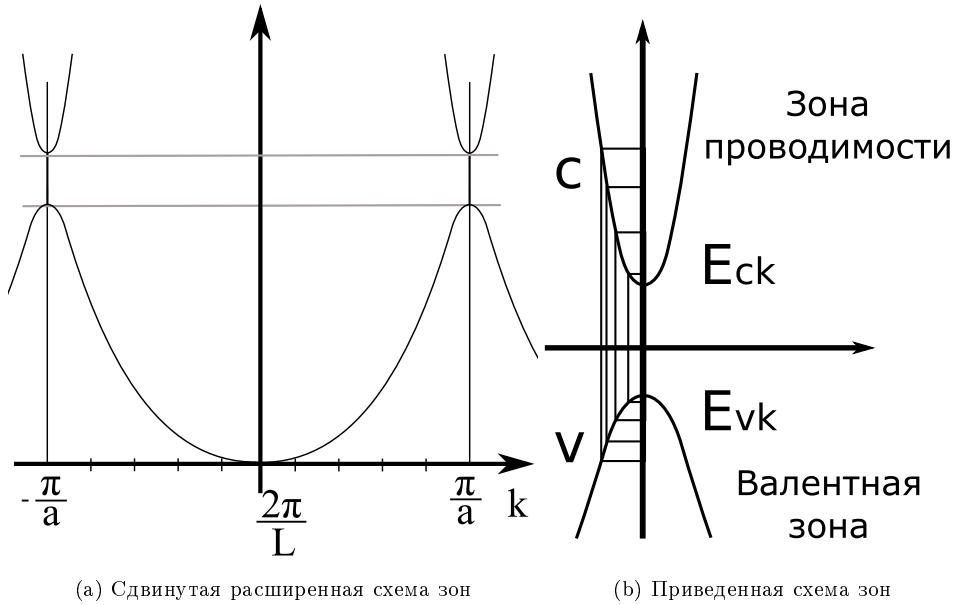


Рис. 4.6: Получение приведенной схемы зон

картина дает на это ответ.

Рассмотрим, как заполняются энергетические зоны в атоме. Каждому значению волнового числа соответствует энергетический уровень E_{kc} . Рассмотрим одноатомный кристалл, то есть кристалл в узлах которого располагаются одиночные атомы.

Для простоты рассмотрим ситуацию с одним валентным электроном на последней орбите, например кристалл натрия. Из 11 электронов у натрия 10 связаны на внутренних оболочках, а один электрон валентен. Соединим атомы в решетку, что получим? Металл, полупроводник или диэлектрик? Все зависит от ширины запрещенной зоны $E_{kc} - E_{kv}$.

Металл — хороший проводник электрического тока. У него запрещенная зона очень тонкая, электроны легко переходят в зоны проводимости и обобществляются. Диэлектрик — изолятор. У него запрещенная зона порядка 10 эВ. Например у NaCl она 9 эВ. Чтобы перевести электроны в зону проводимости нужно затратить много энергии, для сравнения, типичный квант лазера имеет энергию 1 эВ. Полупроводник занимает промежуточное положение. Это тот же изолятор, но ширина запрещенной зоны маленькая, в несколько раз меньше, чем у изолятора (1 – 0.1 эВ). Поэтому полупроводнику довольно легко придать свойства проводника введя примеси.

Чем же является натрий — металлом или диэлектриком? Подсчитаем число разрешенных состояний.

$$\frac{\frac{2\pi}{a}}{\frac{2\pi}{L}} = \frac{L}{a} = N \quad (4.7)$$

А это число атомов в кристалле. Итого мы имеем $2N$ разрешенных состояний т.к. в одном состоянии k может находиться два электрона. Так как

атом одновалентный, то электронов у нас будет всего N .

Если зона содержит вакантные состояния, она токопроводящая.
Полностью заполненная зона не проводит электрический ток.

В обычных условиях материалы не проводят, когда их валентность четная (например 2). Чтобы сделать их токопроводящими нужно каким-то образом возбудить электроны.

Построение основного состояния

Основное состояние — это состояние атома при температуре равной абсолютному нулю. Мы рассаживаем электроны, начиная с нижнего уровня. Энергетические уровни заполняются, пока электроны не исчерпаются. Если электрон попадает в зону проводимости, то он не принадлежит тому или иному атому, а обобществлен — принадлежит любому атому. Таким образом в кристалле образуется электронный газ. В случае четной валентности получается диэлектрик, в случае нечетной — металл.

Впрочем, есть и исключения. Например, кальций. Он плохой металл, но у него на последней оболочке 2 электрона. Чем это объясняется? Валентная зона и зона проводимости могут быть смещены друг относительно друга так, что нижняя часть верхней зоны будет ниже верхней части нижней зоны. Тогда энергетически выгодно образовать вакантное состояние в нижней зоне и кристалл будет иметь проводимость.

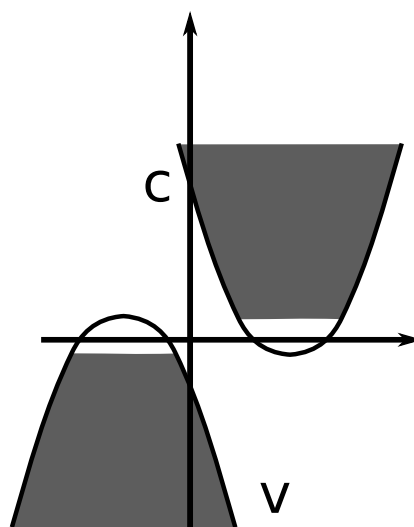


Рис. 4.7: Случай сдвинутых валентной зоны и зоны проводимости

Принцип Паули
В случае фермионов в каждом квантовом состоянии находится не более одной частицы

Лекция 5

5.1 Транзистор

Содержание лекции:

- Электроны и дырки в полупроводниках.
- Легирование полупроводников. Доноры и акцепторы.
- Энергия ионизации примесного центра.
- Принципы работы p-n перехода и транзистора.
- Реализация бита транзистором в классическом компьютере

Транзистор — основной элемент современных классических компьютеров. Поэтому просто необходимо представлять себе, как он работает.

Транзистор — квантовый элемент.

5.2 Электроны и дырки в полупроводниках

Дырка, в отличие от электрона — чисто квантовый объект. Электрон, хоть и является квантовым объектом, пришел в квантовую физику из классической физики (катодные лучи, электронные трубки — все это существовало задолго до квантовой физики). Электроны представляли собой заряженные шарики, которые двигались под действием электрического и магнитного поля. Не было бы дырок — не было бы и транзисторов, существование дырок — необходимое условие для существования современных компьютеров.

Итак, что же такое дырка (h, по английски — hole)?

Все транзисторы сделаны сейчас на кремнии. Кремний — главный полупроводник.

Имеется вся заполненная электронами зона. Для простоты считаем что $T = 0$, тогда все электроны сидят внизу, теплового возбуждения нет.

Допустим, каким-то образом нам удалось перевести электрон из нижней зоны в верхнюю. В заполненной зоне образовалось одно вакантное место электрона. Вся заполненная зона плюс одно вакантное состояние называется дыркой. Из этого определения можно извлечь все физические свойства дырки. Дырка обладает целой совокупностью свойством. Причем, если мы возьмем электрон и перечислим его свойства: заряд, скорость, энергия, масса и т.д., то аналогично для дырки существуют заряд, импульс, скорость,

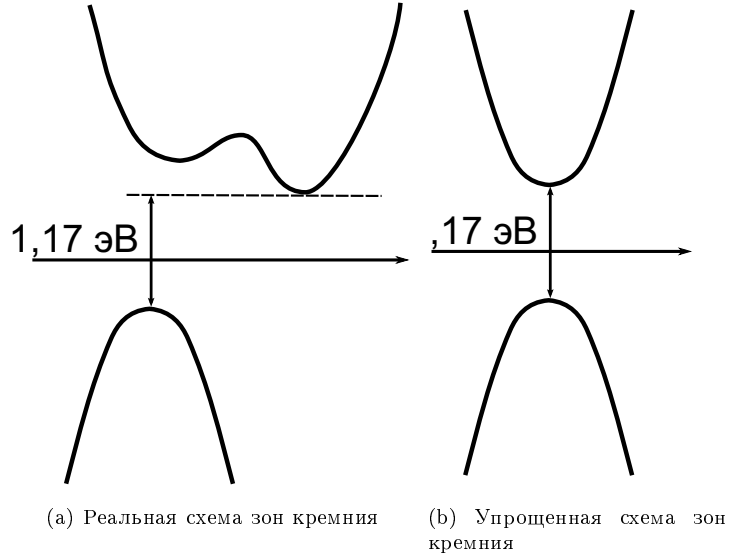


Рис. 5.1: Для кремния экстремумы смещены, но мы будем игнорировать этот факт, по скольку это существенно ничего не меняет

энергия, масса и т.д. Забегая вперед скажем, что у дырки положительный заряд. В результате — есть два носителя заряда в полупроводнике: отрицательный носитель заряда электрон и положительный носитель заряда дырка.

Когда мы рассматриваем работу транзистора, и те и другие носители работают наравне. Более того, как мы уже говорили ранее: не было бы дырки — не было бы транзистора.

Рассмотрим некоторые свойства дырок:

- Квазиимпульс. Возьмем всю зону и удалим один электрон из состояния k . Поскольку вся зона симметрична относительно нуля, то соответствующая сумма равна нулю:

$$\hbar\vec{k}_h = \sum_{k'} \hbar\vec{k}' - \hbar\vec{k} = 0 - \hbar\vec{k} = -\hbar\vec{k}$$

Таким образом квазиимпульс дырки равен квазиимпульсу уделенного из состояния k электрона со знаком минус.

- Плотность тока и заряд. Снова воспользуемся определением дырки:

$$\vec{j}_h = -\frac{2|e|}{v} \sum_{k'} \vec{v}_{k'} + \frac{|e|}{v} v_{\vec{k}} = \frac{|e|}{v} \vec{v}_{\vec{k}}$$

где v — объем кристалла. В результате получили, что дырка имеет равный с электроном по модулю положительный заряд.

Следующий вывод очень важен для описания работы транзистора:

$$J = J_e + J_h$$

Полный ток складывается из электронного тока и дырочного.

- **Масса.** Масса дырки равняется массе удаленного электрона. Мы удалили электрон и получили частицу с массой удаленного электрона. В зоне проводимости эффективная масса меньше, чем в валентной зоне. В кремнии, например, эффективная масса электрона в зоне проводимости в 10 раз меньше, чем масса свободного электрона. Это удивительный вывод квантовой механики. Казалось бы, должно быть наоборот. При распространении электрон — это волна, поэтому уменьшение массы — это уменьшение характеристики распространения волны. Подробнее об этом будет рассказано позднее.

Аналогично выводится значение энергии для дырки и т.д.

5.3 Легирование полупроводников. Доноры и акцепторы.

Физика атома водорода в этом разделе играет определяющую роль¹. Доноры и акцепторы определяют работу транзистора.

Почему нужно вводить примесь? Все дело в том, что свободных электронов и дырок в собственном полупроводнике очень мало (собственный полупроводник — это полупроводник без примесей).

Сделаем оценку токов (а точнее электропроводности) для собственных полупроводников. Коэффициент электропроводности фигурирует в законе Ома.

$$j_e = \sigma_e E$$

где σ_e — электропроводность.

$$\sigma_e = \frac{e^2 n_e \tau}{m_e^*} \sim n_e$$

где m_e^* — эффективная масса электрона, τ — время свободного пробега, n_e — концентрация электронов в зоне проводимости.

У нас есть полностью заполненная валентная зона и полностью пустая зона проводимости, расстояние между ними E_g . Оценим связь концентрации электронов в верхней и нижней зонах, воспользовавшись распределением Больцмана.

$$n_e = n_v e^{-\frac{E_g}{K_B T}} = 10^{23} e^{-\frac{1}{2.5 \cdot 10^{-2}}} \sim 10^6 \frac{1}{\text{см}^3}$$

где K_B — постоянная Больцмана. Температуру возьмем комнатную ($T = 300\text{K}$).

$$\frac{\sigma_{\text{ш}}}{\sigma_{\text{металл}}} \sim 10^{-17} \frac{1}{\text{см}^3}$$

В результате получаем очень низкую проводимость для собственного полупроводника. Поэтому вводят примеси, чтобы получить приемлимые величины порядка $10^{21} \frac{1}{\text{см}^3}$.

¹Теория атома водорода будет на следующей лекции.

Можно поступать двояким образом: вводить доноры или акцепторы. Доноры дают n-тип проводимости, т.е. вводят электроны. Акцепторы дают p-тип проводимости, т.е. вводят дырки. Рассмотрим как это делается на примере кремния.

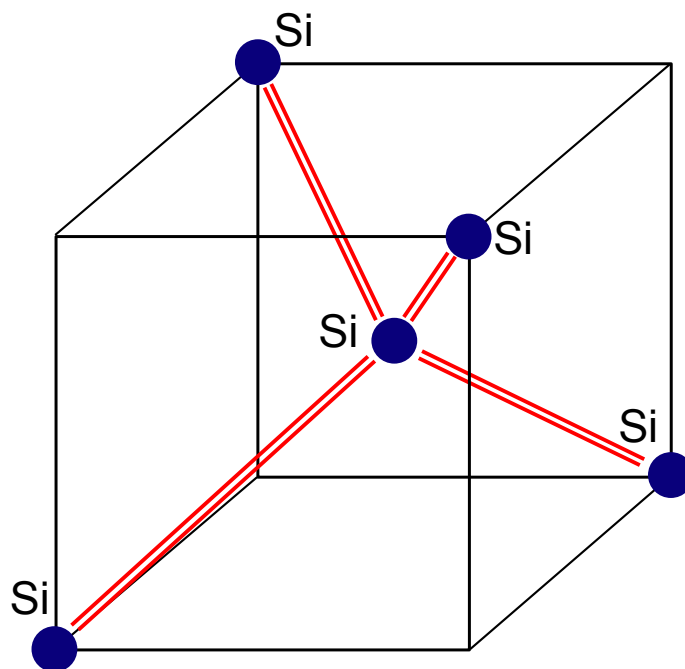


Рис. 5.2: Ячейка кристалла кремния

Каждый атом кремния связан с четырьмя своими соседями ковалентными связями (в каждой связи участвуют два электрона). Валентность кремния равняется 4, т.е. на последней оболочке находится 4 электрона. В результате получаются насыщенные связи, все электроны задействованы.

В такой кристалл вводятся либо пентавалентный элемент, либо тривалентный. Пентавалентный элемент: мышьяк (As) — 5 электронов, донор, n-тип проводимости. Тривалентный элемент: бор (B) — 3 электрона, акцептор, p-тип проводимости.

4 электрона мышьяк отдает на связи с атомами кремния, но один электрон останется лишним.

5.4 Энергия ионизации примесного центра.

В результате есть ион, вокруг которого вращается свободный электрон. Эта ситуация очень напоминает атом водорода, в котором также есть один свободный электрон, вращающийся вокруг положительного иона. В результате задача легирования совершенно аналогична задаче расчета спектра атома водорода. Эта задача необходима чтобы получить значение энергии связи этого электрона. Если связь очень сильная, то ион не отдаст электрон, но

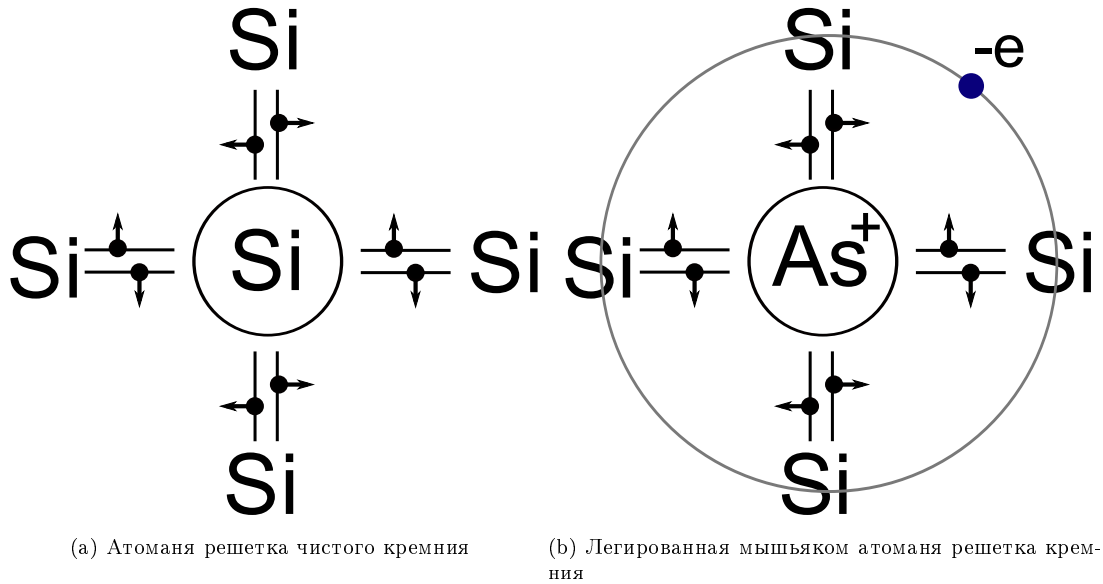


Рис. 5.3: Атомная решетка кремния

если тепловая энергия в кристалле будет больше, чем энергия связи, электроны будут оторваны от ионов, т.е.:

$$E_{\text{связи}} \ll K_B T$$

Поставим задачу в терминах физики атома водорода и используем готовые результаты². Уравнение Шредингера:

$$\left(\frac{\vec{P}^2}{2m_e^*} + \frac{e^2}{r\epsilon_0} \right) \Psi = E\Psi$$

Выпишем решение задачи о спектре атома водорода:

$$E_n = -\frac{m_e^*}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \frac{1}{\epsilon_0^2} = (E_n^{\text{водород}}) \left(\frac{m_e^*}{m_e} \right) \frac{1}{\epsilon_0^2}$$

Возьмем $n = 1$

$$E_{\text{ионизации}}^{\text{Нводорода}} = 13,6 \text{ эВ}$$

Оценим оставшийся множитель:

$$\left(\frac{m_l^*}{m_l} \right) \frac{1}{\epsilon_0^2}$$

для кремния $\epsilon_0 \sim 15$

$$E_{\text{связи}} = 10^{-3} \text{ эВ}$$

$$K_B T = 2.5 * 10^{-2} \text{ эВ}$$

²Получение результатов рассмотрено в следующей лекции.

$$k_B T \gg E_{\text{связи}}$$

В результате мы получили большое количество свободных электронов, легированный полупроводник n-типа.

Рассуждения для бора аналогичны (валентность 3). При легировании бором получаем достаточное количество дырок, возникает проводимость p-типа.

5.5 Принципы работы p-n перехода и транзистора

p-n переход — это две смежных области: p-область и n-область.

Технологический процесс получения p-n перехода заключается в следующем: ионный пучок облучает область на пластинке кремния, ионы проникают в глубину на микроны и десятые доли микрона, и только там, где ионы проникли в кремний, будут легированные зоны.

Нас будет интересовать ток, проходящий через описанный элемент. По сути, p-n переход — это полупроводниковый выпрямитель. Как он работает? p-область — избыток дырок, n-область — избыток электронов. В целом эти области электронейтральны. Изобразим концентрацию дырок и электронов.

При контакте двух областей n- и p- типа из-за градиента концентрации носителей заряда возникает диффузия последних в области с противоположным типом электропроводности, возникает диффузионный ток. Ток направлен туда же, куда двигаются дырки. Дырочный и диффузионный ток направлены в одну сторону. В p-области вблизи контакта после диффузии из неё дырок остаются нескомпенсированные ионизированные акцепторы (отрицательные неподвижные заряды), а в n-области — нескомпенсированные ионизированные доноры (положительные неподвижные заряды). Возникает двойной слой, аналогично зараженному конденсатору. Ток проводимости направлен в противоположную сторону току возникшего поля. Ток проводимости будет точно скомпенсирован диффузионными токами. Возникнет стационарное состояние.

Теперь возьмем электрон и будем двигать его от $-\infty$ к $+\infty$. Потенциальная энергия системы в начале возрастает, а потом остается неизменной. В этом суть работы p-n перехода — энергетический барьер. Запомнив это, можно восстановить весь ход рассуждений Барьер существует в стационарном состоянии. Приложим внешнее напряжение, так чтобы положительный потенциал был приложен к p-области. При этом потенциальный барьер уменьшится. Баланс диффузионных токов и омических нарушится: диффузионный ток увеличится, омический — останется прежним. В результате — p-n переход откроется. Приложение отрицательного потенциала к p-области (обратное смещение) приводит к повышению потенциального барьера. Диффузия основных носителей через переход становится пренебрежимо малой. Таким образом, p-n переход работает как выпрямитель. Аналогичные рассуждения можно провести для дырок.

Транзистор — это два p-n перехода. Рассмотрим pnp-транзистор. Электрод, подключённый к центральному слою, называют базой, электроды, подключённые к внешним слоям, называют коллектором и эмиттером. На базу подается управляющее напряжение. В pnp транзисторе электроны, ос-

новные носители тока в эмиттере, проходят через открытый переход эмиттер-база (инжектируются) в область базы. Часть этих электронов рекомбинирует с основными носителями заряда в базе (дырками), часть диффундирует обратно в эмиттер. Однако, из-за того что базу делают очень тонкой и сравнительно слабо легированной, большая часть электронов, инжектированных из эмиттера, диффундирует в область коллектора. Сильное электрическое поле коллекторного перехода захватывает электроны и пронесит их в коллектор. Ток коллектора, таким образом, практически равен току эмиттера. Если на базу подано отрицательное напряжение, тока через транзистор нет, если положительное, есть.

5.6 Реализация бита транзистором в классическом компьютере

Необходимо договориться что обозначает 0, а что 1. 1 - ток есть или отрицательный потенциал, 0 - тока нет или положительный потенциал.

Реализация транзисторами логических операций в обычных компьютерах. Реализация операции NOT в компьютере.

Инвертор представляет собой двоичный логический элемент, единица на выходе которого имеет место в том случае, если на входе будет ноль. Подаем единицу, получаем ноль. Подаем ноль, получаем единицу. Это принцип работы элемента с двумя состояниями.

Сейчас размеры транзисторов порядка десятков нанометров и продолжают уменьшаться.

Лекция 6

Основная тема лекции — атом водорода. Последняя лекция, посвященная волновой квантовой механике. Затем перейдем к матричной формулировке.

6.1 Атом водорода

Это — первая решенная реальная задача. От нее недалеко до атома воды. Задача была решена Шредингером в начале развития квантовой механики. Косвенно она связана с транзисторами¹.

В теории примесей, центров возникает водородоподобный спектр. Как же решается эта задача? Мы не будем решать ее досконально.

Что представляет собой атом водорода?

Это положительно заряженное ядро-протон и отрицательно заряженный электрон на орбите. Ядро имеет размер порядка 10^{-13} см, а размер всего атома — около 0.5^{-8} см. Поэтому любой рисунок, изображающий атом, будет весьма условен. Поскольку масса ядра больше массы электрона приблизительно в 10^3 раз, можно считать ядро неподвижным. Задачу можно существенно упростить. Представим ядро как точку.

Прежде всего запишем гамильтониан.

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} - \frac{ze^2}{r}$$

Заряд ядра здесь — z . Так мы можем включить в область применения формулы и водородоподобные атомы с отличающимся зарядом. В прошлый раз было что-то похожее — в примеси заряд иона отличается от заряда электрона.

Переходим к оператору Гамильтона.

$$\hat{P} = -i\hbar\nabla$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{ze^2}{r^2}$$

$$0 \leq r \leq +\infty$$

$$0 \leq \theta \leq \pi$$

¹См. предыдущую лекцию.

$$0 \leq \phi \leq 2\pi$$

$$\Delta = \Delta_r + \Delta_{\theta,\phi}$$

Теперь запишем лапласиан в сферических координатах. Радиальная часть:

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

Сферическая часть:

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

В нашем случае выполняется стационарное уравнение Шредингера:

$$H\phi = E\phi$$

Подставим:

$$H = -(\Delta_r + \Delta_{\theta,\phi}) \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{ze^2}{r}$$

Искомая волновая функция представляется в виде произведения радиальной, которая зависит только от r , и угловой, сферической части:

$$\phi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$$

Используем метод разделения переменных. Подставляем функцию в уравнение Шредингера. Уравнение для радиальной части:

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

Здесь появляется эффективная потенциальная энергия, равная следующей величине:

$$U_{\text{эфф}} = -\frac{ze^2}{r} + \lambda \frac{\hbar^2}{2mr^2}$$

Уравнение для угловой, сферической части:

$$\Delta_{\theta,\phi} Y + \lambda Y = 0$$

Но функция Y в свою очередь тоже зависит от двух переменных:

$$Y = Y(\theta, \phi)$$

Снова проводим разделение переменных:

$$Y(\theta, \phi) = \theta(\theta)\Phi(\phi)$$

Подставляем в уравнение, делим на Y , приравниваем к новой постоянной разделения m^2 и переносим все в одну часть:

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

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} \right) \Theta + \left(\lambda - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta = 0$$

Получили три уравнения. Проще всего найти Φ :

$$\Phi(\phi) = C e^{i\phi m}$$

m называется магнитным квантовым числом. Граничные условия:

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

Для такой функции и таких граничных условий:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

Второе уравнение. Рассмотрим начальный этап решения этого уравнения:

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

Существует регулярный метод решения такого рода уравнений: метод разложения в ряд.² Условия сходимости приводят к следующим ограничениям:

$$\lambda = l(l+1), l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

где l — орбитальное квантовое число. Решением уравнением являются полиномы Лежандра.

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

Теперь можем записать сферическую волновую функцию:

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) = c_{lm} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\phi}$$

Берем соответствующие производные. Производные зануляются, если выполняются следующие условия:

$$|m| > l, P_l^{|m|}(\xi) = 0$$

$$l = 0, 1, 2, \dots$$

На этом завершается анализ сферической части задачи. Сейчас была только математика, физики практически не было. Лишь после построения математических конструкций они привязываются к физическим объектам. Такая ситуация характерна для квантовой механики.

Обратимся к истории. Процедура понимания Копенгагенской интерпретации была сложной и долгой. Интерпретация категорически не укладывалась в рамки классических представлений. Решение пришло, когда вместо вопроса о нахождении математического аппарата, соответствующего физической модели поставили вопрос о физической реальности, соответствующей математическому аппарату. Это решило проблему.

Продолжим исследование уравнения Шредингера. Теперь исследуем радиальную функцию, заменим переменные:

$$R(r) = \frac{f(r)}{r}$$

² Полное решение этого уравнения изложено в [1].

Получим следующее уравнение:

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

Что напоминает нам это уравнение? Это уравнение движения частицы в потенциальной яме. Спектр энергии должен быть дискретным. Чтобы понять, что это яма, нужно исследовать $U_{\text{эфф}}$:

$$U_{\text{эфф}}(r) = -\frac{ze^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2mr^2} l(l+1) \quad (6.1)$$

Вид этой функции зависит от l . Возьмем простейший случай $l = 0$. Построим график.

График ровный, с провалом вниз в середине. По классическим законам электрон должен был бы упасть на дно ямы, т.е. прилипнуть к ядру. Он этого не делает из-за соотношения неопределенности. Чем больше мы локализуем электрон, тем больше неопределенность энергии. За счет этого, при локализации электрона в районе ядра энергия начинает возрастать. В результате возникает некоторый уровень энергии E_0 . Ниже него опуститься невозможно из-за соотношения неопределенности. Есть и более высокие уровни энергии E_1, E_2, \dots . В совокупности они образуют спектр энергии для состояния $l = 0$ (S -состояние).

Теперь рассмотрим $l > 0$.

В середине графика функция уже уходит не вниз, а вверх, все равно есть потенциальная яма, но не бесконечная. Снова получаем дискретный спектр.

В результате задача 6.1 решается ³, при этом возникает третья, главное квантовое число n . Чуть позже мы выпишем решение для малых квантовых чисел.

Выпишем спектр собственных значений:

$$E_n = -\frac{z^2 e^4 m}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

Это следует из решения радиального уравнения 6.1.

Энергия ионизации — энергия, необходимая для отрыва электрона от атома водорода:

$$E_{\text{ion}} = |E_1| = 12.6 \text{ эВ}$$

Энергия атома водорода зависит только от главного квантового числа, но в общем случае это не так. Какие значения могут принимать квантовые числа:

$$n = 1, 2, \dots$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

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

На этом заканчивается формальный анализ уравнения Шредингера.

Будем исследовать свойства этих математических результатов. Нас будет интересовать картина атома.

³См. [1]

Картина атома в классической физике — планетарная модель. Резерфорд провел эксперименты по бомбардировке атома альфа-частицами, пришел к выводу о вращении электронов вокруг ядра аналогично планетам вокруг Солнца и ничтожности доли ядра по сравнению с размерами атома.

А какая картина атома следует из нашего решения? У нас есть волновая функция:

$$|\phi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)|^2$$

но этого недостаточно, чтобы говорить о физических свойствах объекта. Когда волновая функция зависела только от x этого было достаточно, чтобы говорить: "Это плотность вероятности того, что мы обнаружим электрон в точке x ." А здесь этого недостаточно и вот почему. Запишем вероятность того что мы обнаружим электрон с координатами (r, θ, ϕ) . Поскольку мы говорим о вероятности нам нужно задать не точку, а некоторый объем. Зададим вероятность в бесконечном малом объеме:

$$dP(r, \theta, \phi) = |\phi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)|^2 \sin \theta d\theta d\phi r^2 dr$$

$\sin \theta d\theta d\phi r^2 dr = dV$ — элементарный объем, окружающий точку с координатами (r, θ, ϕ) . Найдем вероятность того, что электрон обнаружится в точке r , в интервале dr :

$$dP(r) = \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi dP(r, \theta, \phi)$$

Плотность вероятности того, что электрон обнаружится в точке r :

$$w(r) = |R_{n,l,m}(r)|^2 r^2$$

Найдем также плотность вероятности нахождения электрона на сфере в точке с углами (θ, ϕ) , аналогично:

$$w(\theta, \phi) = |Y(\theta, \phi)|^2 \sin \theta$$

Какова вероятность обнаружения электрона в заданной точке пространства r , если он находится в квантовом состоянии n, l, m ? Когда квантовые числа становятся большими, картина становится настолько экзотической, что ее невозможно изобразить даже приближенно.

Возьмем самое низкое квантовое состояние. Главное квантовое число $n = 1$. Если так, то $l = 0$, $m = 0$. Мы рассматриваем S -состояние.

$$\phi_{100} = R_{100}(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

Радиальная зависимость:

$$R_{100}(r) = \text{сexp} \left(\frac{r}{a_0} \right)$$

$$a_0 = 0.5 \cdot 10^{-8} \text{ см} — \text{ радиус Бора}$$

Плотность вероятности:

$$w_{100}(x) = |R_{100}(r)|^2 r^2$$

Точка максимума совпадает с радиусом Бора, это второе совпадение с теорией Бора (первое совпадение: совпадение спектра, получающегося при решении уравнения Шредингера, с досконально изученным и подтвержденным экспериментаторами спектром Бора). Точнее совпадает максимум, но физическая картина при этом другая.

Физики предпочитают говорить не об орбите, а об оболочке. Электрон находится в первой оболочке. Ее толщина соответствует ширине пика распределения. Оболочка сама по себе соответствует симметричному сферическому распределению. Радиус этой оболочки — радиус Бора.

Теперь рассмотрим первое возбужденное состояние.

$$n = 2$$

$$l = 0, 1$$

$$m = 0, \pm 1$$

Радиус в два раза больше, а так имеем аналогичную основному состоянию сферу. Так выглядят S -состояния. Сферы инертны в плане связи с другими атомами.

Для осуществления связи нужны некие «протуберанцы», они появляются в p -состоянии. Рассмотрим случай $l = 1$, p -состояние:

$$\Theta_{1,0} = \cos \theta$$

$$\Theta_{1,\pm 1} = \sin \theta$$

В p -состоянии вид оболочки — «гантеля». Атомы активны.

Атом кремния в кристалле имеет четыре связи с соседними атомами. Осуществляется перекрытие электронных оболочек, образуются ковалентные связи, электроны обобществляются.

6.2 Понятие кубита

Введем понятие кубита. Экспериментальный кубит был реализован прежде всего на атоме, потом на спинах и сверхпроводящих контактах. Но об этом несколько позже.

Спектр атома состоит из неэквидистантных уровней.

Это позволяет выделить из спектра два уровня, а об остальных забыть. Такое приближение называется двухуровневой системой. Пусть есть уровень 1 и уровень 2. Есть соответствующие волновые функции ϕ_1 , ϕ_2 . Кубитом называется квантовая система, которая может находиться в двух базисных квантовых состояниях ϕ_1 и ϕ_2 , а также в любом суперпозиционном состоянии:

$$\phi = c_1\phi_1 + c_2\phi_2$$

Единственное условие для коэффициентов — условие нормировки:

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$$

Только что описанные кубиты — это кубиты, реализованные на атомах или ионах. Первые прообразы квантовых компьютеров работали на ионах (ионных ловушках).

Континуум суперпозиционных состояний — это как раз то, что принципиально отличает кубит от обычного бита. Кубит может находиться в 2 базовых состояниях и в континууме суперпозиционных состояний, а классический бит только в двух состояниях: 0 и 1. Поэтому в регистре, состоящем из n кубитов, можно одновременно записать 2^n чисел, в то время как в классическом — только одно.

Лекция 7

Вступление Наша цель — считать. В двоичном представлении счет производится с помощью нулей и единиц. Квантовая механика позволяет это делать. Но рассказанное ранее не позволяет это предполагать. Тем не менее, существует подход или формулировка — матричная формулировка, которая приспособлена к этому.

Но перед этим нам нужно рассмотреть орбитальный магнитный момент и спин. Спины в основном используются в качестве прообразов квантовых компьютеров. Есть параллельное направление в квантовых компьютерах, которое реализует другой принцип.

Спин остается важнейшим объектом для изучения возможности реализации квантового компьютера. Спин описывается релятивистской квантовой механикой. В начале расскажем об орбитальном магнитном моменте, а затем по аналогии со спином. Потом будет рассказ о матрицах. Со следующей лекции будет рассказ о квантовой информации, передовом крае науки.

7.1 Орбитальный магнитный момент

В соответствии с орбитальной моделью атома, электрон движется вокруг положительно заряженного ядра со скоростью v . В пространстве протекает ток. Мы можем описать это явление в терминах тока.

Ток по определению — это заряд, проходящий через сечение за единицу времени. Переносится ток

$$J = \frac{e}{T}, T = \frac{2\pi r}{v} \quad (7.1)$$

$$J = \frac{e}{2\pi r} \quad (7.2)$$

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{H} \quad (7.3)$$

Двигаются электроны, на движущийся заряд действует сила Лоренца. Если сосчитать всю энергию, то получается магнитный момент μ .

$$\vec{\mu} = J \frac{\pi r^2}{C} \quad (7.4)$$

Магнитный момент витка с током

$$\vec{L} = [\vec{r} \cdot \vec{P}] \quad (7.5)$$

Частицу характеризуют координата, импульс и момент импульса. Момент импульса возникает при вращении вокруг центра.

$$L = rmv \quad (7.6)$$

$$\mu_l = \frac{|e|\hbar}{2mc} \quad (7.7)$$

Удобно ввести величину, называемую магнитон Бора

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} \quad (7.8)$$

$$\vec{\mu}_l = -\frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L} \quad (7.9)$$

Ток, связанный с электроном, направлен в противоположную сторону от L .

Перейдем к квантовой механике через операторы. Объект описывается с наибольшей полнотой волновой функцией. Каждой величине соответствует оператор квантовой механики.

$$\hat{L} = [\hat{L}, \hat{x}\hat{p}] \quad (7.10)$$

$$L_x = y\hat{P}_z - \hat{P}_y z \quad (7.11)$$

$$L_y = z\hat{P}_x - \hat{P}_z x \quad (7.12)$$

$$L_z = x\hat{P}_y - y\hat{P}_x \quad (7.13)$$

$$\vec{P} = i\hbar\vec{v} \quad (7.14)$$

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \quad (7.15)$$

Проверим совместность. Дело техники, чисто технической задачи, требующей времени, вычислить коммутаторы.

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x = i\hbar \hat{L}_z \quad (7.16)$$

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x \quad (7.17)$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y \quad (7.18)$$

$$[L_y^2, L_z] = 0 \quad (7.19)$$

Квантовая механика делится на статическую и динамическую. Статическая — определение спектра энергии. Что такое динамическая задача? Это задача о переводе атома из любого состояния в любое другое какими-то внешними воздействиями.

Мы сейчас занимаемся статикой.

$$\hat{L}^2 \phi = L^2 \phi \quad (7.20)$$

Результат (ожидаемый, конечно):

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\theta, \phi} \quad (7.21)$$

$$\hbar^2 \cdot \Delta_{\theta, \phi} \phi + L^2 \phi = 0 \quad (7.22)$$

Есть три переменных, разделили и получили три уравнения.

$$\phi_{l,m} = Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (7.23)$$

$$L_l^2 = \hbar^2 l(l+1) \quad (7.24)$$

$$\mu_l = \frac{1}{2mc} L \quad (7.25)$$

$$\hat{L}_z \phi = L_z \phi \quad (7.26)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(x)}{\partial \phi} = L_z \phi \quad (7.27)$$

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) = \Theta_{l,m}(\theta) e^{im\phi} \quad (7.28)$$

$$L_z = m\hbar \quad (7.29)$$

$$\mu_l^2 = \mu_B^2 l(l+1) \quad (7.30)$$

$$\mu_z = \mu_B \cdot m \quad (7.31)$$

$$n, l, m \quad (7.32)$$

$$\Psi_{n,l,m}(\theta, \phi, r) \quad (7.33)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad (7.34)$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1 \quad (7.35)$$

$$-l \dots \leq m \leq \dots + l \quad (7.36)$$

$$n = 1, l = 0, m = 0 \quad (7.37)$$

До тех пор, пока не открыли спин, думали, что орбитального магнитного момента вообще нет. Есть оболочка s-состояния сферической формы. Это состояние можно представить как суперпозицию континуума орбит.

Следует избегать классических интерпретаций, жестко следуя квантовой механике. Все то, что в классической физике составляет половину работы физика — представить — оказывается лишним, физик впадает в трудности.

Низшее возбужденное состояние:

$$n = 1, l = 0, 1, \dots, m = 0, \pm 1 \quad (7.38)$$

$$L_0^2 = 0, L_z = 0 \quad (7.39)$$

$$L_1^2 = 2\hbar^2 L_z = \begin{cases} \hbar \\ 0 \\ -\hbar \end{cases} \quad (7.40)$$

$$\mu_l = \mu_B \sqrt{2} \quad (7.41)$$

$$\mu_z = 0_\delta \pm \mu_B \quad (7.42)$$

Нужно изобразить «окружности», отразив вектора относительно оси z и провернув.

7.2 Спин

Переходим к спину. В основном состоянии атома водорода магнитный момент равен нулю. Это можно проверить. Было сделано следующим образом.

$$H(z) = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}(z) \quad (7.43)$$

Вокруг z будет неоднородное магнитное поле. Если потенциальная энергия зависит от z , то

$$F_z = -\frac{\partial B(z)}{\partial z} \quad (7.44)$$

$$F_z = -\mu_z \frac{\partial B}{\partial z} \quad (7.45)$$

Когда пучок пройдет поле, где на него действует сила. Если μ равен нулю, то отклонений после прохождения поля не будет. Эксперимент был проведен.

Как уже было отмечено ранее, квантовая физика развивалась под давлением эксперимента.

Пучок проходит магнитное поле. Пучок не только отклоняется, но и расщепляется на два пучка, причем совершенно симметрично. Имеется две проекции μ на ось z . В одну сторону действует сила. Это был серьезный вызов квантовой механике, поскольку до сих пор подходы объясняли результаты. Было введено понятие спина.

Есть электрон на орбите, он движется. У него есть орбитальный магнитный момент. Помимо этого, электрон рассматривается как шарик, имеющий конечный радиус электрона, и этот шарик вращается вокруг своей оси, создавая свой собственный момент. Спин означает вращение. Такая интерпретация существовала недолго. Теория спина была построена позже Дираком.

Для построения теории спина требуется релятивистская квантовая механика. Результаты находятся в соответствии с результатами для углового момента.

Результаты следующие: Вектор \vec{L} и вектор \vec{S} . L_z и S_z . Собственные значения L^2 и S^2 . Квантуются похожим образом: $L = L\sqrt{l(l+1)}$ и $S = \hbar\sqrt{s(s+1)}$. $l = 0, 1, \dots, n-1$, $s = \frac{1}{2}$. $\vec{\mu}_l = -\frac{\mu_B}{\hbar}\vec{L}$, $\vec{\mu}_s = -g_s\frac{\mu_B}{\hbar}\vec{S}$. $-l \leq m_l \leq l$, $-s \leq m_s \leq s$. $L_z = m_l\hbar$, $S_z = m_s\hbar$.

7.3 Матричная формулировка

Матричную формулировку ввел Гейзенберг. Годом позже Шредингер вывел свою и показал эквивалентность матричной формулировки волновой формулировке.

Пусть у нас есть оператор физической величины B , \hat{H} . $\Psi(\vec{r})$. Что означает переход к представлению оператора?

$$B\phi_n = B_n\phi_n \quad (7.46)$$

$$\Psi(r) = \sum_m c_m\phi_m \quad (7.47)$$

Предположим, есть оператор A . Нам нужно найти собственные значения и собственные функции. Оператор должен не коммутировать с оператором B . Иначе собственные значения и функции будут совпадать.

$$\hat{A}\Psi = A\Psi \quad (7.48)$$

Подставляем разложение

$$\int \phi_m^* d\vec{r} \int \left| \sum_m c_m \hat{A}\phi_m \right| = A \sum_m c_m\phi_m \quad (7.49)$$

$$A_{km} = \int \phi_k^* A\phi_m d\vec{r} \quad (7.50)$$

$$\sum_m c_m A_{km} = A \sum_m c_m \delta_{mk} \quad (7.51)$$

$$\sum_m c_m (A_{km} - A\delta_{mk}) = 0 \quad (7.52)$$

Определяем коэффициенты c_m , которые соответствуют собственному значению.

$$\det |\Delta_{km} \delta_{mk} A| = 0 \quad (7.53)$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\Psi \quad (7.54)$$

$$\Psi = \sum c_n(t) \phi_n(x) \quad (7.55)$$

$$\int \phi_m^* dx \left| i\hbar \sum_n c_n \phi_n \right| = \sum_n c_n \dots \quad (7.56)$$

$$i\hbar \dot{c}_m = \sum_n H_{mn} c_n \quad (7.57)$$

$$H_{mn} = \int \phi_m^* \hat{H} \phi_n dx \quad (7.58)$$

$$H > = (c_1(t) \dots c_n(t)) \quad (7.59)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} H > = H |\Psi > \quad (7.60)$$

<+++>

Лекция 8

Мы продолжаем изучение спина, важнейшего объекта квантовой механики. Он используется в квантовой информации. Это объект, который не имеет классического аналога.

Нельзя действовать по классической схеме, как с импульсом или моментом импульса. Но нам нужен оператор спина. В прошлый раз мы отмечали аналогию между орбитальным магнитным моментом и спином.

$$\vec{\mu}_l = \mu_B \vec{L} \quad (8.1)$$

$$\vec{\mu}_l = -\frac{2\mu_B}{\hbar} \vec{S} \quad (8.2)$$

$$S_x, S_y, S_z \quad (8.3)$$

$$S_x S_y - S_y S_x = i\hbar S_z \quad (8.4)$$

$$S_y S_z - S_z S_y = i\hbar S_x \quad (8.5)$$

$$S_z S_x - S_x S_z = i\hbar S_y \quad (8.6)$$

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \sigma_x \quad (8.7)$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2} \sigma_y \quad (8.8)$$

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z \quad (8.9)$$

$$\sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x = 2i\sigma_z \quad (8.10)$$

$$\sigma_y \sigma_z - \sigma_z \sigma_y = 2i\sigma_x \quad (8.11)$$

$$\sigma_z \sigma_x - \sigma_x \sigma_z = 2i\sigma_y \quad (8.12)$$

$$\hat{\sigma}_z = \quad (8.13)$$

$$\hat{\sigma}_x = \quad (8.14)$$

$$\hat{\sigma}_y = 0 - ii0 \quad (8.15)$$

$$\mu_x = -\mu_B \sigma_z \quad (8.16)$$

$$\sigma_z = 100 - 1 \quad (8.17)$$

$$100 - 1(c_1 c_2) = \lambda(c_1 c_2) \quad (8.18)$$

$$(c_1 - c_2) = \lambda(c_1 c_2) \quad (8.19)$$

$$\lambda = \pm 1, |0 \rangle = (10) \quad (8.20)$$

$$\lambda = -1, |1 \rangle = (01) \quad (8.21)$$

$$S_z = +\frac{1}{2} : |0 \rangle \quad (8.22)$$

$$S_z = -\frac{1}{2} : |1 \rangle \quad (8.23)$$

Есть два базисных состояния и мы вводим суперпозиционный вектор состояния. 0 и 1 — вектора-столбцы.

$$|\psi \rangle = a|0 \rangle + b|1 \rangle \quad (8.24)$$

$$|a|^2 + |b|^2 = 1 \quad (8.25)$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 \quad (8.26)$$

$$\langle 0|0 \rangle = 1, \langle 1|1 \rangle = 1, \langle 0|1 \rangle = \langle 1|0 \rangle = 0 \quad (8.27)$$

Имеется континуум состояний. Их удобно обозначать на Блоховской сфере.

$$\lambda_z = a^* a - b^* b \quad (8.28)$$

$$\lambda_x = b^* a + a^* b \quad (8.29)$$

$$\lambda_y = i(a^* b - b^* a) \quad (8.30)$$

$$\lambda_x^2 + \lambda_y^2 + \lambda_z^2 = 1 \quad (8.31)$$

Есть оси, соответствующие $\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z$ Вектор, который скользит по сфере, называется вектором Блоха.

$$\lambda_z = \cos \theta \quad (8.32)$$

$$\lambda_x = \sin \theta \cos \phi \quad (8.33)$$

$$\lambda_y = \sin \theta \sin \phi \quad (8.34)$$

$$\lambda_z = |a|^2 - |b|^2 = \cos \theta \quad (8.35)$$

$$|a|^2 + |b|^2 = 1 \quad (8.36)$$

Мы можем разрешить систему и найти решение.

$$|a| = \cos \frac{\theta}{2}, |b| = \sin \frac{\theta}{2} \quad (8.37)$$

$$|\psi\rangle = |a|e^{i\phi_a}|0\rangle + |b|e^{i\phi_b}|1\rangle = e^{i\phi_a} \left(\cos \frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2}|1\rangle \right) \quad (8.38)$$

Примеры самых важных состояний. Если посмотреть различные источники информации по квантовой механике, изображение кубита будет в виде Bloch vector, находящегося в произвольном состоянии. Большинство воздействий квантового выигрыша заключается в переводе кубита в суперпозиционное состояние. Операция CNOT. Нам нужно рассмотреть две операции — поворот вектора Блоха на Bloch sphere экспериментально и как реализуется операция CNOT.

В начале рассмотрим теоретически. Операторы поворота Bloch vector. Оператор $\hat{R}_x(\theta) = \cos \frac{\theta}{2} \hat{I} + i \sin \frac{\theta}{2} \hat{x}$.

$$\hat{I} = 100 - 1 \quad (8.39)$$

$$\hat{x} = \sigma_x \quad (8.40)$$

$$\hat{z} = \hat{\sigma}_z \quad (8.41)$$

$$\hat{y} = \hat{\sigma}_y \quad (8.42)$$

$$\hat{x}|0\rangle = |1\rangle \quad (8.43)$$

$$\hat{x}|1\rangle = |0\rangle \quad (8.44)$$

$$R_x\left(\frac{\pi}{2}\right)|0\rangle = (|0\rangle - i|1\rangle) \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (8.45)$$

$$R_x(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}\hat{x}} \quad (8.46)$$

$$R_y(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}\hat{y}} = \cos\frac{\theta}{2}\hat{I} - i\sin\frac{\theta}{2}\hat{I} \quad (8.47)$$

$$R_z(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}\hat{z}} \quad (8.48)$$

Как реализуются повороты? Это делается в случае спина с помощью двух взаимно перпендикулярных полей. Первое постоянное магнитное поле, а второе переменное в радиочастотном диапазоне.

Почему нужно два скрещенных поля? Экспериментальная реализация оператора поворота. В простейшем случае поля создаются токами, текущими через катушку. На оси катушки-соленоида создается магнитное поле.

$$\hat{e}_z B_0 \quad (8.49)$$

Наматываем еще одну катушку перпендикулярно первой оси.

$$\vec{B}_1 = 2B_{10} \cos \omega t \cdot \hat{e}_x \quad (8.50)$$

Гамильтониан спина

$$\hat{H} = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B} \quad (8.51)$$

$$\vec{\mu}_s = \frac{2\mu_B}{\hbar} \vec{S} \quad (8.52)$$

$$B_0\mu_B \hat{z} + B_{10}\mu_B (\hat{x} \cos \omega t + \hat{y} \sin \omega t) \quad (8.53)$$

$$B_1(t) = 2B_{10} \cos \omega t \hat{e}_x = B_{10}(\cos \omega t + \hat{e}_x + \sin \omega t \hat{e}_y) + B_{10}(-\sin \omega t \hat{e}_y) \quad (8.54)$$

$$2B_0\mu_B = \hbar\omega_0 \quad (8.55)$$

$$2B_{10}\mu_B = \hbar\Omega \quad (8.56)$$

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega_0}{2}\hat{z} + \frac{\hbar\Omega}{2}(\hat{x} \cos \omega t + \hat{y} \sin \omega t) = H_0 + V_1 \quad (8.57)$$

В случае лазера это атомные уровни.

Уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} H |> = \hat{H} |\phi > \quad (8.58)$$

Нужно решить это уравнение, описывающее все в квантовом мире. Новый вектор состояния.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\phi > = \hat{H} |\phi > \quad (8.59)$$

$$|\psi(t) > = e^{i\frac{\omega t}{2}\hat{z}} |\phi(t) > \quad (8.60)$$

$$|\phi\rangle = e^{-i\frac{\omega t}{2}z}|\psi\rangle \quad (8.61)$$

$$\frac{\hbar\omega}{2}\hat{z}e^{-i\frac{\omega t}{2}z}\hat{z}H\rangle + e^{i\frac{\omega t}{2}z}i\hbar\frac{\partial H}{\partial t} = He^{-i\frac{\omega t}{2}z} \quad (8.62)$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -i\frac{(\omega_0 - \omega)}{2}|\psi\rangle - (i\frac{\Omega}{2})e^{i\frac{\omega t}{2}z}H\rangle \quad (8.63)$$

$$e^{i\frac{\omega t}{2}z}\hat{y}e^{-i\frac{\omega t}{2}z} = \hat{x}\sin\omega t + \hat{y}\cos\omega t \quad (8.64)$$

$$\hat{x}\hat{z} = -i\hat{y} \quad (8.65)$$

$$\hat{y}\hat{z} = i\hat{x} \quad (8.66)$$

$$-e^{i\frac{\omega t}{2}} \quad (8.67)$$

...

1.

$$B_{10} = 0, \omega = 0 \quad (8.68)$$

$$\Omega \sim \dots \quad (8.69)$$

$$\hat{H}|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{\omega t}{2}z}|t(0)\rangle \quad (8.70)$$

$$\langle \hat{x} \rangle = \cos\omega_0 t \quad (8.71)$$

$$\langle \hat{y} \rangle = \sin\omega_0 t \quad (8.72)$$

$$B_0, \omega_0 \quad (8.73)$$

...

Лекция 9

Матрица плотности

Квантовые приборы не являются изолированными идеальными объектами. Они взаимодействуют с окружающим миром. Это взаимодействие вносит искажение и деградацию в квантовое состояние. При постройке квантовых приборов и работе с квантовой информацией проблема взаимодействия с окружением играет большую роль и создает трудности при практической реализации приборов.

Самый главный вопрос — на каких временах деградирует состояние? Насколько она опасна и т.д.?

К концу лекции мы поймем разницу между лазером и квантовым компьютером. Они описываются одними уравнениями, но деградация идет по-разному. Квантовый компьютер должен работать быстро для исключения деградации, а лазер, наоборот, работает на деградации.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} H |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle \quad (9.1)$$

$$H = H_0 + V \quad (9.2)$$

Число переменных мало в динамической подсистеме. Для такой динамической системы можно определить вектор ψ . Динамическая система — это малое число степеней свободы. Если она взаимодействует с большой системой, число степеней свободы велико. Что это за окружение? Если спин находится в твердом теле, вокруг него много атомов, они колеблются. Фононы, их огромное число — столько же, сколько атомов. Огромная система, она взаимодействует со спином. Между ними есть взаимодействие. Это единая система.

Вопрос: как описать, как найти вектор состояния большой системы?

$$|\Psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle \quad (9.3)$$

Это описание дает гораздо больше. Нужно писать вектор состояния с большим числом степеней свободы.

$$\langle 0|, \langle 1| i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} |0\rangle + b|1\rangle \right) = aH|0\rangle + b\hat{H}|1\rangle \quad (9.4)$$

$$i\hbar \partial a / \partial t \dots \quad (9.5)$$

$$i\hbar \frac{\partial b}{\partial t} = a \langle 1|H|0 \rangle + b \langle 1|\hat{H}| \rangle \quad (9.6)$$

$$H_0|0 \rangle = E_0|0 \rangle \quad (9.7)$$

$$H_0|1 \rangle = E_1|1 \rangle \quad (9.8)$$

$$v_{01} = \langle 0|v|1 \rangle \quad (9.9)$$

$$i\hbar \frac{\partial a}{\partial t} = aE_0 + bV_{01} \quad (9.10)$$

$$i\hbar \frac{\partial b}{\partial t} = bE_1 + aV_{10} \quad (9.11)$$

$$\rho_{01} = b^*a, \rho_{10} = a^*b \quad (9.12)$$

$$\rho_{11} = a^*b, \rho_{00} = a^*a \quad (9.13)$$

$$\frac{\partial \rho_0}{\partial t} + \omega_{01}\rho_{01} = \frac{iV_{01}}{\hbar}(\rho_{00} - \rho_{11}) \quad (9.14)$$

$$\omega_{01} = \frac{E_0 - E_1}{\hbar} \quad (9.15)$$

$$\frac{\partial \rho_{00}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}(V_{10}\rho_{01} - V_{10}\rho_{10}) \quad (9.16)$$

$$\rho_{10} + \rho_{11} = 1 \quad (9.17)$$

$$\rho_{00} - \rho_{11} \equiv D \quad (9.18)$$

Первый лазер запустили в 60-х гг. Теория была создана раньше, в 50-х гг. Не было ясно, на каком материале делать. Первым запустил лазер Нейман. Уравнения через полсотни лет вернулись и описывают эволюцию кубита.

$$\frac{\partial D}{\partial t} = \frac{2i}{\hbar}(v_{10}\rho_{01} - v_{01}\rho_{10}) \quad (9.19)$$

$$\frac{\partial \rho_{01}}{\partial t} + i\omega_{01}\rho_{01} = \frac{iv_{01}}{\hbar}D \quad (9.20)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi \rangle = (H_0 + v)|\psi \rangle \quad (9.21)$$

$$H_0 - B_0\mu_B\hat{z} \quad (9.22)$$

$$\hat{H}_0|0 \rangle = B_0\mu_B|0 \rangle \quad (9.23)$$

$$H_0|1\rangle = -B_0\mu_B|1\rangle \quad (9.24)$$

$$\omega_{01} = \frac{2B_0\mu_B}{\hbar} = \omega_0 \quad (9.25)$$

$$V = -\vec{d} \cdot \vec{E} \quad (9.26)$$

$$H = H_0 + V + W(2, 10^{13}) \quad (9.27)$$

Пример классического гармонического осциллятора. Пружинка.

$$x'' + \omega_0^2 x = 0 \quad (9.28)$$

$$\omega_0^2 = \frac{k}{m} \quad (9.29)$$

Для описания трения нужно перейти от механики к статистической механике. Это уравнение заменяется уравнением

$$x'' + 2\gamma x' + \omega_0^2 x = 0 \quad (9.30)$$

Уравнение для диагонального элемента

$$\frac{\partial D}{\partial t} + \frac{1}{T_1}(D - D^0) = \frac{2i}{\hbar}(v_{10}\rho_{01} - v_{01}\rho_{10}) \quad (9.31)$$

Уравнение двухуровневого атома, которое используется в лазерах.

$$\frac{\partial \rho_{01}}{\partial t} + i\omega_{01}\rho_{01} + \frac{1}{T_2}\rho_{01} = \frac{iv_{01}}{\hbar}D \quad (9.32)$$

$$T_2 \ll T_1 \quad (9.33)$$

Характерное значение $T_2 = 10^{-10} - 10^{-11}$ сек., а $T_1 = 10^{-3}$ сек.

$$\rho_{01}(t) = \rho_{01}(0)e^{-iv_0t - \frac{t}{T_2}} \quad (9.34)$$

Как осуществляется деградация блоховской сферы? Она связана с изменением длины блоховского вектора.

$$\rho_{01} = \tilde{\rho}_{01}e^{-i\omega_0 t} \quad (9.35)$$

$$v_{01} = \tilde{v}_{01}e^{-i\omega t} \quad (9.36)$$

$$\frac{\partial \tilde{\rho}_{01}}{\partial t} = \frac{i\tilde{v}_{01}}{\hbar}D \quad (9.37)$$

$$\frac{\partial D}{\partial t} = -\frac{2i}{\hbar}(\tilde{v}_{01}\tilde{\rho}_{10} - \tilde{v}_{10}\tilde{\rho}_{01}) \quad (9.38)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(D^2 + 4\tilde{\rho}_{01}\tilde{\rho}_{10}) = 0 \quad (9.39)$$

$$D^2(t) + 4\tilde{\rho}_0(t)\tilde{\rho}_{10}(t) + const \quad (9.40)$$

$$\Lambda_z = \rho_{00} - \rho_{11} = D_0 \quad (9.41)$$

$$4\tilde{\rho}_{01}\tilde{\rho}_{10} = \Lambda_x^2 + \Lambda_y^2 \quad (9.42)$$

Роль диссипации деструктивна в случае квантового компьютера, а в случае лазера конструктивна. Лазер работает с временами, значительно большими, чем T_2

9.1 Теория квантовых измерений

Квантовая механика состоит из двух несвязанных частей — эволюция квантовых состояний, описывается уравнением Шредингера, либо матрицей плотности. Смешанное состояние описывается матрицей плотности. Суперпозиционное состояние образуется суперпозицией двух векторов.

Проведение измерений — это физическая процедура. Установка связана с заданием гамильтониана для кубита. Базисом называется собственный вектор измеряемого оператора.

В результате измерения кубита с вероятностью $|a|^2$ получается 0, с вероятностью $|b|^2$ получается 1. Первый постулат:

Второй постулат: если в результате измерения кубит оказался в состоянии 0, то он остается в этом состоянии до нового измерения. Аналогично для состояния 1.

Постулаты ниоткуда не следуют. Их сформулировал фон Нейман. Говорят о коллапсе вектора состояния. В результате получается только одно состояние, пакет коллапсирует. Измерение — процесс необратимый. Он аналогичен взаимодействию кубита с окружением. Коллапс представляет собой большую проблему для квантовых алгоритмов. Исходно в векторе заключена большая информация. В результате измерения мы извлекаем лишь один классический бит. Кажется, что квантовые компьютеры не дают никаких преимуществ за счет постулата измерения. Но есть алгоритмы, которые обходят это ограничение.

Рассмотрим один парадокс. Допустим, мы измеряем S_z . Создаем установку и подаем кубит. Пропускаем через магнитное поле. Происходит отклонение и мы узнаем спин. Повернем поле и подадим кубит в состоянии ноль. Спин не взаимодействует с перпендикулярным полем. Кубит должен пройти, не отклоняясь. А эксперимент дает другую картину — кубит отклоняется в одну сторону произвольным образом. Можно найти вероятность.

Как квантовая механика объясняет результат?

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), +1 \quad (9.43)$$

$$|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle), -1 \quad (9.44)$$

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle) \quad (9.45)$$

Квантовая механика — набор постулатов. Эти рецепты прекрасно работают. Почему они работают, никто не знает. Поэтому и говорят, что квантовой механики никто не понимает. Понимание — это привыкание к ней. Другого рецепта пока нет.

Лекция 10

На этой лекции будет рассказано о сути квантовых компьютеров. Перед переходом к основному вопросу, рассмотрим ipr -пары.

На входе $|0\rangle$ и $|0\rangle$, на выходе

$$\frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} \quad (10.1)$$

$$1, 0 \Rightarrow \frac{|00\rangle - |11\rangle}{\sqrt{2}} \quad (10.2)$$

$$0, 1 \Rightarrow \frac{|01\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}} \quad (10.3)$$

$$1, 1 \Rightarrow \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}} \quad (10.4)$$

$$\frac{|01\rangle + |00\rangle}{\sqrt{2}} \quad (10.5)$$

Можно сгенерировать пару и развести фотоны на расстояния. Парадоксальное предсказание.

$$\frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} \quad (10.6)$$

Мы создали пару и развели фотоны в Москву и Владивосток по световодам. Такое состояние еще называется «перепутанное». Реально можно даже на сто километров развести по световодам. В Москве мы измеряем первый кубит. Из постулата следует, что если в Москве мы получили в результате измерения 0, то при измерении во Владивостоке результат будет 0 с вероятностью, равной единице. Это свойство называется нелокальностью квантовой теории. Используется два термина — перепутанное и запутанное состояние. Частицы обладают квантовой корреляцией.

Есть два шара — белый и черный. Один человек кладет шар в карман и едет во Владивосток. Казалось бы, ситуация такая же. Шар был выбран случайным образом. Выпадение шара в Москве должно быть противоположным. В квантовой механике нет свойства 0 и 1, но есть и то и другое и потенциальном состоянии.

Состояния pr были изобретены Эйнштейном для опровержения квантовой механики. Но Бор опроверг Эйнштейна.

Передача двух битов в одном кубите. Это один из примеров. Здесь вдвое более плотная упаковка информации, а в квантовых компьютерах выигрыш экспоненциальный. Передаем два бита классической информации. Есть четыре возможных варианта. Как идет передача по квантовому каналу? У нас есть генератор ирг-пар. Он содержит оператор Адамара и оператор контролируемого НЕ. Сгенерировали пару. Первый кубит передается. Кодировем все 4 числа, передача по квантовому каналу. Передача одного кубита.

В приемнике есть второй кубит. Кубиты разделены, но между ними есть квантовая корреляция. Кубиты находятся в запутанном состоянии. У них есть только потенциальные возможности. Корреспондент производит кодировку. Нужно иметь возможность кодировать числа. Второй кубит у корреспондента. Первый кодируется. Операции следующие: \hat{I} , \hat{x} , \hat{z} , $\hat{x}\hat{z}$.

Корреспондент производит операцию идентичности.

У корреспондента проводится процедура декодирования. Контролируемое нет. Первый кубит играет роль контролируемого. Получится одно из 4 состояний, но корреспондент не знает. Нужно декодирование. Состояние сепарабельно. Состояние $\frac{1}{\sqrt{2}}[|0\rangle + |1\rangle \otimes |0\rangle] \rightarrow [|0\rangle \otimes |0\rangle]$ Аналогично из других состояний имеем $|0\rangle \otimes |1\rangle$ и т.д.

Сегодня мы не будем рассматривать алгоритм, а рассмотрим суть квантового компьютера и поймем, откуда берется выигрыш. Выигрыш за счет квантового параллелизма. Он отличается от классического параллелизма принципиально. В классическом регистре можно записать только одно число, а в квантовом регистре 2^n чисел. Физическую реализацию рассмотрим несколько позже. Будем иметь дело с булевыми функциями.

Функция принимает значение 0 или 1. Аргумент принимает тоже значения 0 или 1. Потом обобщим. Двухкубитовый квантовый компьютер. На входе 0 и 0. Затем появляется нечто новое.

Блок работает как обычный клапан, а выигрыш появляется, когда начинают использоваться суперпозиционные состояния. С одной стороны, от них беды, с другой стороны, они дают выигрыш. После операции Адамара будет суперпозиция. Операция в блоке работает как будто независимо для одного и другого состояния, а на выходе будет сумма.

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|0, f(0)\rangle + |1, f(1)\rangle) \quad (10.7)$$

Казалось бы, все хорошо. Но есть проклятие результата измерения. Как только мы начинаем производить измерения, пропадает весь выигрыш. При измерении кубита мы получим либо 0, либо 1. Квантовые алгоритмы должны быть так построены, чтобы обойти это ограничение. Люди бьются над этим.

Теперь посмотрим, как же получить экспоненциально большой выигрыш. Нужно уметь записывать одновременно 2^n чисел, имея n -разрядный квантовый регистр. Имеется регистр, содержащий n кубит, сфер Блоха. Далее оператор H . Каждый оператор действует на один кубит. Блок U_f , который за одну операцию обработает все.

Как измерить число? Нужно измерить n кубитов, нужно все измерить. Что получится в результате? Одно число. Записали 2^n чисел, но извлечь их невозможно. Как проверить, что они там есть? Повторить создание этого регистра и заново измерить. Повторя измерения, получим набор ча-

стот, соответствующих 2^n состояний. Они будут соответствовать записанным числам. Параллельно вычисляются все 2^n значений чисел. Ответ в суперпозиционном виде.

Формально запишем эту процедуру.

$$|\psi_{out}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle |0\rangle \oplus f(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x, f(x)\rangle \quad (10.8)$$

$$H|x_i \rangle = \sum_{z_i=0,1} (-1)^{x_i z_i} \frac{|z_i \rangle}{\sqrt{2}} \quad (10.9)$$

$$H^{\otimes n} |x_0, \dots, x_{n-1}\rangle = .. \quad (10.10)$$

Алгоритм Дойча. Для реализации компьютера нужны связи между кубитами. Была продемонстрирована принципиальная возможность квантового компьютеринга на примере алгоритма Дойча. Нужна коммерческая база. Тогда это принимает серьезный вид вложения больших денег и развития. 1994 г. — Шор использует в качестве платформы алгоритм Дойча. Факторизация больших чисел.

Оператор Адамара — поворот вектора Блоха.

$$f_1(0) = 0 \quad (10.11)$$

$$f_1(1) = 0 \quad (10.12)$$

$$U_{f_1} = \hat{I} \otimes \hat{I}' \quad (10.13)$$

$$f_2(0) = 1 \quad (10.14)$$

$$f_2(1) = 1 \quad (10.15)$$

$$U_{f_2} = \hat{I} \otimes NOT \quad (10.16)$$

$$f_3(x) = X \quad (10.17)$$

$$U_{f_3} = CNOT \quad (10.18)$$

$$f_4(x) = NOTX \quad (10.19)$$

$$U_{f_4} = CNOT\hat{I}' \otimes NOT \quad (10.20)$$

Как реализуется физически операция контролируемого НЕ? Двухкубитовый случай. Один кубит — контрольный. Он находится или в состоянии $|0\rangle$, или в состоянии $|1\rangle$. Другой кубит — целевой. Он находится в состоянии $|0\rangle$.

$$H_{l..} = (Jz_c)z_t \quad (10.21)$$

Если контрольный кубит в состоянии $|1\rangle$, мы должны перевернуть. В начале мы вращаем вокруг оси x , затем идет взаимодействие кубитов, а затем поворот вокруг оси y . Взаимодействие есть всегда. Оно достаточно мало и осуществляется достаточно медленно. Импульсы достаточно сильны. Быстро осуществляем операции и выключаем мощные поля. Операция

требует самого большого времени и осуществляется с помощью э/м импульсов.

Прообразы квантовых компьютеров сейчас на спинах и ионных ловушках. Кубитов не больше десятков. Сообщили о создании коммерческого квантового компьютера на 128 кубитах. Если это так, это огромное достижение, потому что можно моделировать большие молекулы. Существует дискуссия по поводу этого компьютера. Резюме: подождем — увидим. Нет публикаций, но разработка коммерческая. Принцип иной — компьютер построен на сверхпроводящих контактах.

Последнее замечание. Принципиальное отличие квантовой механики, с которым связаны проблемы и парадоксы — наличие суперпозиционных состояний. В классической механике таких состояний нет.

Нужно знать уравнение Шредингера.

Литература

- [1] Блохинцев Д.И. "Квантовая механика"
- [2] Ландау П.Д., Лившиц Е.М. "Квантовая механика"
- [3] Сборник под руководством Садовников В.А. "Квантовые компьютеры"