

**В.И. Емельянов**  
**Ю.В. Владимирова**

**КВАНТОВАЯ  
ФИЗИКА  
БИТЫ И КУБИТЫ**



Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова  
Москва  
2012

В.И. Емельянов, Ю.В. Владимирова

**КВАНТОВАЯ ФИЗИКА.  
БИТЫ И КУБИТЫ**

By  
SunnyLynx  
PoziTiff  
AlexF



Москва  
ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ МГУ ИМЕНИ М.В. ЛОМОНОСОВА  
2012

В.И. Емельянов, Ю.В. Владимирова. **Квантовая физика. Биты и кубиты /**  
Учебное пособие. М.: Физический факультет МГУ, 2012. — 176 с.

ISBN 978-5-8279-0108-2

Книга представляет собой краткое введение в квантовую информатику для читателей, не изучавших предварительно квантовую механику. В первой части книги проводится изложение основ волновой квантовой механики и ее приложений к описанию энергетических спектров электронов в атомах, полупроводниках и низкоразмерных наноструктурах. Она завершается рассмотрением полупроводниковых транзисторов (битов) в классических компьютерах. Во второй части производится переход к матричному представлению квантовой механики. Рассмотрены спин и двухуровневые атомы, реализующие квантовые биты (кубиты). Рассмотрены два режима функционирования двухуровневых атомов, взаимодействующих с электромагнитным полем: режим вынужденного излучения в лазерах и нестационарные когерентные атомные процессы. Проведена аналогия второго режима с режимом функционирования кубитов при квантовых вычислениях. Рассмотрены квантовые логические операторы, квантовые схемы, простейшие квантовые коммуникационные протоколы и квантовые алгоритмы, демонстрирующие экспоненциально большие ресурсы квантовых вычислений. Дан обзор современного состояния проблемы физической реализации квантового компьютера с использованием в качестве кубитов спинов, атомов, фотонов, а также макроскопических квантовых сверхпроводников. Книга может служить пособием для студентов физико-математических специальностей, а также представлять интерес для широкого круга читателей, интересующихся современными проблемами физики.

Рецензент: д.ф.-м.н., профессор С.П. Кулик

Оформление переплета: *Ю.В. Владимирова*

Подписано в печать 2.07.2012 г.

Формат 60х90/16. Объем 11 п.л. Тираж 300 экз.

Заказ № 0879.

Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова

119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д.1, стр. 2

Отпечатано в Типографии МГУ имени М.В. Ломоносова

# ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие . . . . .	6
<b>Глава 1. Экспериментальные основы квантовой механики. Волновая функция микрообъекта . . . . .</b>	<b>9</b>
1.1. Введение . . . . .	9
1.2. Частицы и волны в классической физике . . . . .	14
1.3. Дифракция электронов. Волна де Бройля. Статистический смысл волновой функции . . . . .	17
1.4. Принцип суперпозиции. Соотношение неопределенностей . . . . .	21
<b>Глава 2. Математический аппарат квантовой механики. Уравнение Шредингера . . . . .</b>	<b>26</b>
2.1. Операторы физических величин . . . . .	26
2.2. Уравнение Шредингера . . . . .	31
2.2.1. Стационарное уравнение Шредингера (33).	
2.3. Движение частицы в прямоугольной потенциальной яме . . . . .	34
2.3.1. Прямоугольная бесконечно глубокая яма (35). 2.3.2. Прямоугольная яма конечной глубины (38). 2.3.3. Туннелирование через барьер. Ток вероятности (40).	
<b>Глава 3. Атом водорода. Приближение двухуровневого атома. Квантовый гармонический осциллятор . . . . .</b>	<b>43</b>
3.1. Уравнение Шредингера для атома водорода и его решение . . . . .	43
3.1.1. Приближение двухуровневого атома (52).	
3.2. Квантовый гармонический осциллятор . . . . .	52
<b>Глава 4. Движение электрона в периодическом потенциале. Зонный энергетический спектр. Металлы, полупроводники и диэлектрики. Низкоразмерные наноструктуры. . . . .</b>	<b>56</b>
4.1. Движение частицы в периодическом потенциале . . . . .	56
4.1.1. Кристаллическая решетка (56). 4.1.2. Уравнение Шредингера для электрона в периодическом потенциале. Блоховская волновая функция (58).	
4.2. Зонная структура энергетического спектра электрона. Приближение почти свободных электронов и приближение сильной связи . . . . .	60
4.2.1. Зонный энергетический спектр в приближении почти свободных электронов (61). 4.2.2. Зонный энергетический спектр в приближении сильной связи. Образование энергетических зон из атомных уровней (66).	
4.3. Зонная теория и разделение твердых тел на металлы, полупроводники и диэлектрики . . . . .	71
4.4. Низкоразмерные наноструктуры. Квантовая яма, сверхрешетка, квантовая трубка, квантовая точка . . . . .	72
<b>Глава 5. <math>p - n</math> переход и полупроводниковый транзистор. Физическая реализация битов и логических операторов в классическом компьютере . . . . .</b>	<b>77</b>
5.1. Электроны и дырки в полупроводниках . . . . .	77
5.2. Легирование полупроводников. Доноры и акцепторы . . . . .	79
5.3. Принципы работы $p - n$ перехода и полупроводникового транзистора . . . . .	82
5.4. Хранение чисел и реализация логических операции с помощью полупроводниковых транзисторов . . . . .	87

<b>Глава 6. Операторы момента импульса и орбитального магнитного момента. Спин. Матричная формулировка квантовой механики</b> . . . . .	89
6.1. Связь орбитального магнитного момента электрона в атоме с моментом импульса . . . . .	89
6.2. Операторы момента импульса . . . . .	91
6.2.1. Собственные функции и собственные значения оператора момента импульса (92).	
6.3. Квантование орбитального магнитного момента электрона в атоме водорода . . . . .	93
6.4. Спин . . . . .	94
6.5. Матричная формулировка квантовой механики . . . . .	96
6.5.1. Стационарная система (97). 6.5.2. Нестационарная система (98).	
<b>Глава 7. Операторы спина. Кубит и его представление на сфере Блоха. Управление кубитом при помощи электромагнитных полей</b> . . . . .	100
7.1. Операторы спина . . . . .	100
7.2. Понятие кубита . . . . .	101
7.3. Представление кубита на блоховской сфере . . . . .	102
7.3.1. Операторы поворота вектора Блоха (103).	
7.4. Физическая реализация поворотов вектора Блоха . . . . .	105
<b>Глава 8. Матрица плотности. Декогеренция кубита. Лазерная генерация и нестационарные когерентные атомные процессы. Квантовые измерения.</b> . . . . .	112
8.1. Уравнения эволюции двухуровневой системы . . . . .	112
8.1.1. Уравнения эволюции спина в скрещенных магнитных полях (116). 8.1.2. Уравнения эволюции двухуровневого атома в электромагнитном поле (117).	
8.2. Учет взаимодействия кубита с окружающей средой. Матрица плотности и декогеренция кубита . . . . .	117
8.2.1. Колебательное уравнение пружинного маятника (118).	
8.2.2. Уравнения для матрицы плотности и декогеренция кубита (118).	
8.3. Лазерная генерация и нестационарные когерентные атомные процессы в системе двухуровневых атомов, взаимодействующих с электромагнитным полем . . . . .	121
8.3.1. Лазер (121). 8.3.2. Нестационарные когерентные процессы в системе двухуровневых атомов, взаимодействующих с электромагнитным полем (125).	
8.4. Квантовые измерения . . . . .	128
8.4.1. Последовательные измерения кубита в ортогональных магнитных полях (130). 8.4.2. Инициализация спинового кубита (131). 8.4.3. Измерение двухкубитовых систем (133).	
<b>Глава 9. Квантовые логические операторы и квантовые схемы. Квантовый параллелизм. Перепутанные состояния.</b> . . . . .	136
9.1. Квантовые логические операторы (вентили) и квантовые схемы . . . . .	137
9.1.1. Однокубитовые вентили (137). 9.1.2. Оператор NOT (137). 9.1.3. Операторы $Z$ и $Y$ (137). 9.1.4. Оператор Адамара (138). 9.1.5. Оператор измерения кубита (138). 9.1.6. Двухкубитовые вентили (138).	

9.2. Квантовый параллелизм . . . . .	139
9.3. Перепутанные состояния двух кубитов. Базис Белла . . . . .	143
<b>Глава 10. Сверхплотное квантовое кодирование. Квантовая телепортация. Неравенство Белла . . . . .</b>	<b>145</b>
10.1. Сверхплотное квантовое кодирование информации . . . . .	145
10.2. Кубит невозможно копировать . . . . .	148
10.3. Квантовая телепортация . . . . .	149
10.4. Неравенство Белла . . . . .	151
<b>Глава 11. Квантовые алгоритмы. Проблема физической реализации квантового компьютера . . . . .</b>	<b>155</b>
11.1. Квантовый алгоритм Дойча . . . . .	156
11.2. Задача Дойча . . . . .	156
11.3. Алгоритм Дойча для $n = 1$ . . . . .	157
11.4. Физическая реализация оператора CNOT для случая спинов. Пример квантового параллельного вычисления . . . . .	159
11.5. Алгоритм Дойча при произвольном $n$ . . . . .	161
11.6. Квантовые алгоритмы . . . . .	163
11.6.1. Алгоритм факторизации больших чисел (164).	
11.6.2. Алгоритм поиска (164).	
11.6.3. Моделирование квантовых систем (165).	
11.6.4. Квантовые алгоритмы решения систем линейных дифференциальных уравнений (165).	
11.7. Экспериментальная реализация квантового компьютера . . . . .	166
11.7.1. Ядерные спины в молекулах (166).	
11.7.2. Ионы и атомы в электромагнитных ловушках (167).	
11.7.3. Единичные фотоны как кубиты (168).	
11.7.4. Компьютер на квантовых точках (168).	
11.7.5. Квантовый компьютер на сверхпроводниках. Макроскопическая квантовая физика (169).	
11.8. Дополнительные приложения квантовой информации . . . . .	174
11.8.1. Квантовая криптография и коммуникация (174).	
11.8.2. Квантовая метрология (174).	
11.8.3. Послесловие. Квантовая информация в историческом аспекте (175).	
<b>Список литературы . . . . .</b>	<b>176</b>

## ПРЕДИСЛОВИЕ

Настоящее учебное пособие по квантовой физике написано на основе общего курса лекций, читавшегося в течение ряда лет одним из авторов (В.И.Е) на факультете вычислительной математики и кибернетики (ВМК) Московского Государственного Университета им. М.В. Ломоносова. При отборе материала и структурировании книги учитывались как ее цель, так и особенности преподавания физики на факультете ВМК. Квантовая механика лежит в основе современного естествознания и имеет широчайший спектр приложений. Поэтому характер изложения в книге под названием «Квантовая физика. Биты и кубиты», соответствующей по объему односеместровому курсу лекций, должен зависеть от конкретной области приложения квантовой механики. Целью книги является краткое введение студентов факультета ВМК, специализирующихся в широком спектре физико-математических дисциплин, в квантовую механику и ее приложения в новой научной дисциплине — квантовой информации. Квантовая информация, сформировавшаяся как самостоятельная теоретическая область в 90-х годах прошлого века на пересечении квантовой механики и теории информации, в последнее время характеризуется все ускоряющимся темпом развития ее приложений в создании реальных (и даже коммерческих) устройств — квантовых компьютеров, квантовых линий связи, систем квантовой телепортации и других. Основной акцент в настоящем вводном курсе делается именно на этом аспекте квантовой информации. Для лучшего усвоения этого материала желательно предварительно выработать у студентов квантовые представления, которые отличны и даже контринтуитивны по отношению к представлениям классической физики, закрепленным у них изучением предыдущих курсов физики. Поэтому мы сочли необходимым дать предварительное изложение основ квантовой механики в волновой ее формулировке, без использования аппарата матричной линейной алгебры, как это обычно делается в стандартных учебниках по квантовой информации. Это дает возможность яснее воспринять квантовую механику как физическую дисциплину, развивавшуюся в тесной связи и под давлением эксперимента.

В соответствии со своим названием, книга состоит из двух частей. В первой части излагается волновая квантовая механика Шредингера и рассматриваются ее приложения к задачам об энергетических спектрах квантовых систем (электрон в потенциальной яме, осциллятор, атом водорода, электрон в кристаллической решетке и в низкоразмерных наноструктурах). Рассматриваются физические принципы работы  $p-n$  перехода, полупроводникового транзистора и реализации на его

основе бита и простейших логических операций в классическом компьютере.

Во второй части курса производится переход к матричному представлению квантовой механики. По аналогии с орбитальным механическим моментом электрона в атоме, вводится понятие спина электрона. Кратко излагается теория квантовых измерений. Рассматриваются основные представления квантовой информации (кубит, логические квантовые операторы, квантовые схемы, простейшие схемы квантового компьютера). Вводятся понятия матрицы плотности и декогеренции кубита. Рассмотрены два режима функционирования двухуровневых атомов, взаимодействующих с электромагнитным полем: режим вынужденного излучения в лазерах и нестационарные когерентные атомные процессы. Проведена аналогия второго режима с режимом функционирования кубитов при квантовых вычислениях. Заключительные главы книги посвящены применению квантовых схем для задач безопасной передачи информации по квантовым каналам и разработки алгоритмов для квантовых компьютеров. Дается краткий обзор современного состояния проблемы физической реализации квантового компьютера.

Настоящее краткое учебное пособие ни в коей мере не является спецкурсом по квантовой информации. В книге совсем не затрагиваются такие важные вопросы квантовой информации как квантовые шумы, квантовая коррекция ошибок, теоретическая квантовая информации (энтропия фон Неймана, пропускная способность квантового канала связи и другие вопросы). Более подробное и глубокое изложение различных аспектов квантовой информации читатель может найти в специальных руководствах.

В настоящее время имеется обширная учебная литература по квантовой механике (см., например, [1–5]), квантовой статистической механике [6], а также по приложениям квантовой механики в теории лазеров [7] и теории твердого тела [8]. В книге [9] читатель может найти введение в макроскопическую квантовую физику, нестационарные когерентные атомные процессы рассмотрены в [10, 11]. В последнее время появилось также несколько фундаментальных учебников, монографий и сборников [12–19], а также учебных пособий [20–22], посвященных различным вопросам квантовой информации. Также отметим интернет-портал [www.quantiki.org](http://www.quantiki.org) [23], содержащий много информации для тех, кто интересуется квантовыми вычислениями и квантовой информацией. Авторы надеются, что настоящая книга будет полезным дополнительным учебным пособием для студентов, а также может представить интерес и для более широкого круга читателей, интересующихся современными проблемами физики и информатики.

Авторы благодарны за советы заведующему кафедрой общей физики и волновых процессов физического факультета МГУ профессору В.А. Макарову, а также доценту О.А. Чичигиной за внимательное про-

чтение рукописи и замечания. Особую благодарность авторы выражают профессору кафедры квантовой электроники физического факультета МГУ профессору С.П. Кулику, взявшему на себя труд по рецензированию книги, и сделавшему целый ряд ценных замечаний.

Авторы будут благодарны также всем желающим за критические замечания и пожелания по поводу настоящего учебного пособия.

Физический факультет МГУ  
Июль 2012 г.

*В.И. Емельянов*  
*Ю.В. Владимирова*

# ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ. ВОЛНОВАЯ ФУНКЦИЯ МИКРООБЪЕКТА

## 1.1. Введение

Квантовая механика, как принципиально новая концептуальная схема начала формироваться в начале XX века после отказа физиков от попыток разрешить противоречия между экспериментом и классической теорией, которые возникли при изучении микроскопического мира (электромагнитного излучения, электронов, ядер, атомов, молекул, элементарных частиц). Квантовая (или волновая) механика, законам которой подчиняются атомные явления, основана на представлениях, принципиально отличных от представлений классической физики. Говоря в общем, квантовая механика описывает четыре класса явлений, которые не может описать классическая физика:

1. *квантование* (дискретизация) определенных физических величин,
2. *корпускулярно-волновой дуализм*,
3. *принцип неопределенности*,
4. *перепутывание квантовых состояний*.

Однако, это не означает, что физика квантовых явлений (квантовая физика) является изолированной частью физики, не связанной с макроскопическим миром. Она охватывает всю физику и ее законы являются наиболее общими законами природы. Необычное поведение объектов, подчиняющихся квантовой механике, проявляется, когда мы имеем дело с очень малыми частицами, а законы классической «ньютоновской» физики остаются точными в предсказании поведения окружающих нас больших объектов. *Принцип соответствия* утверждает, что предсказания квантовой механики сводятся к предсказаниям классической физики в пределе больших энергий (в пределе «больших квантовых чисел», см. ниже). Другими словами, классическая механика — это квантовая механика в классическом пределе больших энергий.

Многие макроскопические свойства классических систем являются прямыми следствиями квантового поведения их составных частей — атомов и молекул. Сюда относятся стабильность тел, которые мгновенно коллапсировали бы, если бы атомы подчинялись классическим законам, а также механические, тепловые, химические, оптические и магнитные свойства материалов. Поэтому квантовая механика со-

ставляет математическую и идейную основы многих областей физики и химии, включая физику электромагнитного излучения и конденсированных сред, а также их взаимодействия друг с другом, физику твердого тела, атомную и молекулярную физику, квантовую химию, физику элементарных частиц и физику ядра.

Существует критерий, показывающий, в каких случаях надо использовать квантовую механику для описания частицы, а когда можно ограничиться классическими законами.<sup>1)</sup> Если для частицы численное значение динамической переменной  $S$ , называемой действием, определяемой как произведение координаты  $x$  (размера области локализации) на импульс  $p$ , сравнимо с постоянной Планка  $\hbar = 1.0545726 \times 10^{-27}$  эрг-сек, то поведение этой частицы описывается в рамках квантовой механики. Такую частицу будем называть микрообъектом. С другой стороны, если действие велико по сравнению с  $\hbar$ , то частицу, с достаточной точностью, описывают законы классической физики (макрообъект). Постоянная  $\hbar$  была введена в физику в 1900 г. немецким физиком М. Планком — одним из создателей квантовой механики.

Примером микрообъекта является электрон в атоме. Скорость электрона на орбите составляет  $v \sim 10^8$  см/с, масса  $m_e \sim 10^{-27}$  г, размер области локализации (расстояние до ядра)  $r \sim 10^{-8}$  см. Таким образом, действие  $S = v \cdot m_e \cdot r = p \cdot r \sim 10^{-27}$  эрг-сек  $\sim \hbar$ . С другой стороны, для макроскопического шарика с  $v \sim 1$  см/с,  $m \sim 1$  г, локализованного в области с размером  $r \sim 1$  см, действие  $S \sim 1$  эрг-с  $\gg \hbar$ .

Необходимо отметить, что, благодаря достаточно сильному, случайному воздействию окружения, микрообъект может, в определенных условиях, частично терять свои квантовые свойства и, в некоторых отношениях, вести себя как классическая частица. Такое явление называется *декогеренцией* квантового объекта и мы рассмотрим его в этой книге, ввиду его важности как для классических, так и для квантовых компьютеров.

С другой стороны, макроскопически большая система идентичных, сильно взаимодействующих друг с другом и поэтому, в некотором смысле, упорядоченных («скоррелированных») микрообъектов может ярко проявлять квантовые свойства. Такими явлениями занимается отдельный раздел квантовой физики под названием *макроскопическая квантовая физика*. В частности, теоретически и экспериментально было показано, что сильно скоррелированная система большого числа так называемых куперовских пар электронов (частиц с целым спином — бозонов) в сверхпроводниках ведет себя как одна частица, проявляющая такие характерные квантовые свойства как способность находится в суперпозиционном состоянии или туннелировать через потенциальный барьер (п. 2.3). Рассмотрение макроскопической квантовой физики требует знания теории сверхпроводимости и выходит за рамки данного

<sup>1)</sup> Этот критерий основан на соотношении неопределенности (п. 2.1).

курса. Однако, мы кратко коснемся этих вопросов в связи с тем, что в последнее время макроскопические квантовые системы (сверхпроводники) используются для создания реальных квантовых аналоговых компьютеров с большим числом квантовых ячеек памяти (см. п. 11.7.5).

Квантовая механика получила подтверждение огромным числом экспериментов и служит надежной основой для изучения мира атомов, молекул, твердых тел, элементарных частиц и электромагнитных полей. Кроме этого, она послужила основой для разработки целого ряда принципиально новых, квантовых устройств, приборов и технологий, революционным образом изменивших нашу жизнь. Среди них изобретение полупроводникового транзистора — основы современных компьютеров и создание лазеров.

Начиная с 90-х годов прошлого века в физике, на пересечении квантовой механики и теории информации, возникла и начала интенсивно развиваться новая область науки и технологии — квантовая информация (квантовая обработка информации). Представление о ней дает схема, изображенная на рис. 1.1.



Рис. 1.1. Три раздела квантовой информации, рассмотренные в настоящей книге

Квантовые вычисления (или квантовые алгоритмы) это использование квантовых схем, задающих последовательность действий квантовых логических операторов над квантовыми битами (кубитами), для эффективных вычислений. В квантовом компьютере осуществляется физическая реализация квантовых схем и квантовых алгоритмов с использованием микрообъектов в качестве кубитов. Квантовая криптография — это передача классической информации по квантовым каналам без риска ее неконтролируемого перехвата. Квантовая телепортация — передача на расстояние квантового состояния микрообъекта без передачи самого микрообъекта. В данном вводном курсе мы рассмотрим подробно первый и третий разделы и коснемся второго (квантовая криптография). Изложение более сложных и специфических вопросов теоретической квантовой информации, таких как квантовая энтропия,

квантовые шумы, квантовая коррекция ошибок и других, читатель может найти в специальных руководствах, список которых приведен в конце книги.

В интересующем нас в данном курсе информационном аспекте, основные вехи развития квантовой механики и ее приложений на пути к пересечению с теорией информации и достижения практической квантовой информатики можно представить так:

1900 г. — зарождение,

1920–1930 гг. — развитие,

1947 г. — полупроводниковый транзистор (классический бит),

1960 г. — лазер,

1995 г. — квантовая информация (теория),

2000 г. — устройства передачи информации по квантовым каналам без риска неконтролируемого перехвата,

2000 г. — практическая реализация прототипов квантового компьютера с небольшим числом кубитов, создание коммерческих квантово-криптографических устройств.

2011 г. — первый коммерческий аналоговый квантовый компьютер на сверхпроводниках с регистром из 128 кубитов

То, что мир классических компьютеров движется по пути все большей и большей миниатюризации битов (к квантовому пределу) видно из следующей зависимости размера полупроводникового транзистора, которым реализуется бит (см. главу 5), от календарного времени (рис. 1.2, а, б).

Видно, что размер транзистора уменьшился за 40 лет в 400 раз: с 10 микрон (1970 г.) до 25 нм (2010). Видно также, что не следует ожидать в будущем уменьшения размера полупроводникового транзистора, функционирование которого реализуется электрическими токами или зарядами (см. главу 5), ниже предела в несколько нанометров. Это объясняется тем, что ниже этого предела вступают в силу квантовые эффекты, приводящие к сбоям в работе транзистора, такие как квантовые шумы и туннелирование заряда через изолирующие слои (раздел 2.3.3), приводящее к утечке тока.

Дальнейшее уменьшения размера ячейки памяти и логических элементов компьютера (вплоть до одного нанометра или ангстрема) можно достичь, используя для их реализации вместо полупроводниковых транзисторов естественные и искусственные квантовые микрообъекты: атомы, спины, фотоны, квантовые точки и другие (см. п. 11.7). Однако, при такой замене происходит не просто увеличение плотности числа ячеек памяти и логических элементов, как это имело место на всей кривой динамики уменьшения размера классического транзистора, показанной на рис. 1.2. Компьютер, использующий в регистре памяти микрообъекты, работает по законам квантовой механики и один атом (или спин) реализует в нем не классический бит, а квантовый бит (кубит).

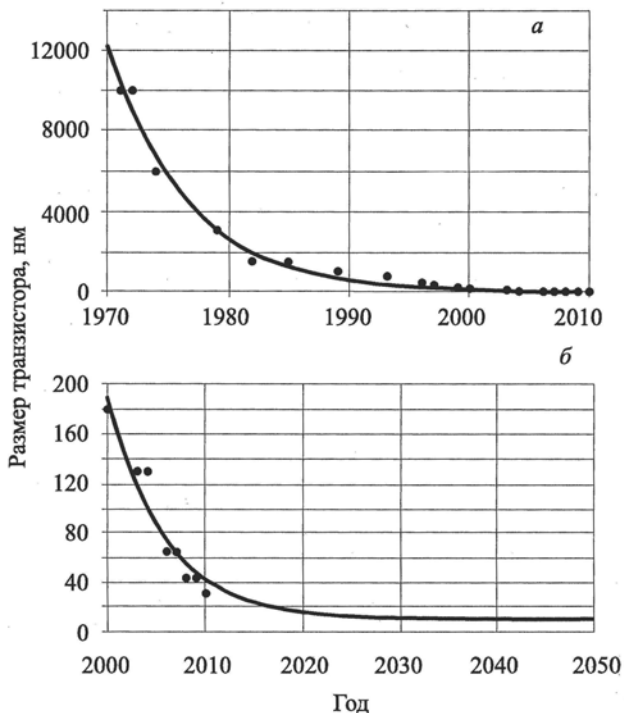


Рис. 1.2. Зависимость размера одного транзистора в нанометрах ( $1 \text{ нм} = 10^{-9} \text{ м} = 10^{-7} \text{ см}$ ) от календарного времени. На рис. *a* показана динамика уменьшения размера транзистора с 1970 до 2010 г. (точки). На рис. *б* эта динамика показана более детально с 2000 по 2010 г., а также дана интерполяция временной зависимости размера транзистора вплоть до 2050 г. (кривая)

Такой квантовый компьютер, как мы увидим из дальнейшего, обладает экспоненциально большой памятью (т.е. его память растет экспоненциально с ростом числа кубитов в нем) и дает экспоненциальный выигрыш по числу операций по сравнению с классическим компьютером.

Базовый элемент классического компьютера — полупроводниковый транзистор мы рассмотрим в главе 5. Как мы увидим из этого рассмотрения, классический компьютер является, в своей физической основе квантовым устройством, но функционирующим по классическим законам. Качественно другое устройство, принципы функционирования и соответствующие достоинства и недостатки квантовых компьютеров мы рассмотрим в главе 11. Для уяснения физических основ работы как классического компьютера (т.е. транзистора, реализующего бит), так и квантового компьютера, использующего кубиты, необходимо знание квантовой механики.

Приступая к ее изучению, начнем с вопроса: Как описать квантовый объект и, в частности, кубит? Обратимся сначала ретроспективно к классической физике и посмотрим, как она описывает объекты физического мира.

## 1.2. Частицы и волны в классической физике

В классической физике есть две базовые альтернативные модели, на основе которых описываются физические объекты. Первая модель – это модель частицы. Частица – это материальная точка: она имеет массу  $m$  и локализована в пространстве. Положение ее в момент времени  $t$  задается радиус-вектором  $\mathbf{r}(t)$ , производная которого по времени определяет вектор скорости частицы  $d\mathbf{r}(t)/dt = \mathbf{v}(t)$ . Импульс частицы при этом  $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ . Одновременное точное задание радиус-вектора и импульса частицы означает, что частица движется по траектории в шестимерном фазовом пространстве с координатами  $(x, y, z, p_x, p_y, p_z)$  (рис. 1.3).

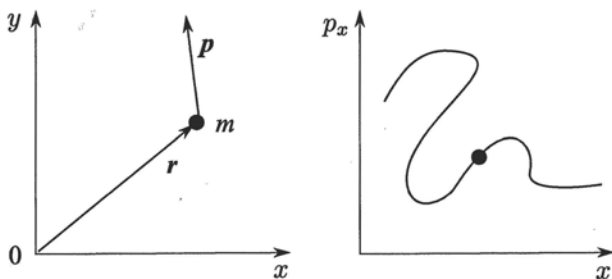


Рис. 1.3. Материальная точка (слева). Траектория частицы в двумерном фазовом пространстве. Кривая получается путем исключения переменной  $t$  из законов движения  $x = x(t)$  и  $p_x = p_x(t)$  (справа)

Объединяя частицы в ансамбли, получают модель газа. Обобщая модель ансамбля частиц, можно перейти к модели сплошной среды (жидкость и твердое тело).

Рассмотрим теперь в качестве микрообъекта атом и попробуем применить к нему классическую планетарную модель. В ней электрон с зарядом  $-e < 0$  вращается с частотой  $\omega$  по круговой орбите вокруг положительно заряженного ядра, радиус-вектор электрона относительно ядра зависит от времени:  $\mathbf{r} = \mathbf{r}(t)$ . При этом создается осциллирующий дипольный момент  $\mathbf{d}(t) = -e\mathbf{r}(t) \sim \exp(-i\omega t)$ , который действует как антенна, излучающая электромагнитное поле. Электрон теряет энергию и радиус-вектор  $\mathbf{r}(t)$  должен уменьшаться со временем, т.е. электрон должен, в конце концов, упасть на ядро. Расчеты показывают, что время за которое атом водорода коллапсировал бы, составляет  $10^{-11}$  с. Однако, атомы стабильны, следовательно электрон в атоме

нельзя описать классической моделью частицы, движущейся по круговой траектории.

Вторая базовая модель классической физики — это модель волны. Эта модель альтернативна модели частицы. Запишем выражение, описывающее в одномерном случае плоскую монохроматическую волну:

$$\psi(x, t) = A_0 \sin(\omega t - kx), \quad (1.1)$$

где  $x$  — координата,  $t$  — время,  $A_0$  — амплитуда волны,  $\omega$  — частота волны,  $k = 2\pi/\lambda$  — волновое число ( $\lambda$  — длина волны). Волна распространяется вдоль оси  $x$  со скоростью  $v = \omega/k$ . Формула (1.1) определяет скалярное поле  $\psi(x, t)$ , т.е. скалярную функцию, заданную в каждый момент времени  $t$  в каждой точке пространства, описывающую распределенные колебания в пространстве и во времени. Таким образом, волна в противоположность частице — делокализована.

Можно ли использовать модель волны для описания микрообъектов? Как это не парадоксально, но квантовая механика даёт положительный ответ на этот вопрос, более того, принятие волнового описания микрообъектов диктуется экспериментом.

На рис. 1.4 показаны картины дифракции (рассеяния) рентгеновских лучей, которые являются электромагнитными волнами, и пучка частиц — нейтронов на кристалле NaCl. Как рентгеновские лучи, так и тяжелые частицы, нейтроны, проникают глубоко в кристалл и рассеяние происходит на ионах, находящихся в объеме кристалла (трехмерная дифракция). Ионы расположены периодически в кристаллической решетке и интерференция рассеянных на них волн дает упорядоченную картину максимумов интенсивности рассеяния (светлые пятна) на фотопластинке.

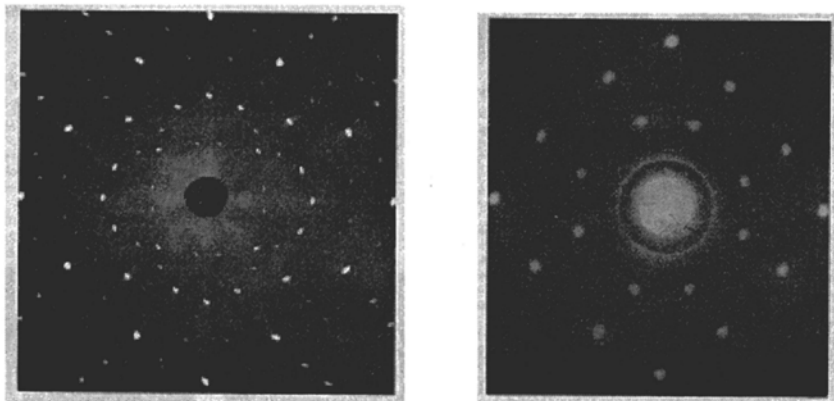


Рис. 1.4. Картина трехмерной дифракции Лауэ (лауэграмма) рентгеновских лучей (слева) и пучка нейтронов (справа) на кристалле NaCl

Одного взгляда на эти картины достаточно, чтобы убедиться в родственном характере рассеяния (дифракции) электромагнитных волн и микрочастиц и сделать вывод, что частицы обладают волновыми свойствами. Что же это за волны? Чтобы ответить на этот вопрос, рассмотрим более подробно, как происходит дифракция волн.

Рассмотрим простейшую схему дифракции электромагнитной (например, световой) волны на двух щелях, сделанных в непроницаемом экране (рис. 1.5).

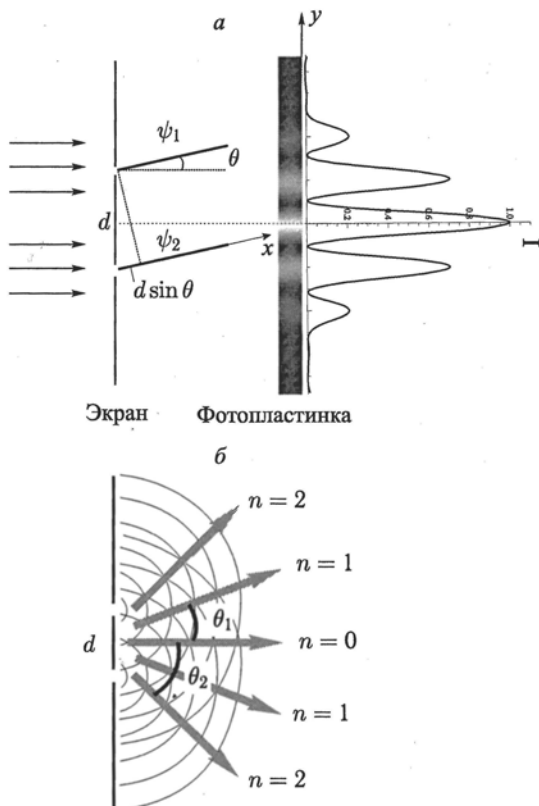


Рис. 1.5. а) Схема дифракции электромагнитной волны на двух щелях 1 и 2. На непроницаемый экран с двумя щелями падает слева плоская волна, справа, на достаточно большом расстоянии от экрана находится детектор (фотопластинка). Интенсивность электромагнитного поля на детекторе  $I \sim |\psi|^2 = |\psi_1 + \psi_2|^2$  осциллирует с изменением угла наблюдения  $\theta$ . Этот же рисунок описывает схему дифракции электронной волны (1.4). б) Интерференция двух дифрагированных волн. Стрелками показаны направления наблюдения максимумов нулевого, первого и второго порядков

Предполагается, что расстояние между щелями  $d$  сравнимо с длиной волны  $\lambda$ , а их ширина мала по сравнению с длиной волны. Интенсивность дифрагированного поля, в зависимости от угла рассеяния  $\theta$ , регистрируется детектором (фотопластинкой).

Первая щель формирует волну  $\psi_1 = A \exp(ikx)$ , вторая — волну  $\psi_2 = A \exp[ik(x + \Delta)]$ , где разность хода  $\Delta = d \sin \theta$ . В результате интерференции (сложения) волн (рис. 1.5, б), дифрагированная волна на большом расстоянии от экрана является суммой двух волн:  $\psi = \psi_1 + \psi_2$ . Отклик детектора (фотопластинки) пропорционален не самому полю  $\psi$ , а его интенсивности

$$|\psi|^2 = A^2 |\exp(ikx) + \exp[ik(x + \Delta)]|^2 = 4A^2 \cos^2 \left( \frac{kd \sin \theta}{2} \right). \quad (1.2)$$

Таким образом, если угол  $\theta$  изменяется, то интенсивность света на экране осциллирует (рис. 1.5, а). Условие наблюдения максимумов интенсивности имеет вид:  $kd \sin \theta_n / 2 = \pi n$ , откуда

$$d \sin \theta_n = n\lambda, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2. \quad (1.3)$$

Эти условия справедливы не только для световых, но и для электромагнитных волн других диапазонов длин волн, в частности, для рентгеновских волн. Оказывается, что условия (1.3) справедливы также для электронов (см. рис. 1.7) и других микрочастиц.

### 1.3. Дифракция электронов. Волна де Бройля. Статистический смысл волновой функции

В опытах Дэвиссона и Джермера (1926 год) пучок электронов направлялся на кристалл никеля, а рассеянные электроны регистрировались детектором. Легкие электроны, в отличие от нейтронов, не проникают глубоко в кристалл, так что их рассеяние происходит с его поверхности. Представление о схеме эксперимента дает рис. 1.6.

Падающий пучок формировался путем ускорения электронов, испущенных нагретым катодом с различными тепловыми скоростями  $v_T$ , электрическим полем с разностью потенциалов  $U$  между катодом и анодом. Из закона сохранения энергии  $eU = m_e v^2 / 2$ , где  $e$  и  $m_e$ , соответственно, величина заряда и масса электрона, получаем скорость электронов на выходе из коллимирующего отверстия в аноде  $v = \sqrt{2eU/m_e}$  ( $v \gg v_T$ ) и соответствующий импульс  $p = m_e v = \sqrt{2m_e eU}$ . Таким образом, можно считать что все электроны в пучке, падающем на кристалл, находятся в одном и том же состоянии с импульсом  $p$ . При  $eU = 54$  эВ, наблюдался интенсивный максимум рассеяния при  $\theta_1 = 50^\circ$ . При больших углах  $\theta_n$  ( $n > 1$ ) наблюдались еще несколько менее интенсивных максимумов. Наблюдение этого, очевидно волнового явления, говорит о том, что с электроном связана какая-то волна.

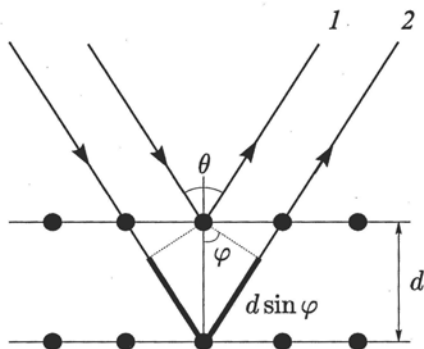


Рис. 1.6. Схема дифракции электронов на кристалле. Две горизонтальные линии — две атомные плоскости с расстоянием между ними  $d$ . Падающий на них пучок электронов — слева, отраженный (дифрагированный) пучок — справа. Угол между ними  $\theta$ . Угол между атомной плоскостью и дифрагированным пучком  $\varphi$ . В волновом описании дифракции электронов разность хода между лучами 1 и 2 равна  $2d \sin \varphi$

Постулат де Бройля (1923г.), утверждает, что со свободно движущимся с импульсом  $p$  электроном связана волна, задаваемая комплексной функцией:

$$\psi = A \exp [i(kx - \omega t)], \quad (1.4)$$

причем *корпускулярные* характеристики частицы: импульс  $p$  и ее кинетическая энергия  $\frac{p^2}{2m}$  связаны с *волновыми* характеристиками: волновым числом  $k$  и частотой  $\omega$  соотношениями де Бройля:

$$p = \hbar k, \quad \frac{p^2}{2m} = \hbar \omega. \quad (1.5)$$

Принятие этих постулатов дает возможность количественно описать опыты Дэвиссона–Джермера по дифракции пучка электронов на кристаллической решетке атомов в кристалле никеля. Из рис. 1.6 видно, что разность хода между двумя лучами 1 и 2, рассеянными соседними атомными плоскостями равна  $\Delta = 2d \sin \varphi$ . Следовательно, углы  $\varphi_n = 90^\circ - \theta_n/2$  наблюдения максимумов рассеяния электронов определяются условиями

$$2d \sin \varphi_n = n\lambda, \quad (1.6)$$

где  $n$  — целые числа. Равенства (1.6) называются условиями Брэгга. Как видно из рис. 1.6, при  $\theta_1 = 50^\circ$ , угол  $\varphi_1 = 65^\circ$ . При межплоскостном расстоянии в никеле  $d = 0.91 \text{ \AA}$  ( $1 \text{ \AA}$  (ангстрем) =  $10^{-8} \text{ см}$ ), условие Брэгга для  $n = 1$  удовлетворяется значением  $\lambda = 1.65 \text{ \AA}$ . С другой стороны, из постулата де Бройля следует, что длина волны де Бройля

$$\lambda_B = \frac{2\pi\hbar}{p}. \quad (1.7)$$

В рассматриваемом случае  $\lambda_B = 2\pi\hbar/\sqrt{2meU} = 1.67 \text{ \AA}$  в хорошем согласии с экспериментальным значением. Положения максимумов более высоких порядков  $\theta_n (n > 1)$  также хорошо описывается теорией дифракции волны де Бройля. Таким образом, постулаты де Бройля (1.4), (1.5) подтверждаются экспериментом.

Это впечатляющее согласие дает количественное подтверждение плодотворности гипотезы де Бройля. Впоследствии было выполнено много экспериментов по дифракции частиц. Было установлено, что не только электроны, но и все материальные объекты, заряженные или нейтральные, проявляют волновые свойства, когда их длина волны де Бройля сравнивается с характеристическим расстоянием между атомами в кристаллах. Существование волн, связанных с микрочастицами, было надежно экспериментально установлено.

Физический смысл волны де Бройля проясняется экспериментами по изучению многократно повторяемых актов рассеяния единичных электронов, в частности, по прохождению единичных электронов через две щели в геометрии приведенной на рис. 1.5. Фотопластика заменяется регистрирующим экраном, устройство которого для наших целей не важно. Результаты этих экспериментов показаны на рис. 1.7.

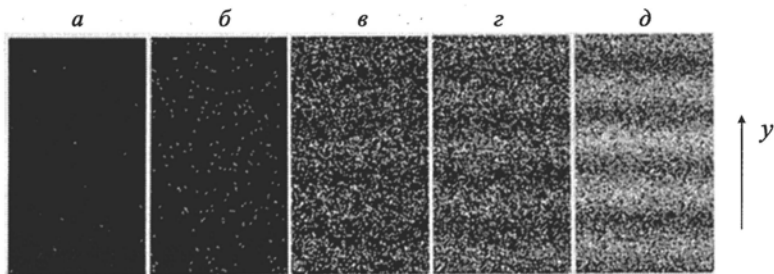


Рис. 1.7. Многократное повторение акта прохождения единичного электрона через две щели в непроницаемом для электронов экране в геометрии, показанной на рис. 1.5. Число актов прохождения растет при переходе от (а) к (д)

После прохождения первого электрона на регистрирующем экране в случайном месте, благодаря попаданию туда рассеянного электрона, регистрируется одна светлая точка. После прохождения  $N$  электронов на регистрирующем экране имеются  $N$  светлых точек, случайно разбросанных по ее поверхности (рис. 1.7 а).

По мере увеличения числа актов прохождения единичных электронов через две щели все поле заполняется светлыми точками. При относительно малом числе прошедших электронов  $N$  картина заполнения кажется случайной (рис. 1.7 б). Однако, с ростом числа электронов

(рис. 1.7 в и рис. 1.7 г) начинает проявляться картина периодического чередования темных и светлых полос, которая становится совершенно отчетливой при дальнейшем увеличении числа прошедших электронов  $N$  (рис. 1.7 д). Светлые полосы образуются в тех местах, куда попадает относительно много точек (электронов), а темные полосы образованы относительно малым числом точек. При этом положение светлых полос соответствует положению дифракционных максимумов, определяемому условиями (1.3).

Случайный характер появления точек в том или ином месте регистрирующего экрана в каждом единичном акте прохождения электрона через две щели позволяет дать статистическую трактовку этого явления.

Пусть проведено  $N$  ( $N \rightarrow \infty$ ) актов прохождения электронов и получено, соответственно,  $N$  светлых точек на регистрирующем экране. Разделим ось  $y$ , изображенную на рис. 1.5, на бесконечно малые интервалы  $dy$ . Пусть в интервал  $dy$  с координатой  $y$  попали  $dN(y)$  светлых точек. Определим вероятность  $dP(y)$  появления светлой точки с координатой  $y$  в интервале  $dy$  в единичном акте прохождения электрона по формуле

$$dP(y) = \frac{dN(y)}{N} = w(y)dy, \quad (1.8)$$

где

$$w(y) = |\psi(y)|^2 \quad (1.9)$$

— плотность вероятности появления светлой точки с координатой  $y$ .

Обобщая полученные результаты, можно сформулировать **первый постулат квантовой механики**. *Любой микробиъект с наибольшей полнотой описывается волновой функцией  $\psi = \psi(\mathbf{r}, t)$ . Волновая функция имеет статистический смысл:  $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r}$  — вероятность того, что микробиъект в момент времени  $t$  будет в результате измерения обнаружен в точке  $\mathbf{r}$  в объеме  $d\mathbf{r}$ . Поскольку вероятность обнаружить частицу где-то (в любой точке пространства) в любой момент времени  $t$  равна 1, то волновая функция подчиняется условию нормировки:  $\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r} = 1$ .*

Электрон, однако, нельзя представлять себе как некий заряженный шарик, который с вероятностью  $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r}$  в момент времени  $t$  находится в точке  $\mathbf{r}$  в интервале  $d\mathbf{r}$ . То, что такое классическое вероятностное представление о квантовом объекте неверно можно видеть, если снова обратиться к эксперименту по прохождению единичного электрона через две щели (рис. 1.5). В классической интерпретации электрон («шарик») случайным образом проходит либо через щель 1, либо через щель 2 в каждом акте прохождения. Такое поведение не может привести, после многократного повторения актов прохождения, к появлению на регистрирующем экране периодического чередования светлых и темных полос.

Под давлением эксперимента мы приходим, таким образом, к следующей картине поведения квантового объекта. Исходная плоская волна, описывающая электрон (микрообъект), проходит *одновременно* через обе щели, испытывает дифракцию на них и, в результате интерференции дифрагированных волн, на поверхности регистрирующего экрана образуется интерференционное поле, описываемое волновой функцией  $\psi(\mathbf{r}, t)$ , являющейся «волной вероятности». При измерении с помощью регистрирующего экрана этого распределенного интерференционного поля происходит коллапс волновой функции — она стягивается в точку. Плотность вероятности стягивания в точку с координатой  $\mathbf{r}$ , при проведении измерения в момент  $t$ , равна  $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ . Таким образом, микрообъект обладает как свойствами волны, так и частицы. При распространении он ведет себя как распределенная в пространстве волна (дифракция, интерференция), а при измерении проявляет свойства локализованной частицы. Такая двойственная природа микрообъектов получила название *корпускулярно-волновой дуализм*.

## 1.4. Принцип суперпозиции. Соотношение неопределенностей

Итак, под давлением опыта физики сменили парадигму (набор основополагающих самосогласованных идей) и для описания микрочастиц ввели вероятностно-волновое описание. Это привело к новому представлению о природе микрочастиц, выражаемому принципом корпускулярно-волнового дуализма. Продолжим рассмотрение новых фундаментальных физических свойств микрообъектов, которые следуют из их описания в терминах волновой функции.

Рассмотрим частицу, свободно движущуюся вдоль оси  $x$  с импульсом  $p = \hbar k$ . Она описывается волной де Бройля:  $\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$ . Вероятность найти частицу в точке  $x$  в интервале  $dx$  в момент времени  $t$

$$dP(x, t) = |\psi(x, t)|^2 dx = A^2 dx = w(x, t) dx.$$

Таким образом, плотность вероятности обнаружения частицы в точке  $x$  постоянна в пространстве:  $w(x, t) = |A|^2 = \text{const}$ . Отсюда следует вывод: если импульс частицы известен точно, то ее координата полностью не определена. Это предельный частный случай так называемого соотношения неопределенности Гейзенберга. Выведем это соотношение для общего случая. При этом мы будем использовать следующий принцип суперпозиции, который является следствием линейности квантовой механики.

### Принцип суперпозиции в квантовой механике:

*если частица может находиться в состоянии с волновой функцией  $\varphi_1(x, t)$ , а также в состоянии  $\varphi_2(x, t)$ , то она может находиться*

ся и в суперпозиционном состоянии  $\psi(x, t) = c_1\varphi_1(x, t) + c_2\varphi_2(x, t)$ , где  $c_1$  и  $c_2$  — комплексные числа. Обобщая: если  $\varphi_n(x, t)$  — набор волновых функций, то суперпозиционное состояние  $\psi(x, t) = \sum_n c_n\varphi_n(x, t)$ , коэффициенты разложения подчиняются условию нормировки:  $\sum_n |c_n|^2 = 1$ .

Несмотря на свою простоту, принцип суперпозиции является важнейшим фундаментальным принципом квантовой механики и квантовой информации. На протяжении всего курса мы будем постоянно его использовать.

Составим суперпозиционное состояние (волновой пакет) из волн де Бройля:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\Delta k} \int_{k_0 - \frac{\Delta k}{2}}^{k_0 + \frac{\Delta k}{2}} A(k) e^{i(kx - \omega t)} dk, \quad (1.10)$$

где  $k_0$  — центральное волновое число и  $\Delta k \ll k_0$  (условие узости волнового пакета). В этом суперпозиционном состоянии импульс частицы не определен и мера неопределенности импульса пропорциональна ширине волнового пакета:  $\Delta p = \hbar \Delta k$ .

Разложим  $\omega(k)$  в окрестности точки  $k_0$ :

$$\omega(k) = \omega(k_0) + \left( \frac{\partial \omega}{\partial k} \right)_{k=k_0} (k - k_0). \quad (1.11)$$

Введем переменную  $\xi = k - k_0$ . Так как пакет узкий, то можно положить  $A(k) \approx A(k_0) \equiv A_0 = \text{const}$ . Тогда из (1.10), используя (1.11), имеем

$$\psi(x, t) = \frac{A_0}{\Delta k} \exp [i(k_0 x - \omega_0 t)] \int_{-\Delta k/2}^{\Delta k/2} \exp \left[ i\xi \left( x - \left( \frac{\partial \omega}{\partial k} \right)_{k=k_0} t \right) \right] d\xi. \quad (1.12)$$

Воспользуемся выражением для  $\omega(k)$ , следующим из соотношения де Бройля (1.5)

$$\hbar \omega(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m},$$

и получим

$$\left( \frac{\partial \omega}{\partial k} \right)_{k=k_0} = \frac{\hbar k_0}{m} = \frac{p_0}{m} = v_0. \quad (1.13)$$

Подставляя (1.13) в (1.12), имеем

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{A_0}{\Delta k} \exp [i(k_0 x - \omega_0 t)] \int_{-\Delta k/2}^{\Delta k/2} \exp [i\xi(x - v_0 t)] d\xi = \\ &= A_0 \frac{\sin \left[ \frac{\Delta k(x - v_0 t)}{2} \right]}{\left[ \frac{\Delta k(x - v_0 t)}{2} \right]} \exp [i(k_0 x - \omega_0 t)]. \end{aligned} \quad (1.14)$$

Обозначим  $y = \frac{\Delta k(x - v_0 t)}{2}$  и из (1.14) получаем:

$$\psi(x, t) = \frac{\sin y}{y} A_0 \exp [i(k_0 x - \omega_0 t)], \quad (1.15)$$

где  $\sin y/y$  — медленно меняющийся амплитудный фактор,  $A_0 \exp [i(k_0 x - \omega_0 t)]$  — монохроматическая волна де Бройля. Образует плотность вероятности обнаружения частицы в точке  $x$  в момент времени  $t$ :

$$|\psi(x, t)|^2 = A_0^2 \frac{\sin^2 y}{y^2}. \quad (1.16)$$

График зависимости  $|\psi(x, t)|^2$  изображен на рис. 1.8.

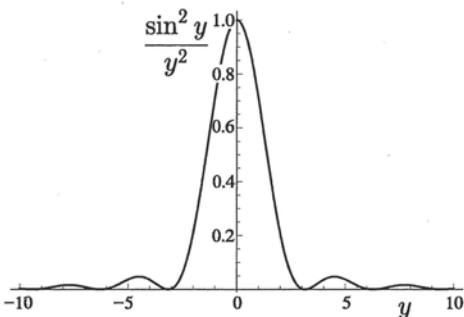


Рис. 1.8. Зависимость плотности вероятности  $|\psi(x, t)|^2$ , (1.16), от бегущей переменной  $y = \frac{\Delta k(x - v_0 t)}{2}$

Если фиксировать значение  $y$ , положив, например,  $y = \Delta k(x - v_0 t)/2 = 0$ , то продифференцировав это равенство, получаем скорость распространения волнового пакета

$$\frac{dx}{dt} = v_0 = \frac{p_0}{m} > 0. \quad (1.17)$$

Это означает, что волновой пакет движется в положительном направлении оси  $x$  со скоростью  $v_0$ .

В фиксированный момент времени  $t = t_0 = \text{const}$  график, приведенный на рис. 1.8, дает (с точностью до константы нормировки) плотность вероятности обнаружить частицу в точке  $x = v_0 t_0 + \frac{2y}{\Delta k}$ . Как видно из рис. 1.8, плотность вероятности достигает абсолютного максимума при  $x = v_0 t_0$  и быстро спадает до нуля в окрестности этого значения  $x$ , а второй максимум примерно в 20 раз меньше абсолютного максимума. Можно полагать, что частица локализована в области абсолютного максимума. Поэтому определим меру неопределенности координаты  $\Delta x$  в волновом пакете шириной  $\Delta k$  из условия  $\Delta y = \Delta \left( \frac{\Delta k(x - v_0 t_0)}{2} \right) = \frac{\Delta k}{2} \Delta x = \pi$ . Домножим обе стороны последнего равенства на  $\hbar$  и получим соотношение неопределенности Гейзенберга в форме:

$$\Delta p \Delta x = 2\pi \hbar. \quad (1.18)$$

Из соотношения (1.18) следует, что в квантовой механике, при точном задании импульса ( $\Delta p = 0$ ) координата частицы полностью не определена ( $\Delta x = \infty$ ) и наоборот, при точном задании координаты ( $\Delta x = 0$ ) импульс частицы полностью не определен ( $\Delta p = \infty$ ). В общем случае, координата и импульс заданы с неопределенностями соответственно  $\Delta x$  и  $\Delta p$ , произведение которых пропорционально  $\hbar$ . Это означает, что у микрообъектов нет точно определенной траектории. Формальный переход от квантовой механики к классической осуществляется в пределе  $\hbar \rightarrow 0$ , при этом из (1.18) следует, что  $\Delta p \Delta x \rightarrow 0$  и, в классическом пределе, у частицы имеется точно определенные координата и импульс, т.е. траектория.

Соотношение неопределенностей устанавливает пределы, за которыми законы классической физики становятся неприменимыми. Из него следует, что классическая физическая система, описываемая динамическими переменными (координата и импульс), которые определенным образом зависят от времени и могут быть измерены с произвольной точностью, не существует. Описывая реальную систему классическими методами, мы допускаем приближение, а соотношение неопределенностей (1.18) показывает степень его справедливости. Заметим, в связи с этим, что вследствие малости  $\hbar$  соотношение неопределенностей не играет роли в макроскопических явлениях.

Чтобы понять почему волновые свойства обнаруживаются только в микромире, но не наблюдаются в повседневной жизни, оценим длину волны де Бройля для макроскопической частицы массой 1 г, движущейся со скоростью 1 см/сек. Из формулы (1.7) получим, что длина волны де Бройля такой частицы  $\lambda \approx 6 \cdot 10^{-27}$  см и для обнаружения дифракции такой частицы требовался бы прибор с невероятно малым характерным размером  $d \sim \lambda$ .

Соотношение неопределенностей в форме (1.18) было получено нами качественно. В более точной его формулировке, неопределенность координаты и импульса характеризуется среднеквадратичным отклонением их от средних значений:

$$\delta_x = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle^{1/2} = (\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2)^{1/2},$$

$$\delta_p = \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle^{1/2} = (\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2)^{1/2},$$

где угловые скобки  $\langle \rangle$  означают операцию усреднения физических величин с помощью волновой функции (см. главу 2). Можно показать, что, в терминах среднеквадратичных отклонений, соотношение неопределенностей координаты и импульса имеет вид

$$\delta_x \delta_y \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (1.19)$$

что качественно соответствует (1.18). Соотношение неопределенности между координатой и импульсом (1.19) является частным случаем общего соотношения неопределенностей между парами так называемых несовместных физических величин (см. формулу (2.12)).

В заключение отметим, что из соотношения неопределенностей (1.18) следует, что когда движение микрочастицы (например, электрона с массой  $m_e$ ) происходит в ограниченной области размера  $\Delta x = a$ , то ее кинетическая энергия зависит от размера этой области по закону  $K = \Delta p^2 / 2m_e \sim \pi^2 \hbar^2 / 2a^2 m_e$  (мы опустили несущественный здесь численный множитель). Зависимость энергии микрочастицы от размера области, доступной для ее движения, называется квантовым размерным эффектом. Он играет определяющую роль в энергетических спектрах электронов в низкоразмерных наноструктурах (см. п. 4.4).

## МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

### 2.1. Операторы физических величин

Из волновой функции с помощью операторов можно извлечь информацию о физических величинах, характеризующих микрообъект. В волновой механике — это операторы умножения и дифференцирования, а в матричном представлении квантовой механики — матрицы (глава 6). Введем операторы физических величин.

#### Второй постулат квантовой механики:

*каждой классической физической величине соответствует оператор, а ее среднему значению, измеряемому в эксперименте, соответствует среднее значение оператора физической величины.*

С помощью волновой функции  $\psi(x, t)$  можно сразу вычислить среднее значение координаты  $x$  в момент времени  $t$  по формуле

$$\langle x \rangle_t = \int \hat{x} |\psi(x, t)|^2 dx \equiv \int \psi^*(x, t) x \psi(x, t) dx, \quad (2.1)$$

где  $\hat{x} = x$  — оператор координаты (это просто умножение на  $x$ ). Аналогично, среднее от функции  $f(x)$  вычисляется по формуле

$$\langle f(x) \rangle_t = \int \psi^*(x, t) f(x) \psi(x, t) dx,$$

т.е. оператор  $\hat{f}(x) = f(x)$ .

Но если попытаться вычислить среднее значение импульса  $p$ , то мы не сможем сразу это сделать, поскольку не знаем, какой оператор  $\hat{p}$  (действующий на волновую функцию  $\psi(x)$ ) соответствует физической величине  $p$ . Найдем вид этого оператора, предполагая что среднее от оператора импульса записывается в форме, аналогичной (2.1):  $\langle p \rangle_t = \int \psi^*(x, t) \hat{p} \psi(x, t) dx$ . Рассмотрим простейший случай: частица совершает одномерное свободное движение вдоль оси  $x$  с точно определенным импульсом  $p$ . Она описывается волновой функцией

$$\psi(x, t) = A \exp \left[ i \left( \frac{p}{\hbar} x - \omega t \right) \right],$$

где частота волны  $\omega = p^2/2m\hbar$  также точно определена и  $\int |\psi(x, t)|^2 dx = 1$ .

Надо построить оператор  $\hat{p}$  таким образом, чтобы в данном случае выполнялось  $\langle \hat{p} \rangle_t = p$ , т.е.

$$\langle \hat{p} \rangle_t = A^2 \int \exp\left(-i\frac{p}{\hbar}x\right) \hat{p} \exp\left(i\frac{p}{\hbar}x\right) dx = p.$$

Поскольку  $A^2 \int dx = 1$ , то оператор импульса в случае свободного одномерного движения вдоль  $x$  следует записать так:

$$\hat{p} \equiv \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (2.2)$$

Постулируем далее, что в квантовой механике компоненте импульса  $p_x$  соответствует оператор  $\hat{p}_x$ , задаваемый (2.2). Обобщая на трехмерный случай, получаем, что вектору импульса соответствует оператор импульса

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla = -i\hbar \left\{ \mathbf{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \right\}, \quad (2.3)$$

где  $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$  — единичные векторы вдоль осей  $x, y$  и  $z$ .

Мы получили, таким образом, способ построения оператора, соответствующего произвольной физической величине, задаваемой функцией  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  (например, полной механической энергии частицы  $H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \mathbf{p}^2/2m + U(\mathbf{r}, t)$ , где  $U(\mathbf{r}, t)$  — потенциальная энергия). Переход к оператору происходит следующим образом:  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \rightarrow$  оператор  $f(\mathbf{r}, -i\hbar \nabla, t)$ , т.е. координата в аргументе функции остается без изменения, а импульс заменяется на оператор импульса. Например, оператор полной энергии (гамильтониан) в случае трехмерного движения частицы имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}), \quad (2.4)$$

где  $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$  — оператор Лапласа.

Рассмотрим важные свойства операторов физических величин.

- *Линейность операторов*: все операторы в квантовой механике линейны ( $\hat{A}(\psi_1 + \psi_2) = \hat{A}\psi_1 + \hat{A}\psi_2$ ),  $\hat{A}(c\psi) = c\hat{A}\psi$ , что обеспечивает выполнение принципа суперпозиции.
- *Эрмитовость операторов*: оператор  $\hat{A}$  — эрмитов, если

$$\int \psi_1^* \hat{A}\psi_2 d\mathbf{r} = \int \left( \hat{A}\psi_1 \right)^* \psi_2 d\mathbf{r}.$$

Все операторы физических величин в квантовой механике являются эрмитовыми. Среднее значение эрмитового оператора равно

$$\langle \hat{A} \rangle = \int \psi^* \hat{A}\psi d\mathbf{r} = \int \left( \hat{A}\psi \right)^* \psi d\mathbf{r},$$

а комплексно сопряженное значение

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

т.е.  $\langle \hat{A} \rangle = \langle \hat{A} \rangle^*$  — среднее значение эрмитового оператора — действительно. Аналогично, можно доказать, что *собственные значения эрмитова оператора действительны*. Это соответствует тому, что измеряемые в эксперименте физические величины действительны.

Одной из важнейших в квантовой механике является *задача на собственные значения и собственные функции операторов*:

$$\hat{A}\varphi = A\varphi. \quad (2.5)$$

Для выбора решения, отвечающего заданным физическим условиям, к уравнению (2.5) добавляются граничные условия.

*Пример: задача на собственные значения и собственные функции одномерного оператора импульса:*

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

Для инфинитного движения ( $-\infty < x < +\infty$ ) собственной функцией является волна де Бройля

$$\varphi_p(x) = \exp\left(i\frac{p}{\hbar}x\right)$$

с собственным значением, равным  $p$ .

Пусть теперь движение финитно, т.е. происходит в ограниченной области  $0 < x < L$ . Наложим на волновую функцию периодические граничные условия:

$$\varphi_p(0) = \varphi_p(L),$$

откуда

$$1 = \exp\left(i\frac{p}{\hbar}L\right) = \exp(ikL) = \cos kL + i \sin kL, \quad k_n L = 2\pi n, \quad n = \pm 1, \pm 2.$$

Таким образом, в случае финитных движений (т.е. при наличии граничных условий) разрешены лишь квантованные значения волнового числа, в данном случае

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

и, соответственно, собственные функции образуют дискретный набор  $\varphi_n(x) = \exp\left(i\frac{p_n}{\hbar}x\right) = \exp(ik_n x)$ . Квантованные волновые числа

$k_n$  называются квантовыми числами (частица находится в состоянии с квантовым числом  $k_n$ ).

Задача на собственные значения оператора Гамильтона свободной частицы имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi = E\varphi \quad (2.6)$$

и имеет те же решения  $\varphi_n(x) = A_n \exp(ik_n x)$  с собственными значениями

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = n^2 \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2}, \quad n = \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.7)$$

Таким образом, при финитном движении разрешены только определенные (дискретные) значения энергии (дискретный энергетический спектр). При инфинитном движении разрешены все значения энергии  $0 < E_p < +\infty$  (непрерывный энергетический спектр).

**Полнота набора собственных функций.** Пусть  $\varphi_n$  — набор собственных функций эрмитова оператора  $\hat{A}$ , соответствующего какой-либо физической величине  $A$ :

$$\hat{A}\varphi_n = A_n\varphi_n.$$

**Теорема** (без доказательства). *Собственные функции эрмитова оператора образуют полный набор.* Значит, произвольную функцию можно разложить по этим функциям. В частности, для волновой функции имеет место разложение

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n(t) \varphi_n(\mathbf{r}). \quad (2.8)$$

Кроме этого, собственные функции эрмитова оператора являются ортонормированными

$$\int \varphi_n^*(\mathbf{r}) \varphi_m(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta_{nm}.$$

Коэффициенты разложения (2.8) определяются по формуле

$$c_n = \int \varphi_n^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

Для выяснения физического смысла коэффициентов разложения  $c_n$  запишем условие нормировки:

$$\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dx = \sum_n \sum_m c_n^*(t) c_m(t) \int \varphi_n^*(\mathbf{r}) \varphi_m(\mathbf{r}) dx = \sum_n |c_n(t)|^2 = 1.$$

Аналогично, можно показать, что среднее значение оператора

$$\langle \hat{A} \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi d\mathbf{r} = \sum_n A_n |c_n(t)|^2. \quad (2.9)$$

Таким образом,  $|c_n(t)|^2$  — вероятность обнаружения квантового объекта в состоянии с собственной функцией  $\varphi_n(\mathbf{r})$  (в квантовом состоянии  $n$ ) в момент времени  $t$ . Разложение (2.8) составляет суть перехода от координатного представления (в котором волновая функция объекта — это  $\psi(\mathbf{r}, t)$ ) к представлению оператора  $\hat{A}$ . В этом представлении роль волновой функции играет набор коэффициентов  $c_n(t)$ .

При измерении физической величины  $A$  с вероятностями  $|c_n(t)|^2$  получают квантованные собственные значения  $A_n$  оператора  $\hat{A}$ . Таким образом, набор собственных значений  $A_n$  задает набор значений, которые может принимать физическая величина  $A$ .

Если существует полный набор линейно независимых функций  $\varphi_m$ , которые являются собственными функциями как оператора  $\hat{A}$ , так и оператора  $\hat{B}$ , то соответствующие физические величины (называемые также наблюдаемыми) называются совместными. Например, импульс и энергия при свободном (в пространственно-однородном потенциальном поле) движении микрочастицы, три компоненты импульса или три компоненты радиуса-вектора частицы являются совместными наблюдаемыми. Напротив, импульс и энергия при движении микрочастицы в пространственно-неоднородном потенциальном поле, координата и импульс являются несовместными наблюдаемыми.

**Теорема** Если две физические величины  $A$  и  $B$  совместны, то их операторы  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  коммутируют. Обратное: если два оператора  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  коммутируют и оператор  $\hat{A}$  имеет невырожденные собственные значения<sup>1)</sup>, то его собственные функции являются собственными функциями и оператора  $\hat{B}$ , т.е. величины  $A$  и  $B$  совместны.

*Доказательство:*

$$\hat{A}\varphi_n = A_n\varphi_n, \quad \hat{B}\varphi_n = B_n\varphi_n.$$

Отсюда

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\varphi_n = 0, \quad \psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n(t)\varphi_n(\mathbf{r})$$

и

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\sum_n c_n(t)\varphi_n = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi = 0 \quad (2.10)$$

Поскольку  $\psi$  — произвольная волновая функция, то из (2.10) следует

$$[\hat{A}, \hat{B}] = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = 0 \quad (2.11)$$

Оператор  $(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})$  называется коммутатором операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  и обозначается как  $[\hat{A}, \hat{B}]$ .

<sup>1)</sup> Невырожденному собственному значению  $A_n$  соответствует одна собственная функция  $\varphi_n$ , вырожденному — несколько собственных функций.

Для несовместных физических величин  $A$  и  $B$  коммутатор их операторов  $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ . Можно показать, что для несовместных физических величин имеет место соотношение неопределенностей общего вида

$$\delta_A \delta_B \geq \left| \frac{1}{2i} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|, \quad (2.12)$$

где среднеквадратичные отклонения от средних значений равны

$$\delta_A = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle^{1/2} = \langle (A^2) - \langle A \rangle^2 \rangle^{1/2},$$

$$\delta_B = \langle (B - \langle B \rangle)^2 \rangle^{1/2} = \langle (B^2) - \langle B \rangle^2 \rangle^{1/2},$$

В частности, коммутатор операторов координаты и импульса равен  $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$  и из (2.12) получаем соотношение неопределенностей координаты и импульса в форме (1.19).

Резюмируя, отметим, что наиболее интересные физические результаты, получаемые из изложенной выше формальной схемы волновой квантовой механики, состоят в следующем. Для любого эрмитова оператора  $\hat{A}$ , связанного с определенной физической величиной  $A$ , собственные функции соответствуют состояниям, в которых эта физическая величина имеет точно определенное значение (среднее значение оператора совпадает с собственным значением). Произвольная волновая функция может быть разложена по собственным функциям этого оператора. Физический смысл этого разложения состоит в том, что система находится в суперпозиционном состоянии, в котором каждая собственная функция в разложении соответствует определенному возможному состоянию, которое получается при измерении  $A$ . Вероятность получения определенного значения  $A_n$  пропорциональна квадрату модуля коэффициента перед соответствующей собственной функцией в разложении. Суперпозиционные состояния, таким образом, соответствуют таким состояниям системы, в которых данная наблюдаемая не является точно определенной величиной (сравните с волновым пакетом (1.10)). Аналогичная формальная схема и соответствующие физические результаты сохраняются и в матричной квантовой механике с заменой волновой функции на вектор состояния и дифференциальных операторов на матрицы.

## 2.2. Уравнение Шредингера

В главе 1 мы, опираясь на данные эксперимента, постулировали простейшую волновую функцию — волну де Бройля, описывающую простейший тип движения квантового объекта — свободное движение частицы. Есть ли регулярный способ получения волновой функции при заданных физических условиях? Такой способ есть — это решение уравнения Шредингера для волновой функции. Уравнение Шредингера, играющее в квантовой механике ту же роль, что и уравнение

Ньютона в классической механике, вводится как постулат. Но есть физические соображения, которые подсказывают форму этого уравнения. Рассмотрим для простоты одномерный случай свободного движения микрочастицы и определим, какому волновому уравнению удовлетворяет волна де Бройля.

Попробуем сначала использовать для наших целей волновое уравнение классической физики. Оно имеет вид

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}, \quad (2.13)$$

где  $\psi = \psi(x, t)$  — волновое поле (например, компонента вектора электрического поля в электромагнитной волне, плотность среды или давление в звуковой волне и т.д.),  $c$  — скорость распространения волны. Подстановкой  $\psi = \exp[i(kx - \omega t)]$  убеждаемся, что волна де Бройля является решением уравнения (2.13), если имеет место соотношение  $\omega^2 = k^2 c^2$ , т.е. квадрат частоты волны пропорционален квадрату волнового числа. Это так называемое дисперсионное соотношение связывает частоту  $\omega$  и волновое число  $k$  в световой и звуковой волнах. Однако, для свободного движения микрочастицы имеет место другое соотношение, следующее из формулы де Бройля (1.5), а именно

$$\omega = \frac{\hbar}{2m} k^2 \quad (2.14)$$

(частота пропорциональна квадрату волнового числа).

Изменим классическое волновое уравнение (2.13), заменив вторую производную по времени на первую и подобрав при этом коэффициенты так, чтобы выполнялось соотношение (2.14). Тогда для свободного движения получаем волновое уравнение

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}. \quad (2.15)$$

Заметим, что для свободного одномерного движения микрочастицы  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \hat{H}$ . Уравнение (2.15) — уравнение Шредингера для свободной частицы (потенциальная энергия  $U = 0$ ).

Обобщая, вводим постулат: для трехмерного движения частицы с гамильтонианом  $\hat{H} = \hat{K}(\mathbf{p}) + \hat{U}(\mathbf{r}, t) \equiv \hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ , где  $\hat{K}(\mathbf{p})$  и  $\hat{U}(\mathbf{r}, t)$  — соответственно операторы кинетической и потенциальной энергии, имеет место уравнение Шредингера в форме

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left( \hat{K}(\mathbf{p}) + \hat{U}(\mathbf{r}, t) \right) \psi. \quad (2.16)$$

Наконец, можно обобщить это утверждение на случай произвольной квантовой системы с гамильтонианом  $\hat{H}$  и записать в общем виде уравнение Шредингера (1926г.):

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi. \quad (2.17)$$

Уравнения (2.15) и (2.16) — частные случаи общего уравнения Шредингера (2.17). Для нахождения решения уравнения Шредингера в частных производных (2.17) к нему надо добавить начальное и граничные условия.

В общем случае оператор Гамильтона  $\hat{H}$  зависит от времени. *Квантовая система, для которой оператор  $\hat{H}$  не зависит от времени, называется стационарной.* Для стационарной системы уравнение (2.16) упрощается.

**2.2.1. Стационарное уравнение Шредингера.** Пусть оператор Гамильтона частицы не зависит от времени:  $\hat{H} = \hat{K}(\mathbf{p}) + \hat{U}(\mathbf{r}) \equiv \hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ .

Представим искомую волновую функцию в виде

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

и подставим ее в уравнение Шредингера (2.17). Получаем:

$$i\hbar\varphi(\mathbf{r})\frac{\partial f}{\partial t} = f(t)\hat{H}\varphi(\mathbf{r}). \quad (2.18)$$

Разделим обе части уравнения (2.18) на  $\varphi(\mathbf{r})f(t)$ . Имеем

$$i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{\varphi(\mathbf{r})}\hat{H}\varphi(\mathbf{r}) = \text{const} = E, \quad (2.19)$$

(поскольку функция  $i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{\partial f}{\partial t}$  зависит от только от  $t$ , а функция  $\frac{1}{\varphi(\mathbf{r})}\hat{H}\varphi(\mathbf{r})$  зависит от только от  $\mathbf{r}$ , то  $E = \text{const}$ ). Из (2.19) следует уравнение для временной части волновой функции

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}f(t),$$

решение которого дает

$$f(t) = C \exp\left(-\frac{iE}{\hbar}t\right).$$

Из (2.19) следует также уравнение для пространственной части волновой функции

$$\hat{H}\varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}). \quad (2.20)$$

Уравнение (2.20) называется *стационарным уравнением Шредингера*. Его можно рассматривать как задачу на собственные функции и собственные значения оператора Гамильтона. Набор собственных значений оператора Гамильтона определяет энергетический спектр системы. Стационарное уравнение Шредингера (2.20) дополняется заданием граничных условий. На искомую волновую функцию накладываются требова-

ния ее непрерывности и непрерывности ее производной. Определенная таким образом собственная функция нормирована:  $\int |\varphi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = 1$ .

Если стационарное уравнение Шредингера имеет дискретный спектр, то полная волновая функция в координатном представлении имеет вид

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum c_n \varphi_n(\mathbf{r}) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right),$$

где  $\varphi_n$  — собственные функции  $\hat{H}$ .

Таким образом, мы построили общий алгоритм нахождения волновой функции  $\psi(\mathbf{r}, t)$  стационарной системы:

1. определяем гамильтониан стационарной системы  $\hat{H}$ ;
2. записываем стационарное уравнение Шредингера (2.20) с граничными условиями;
3. решая уравнение Шредингера, находим волновую функцию  $\psi(\mathbf{r}, t)$ .

Найденная таким образом волновая функция, в соответствии с первым постулатом квантовой механики, содержит наиболее полную информацию о квантовой системе. В последующем, используя этот алгоритм, мы рассмотрим три задачи на определение энергетического спектра микрочастицы. В п. 2.4 дан иллюстративный пример дискретного спектра частицы в прямоугольной яме, в главе 3 рассматривается дискретный спектр на примерах атома водорода и гармонического осциллятора, наконец в главе 4 рассмотрен зонный энергетический спектр электрона в кристаллической решетке. В п. 4.4 кратко рассмотрены энергетические спектры электрона в низкоразмерных квантовых структурах (квантовых ямах, сверхрешетках и квантовых точках).

### 2.3. Движение частицы в прямоугольной потенциальной яме

В настоящем разделе, на основе стационарного уравнения Шредингера, мы рассмотрим задачу о движении микрочастицы в прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме, допускающей простое аналитическое решение и иллюстрирующей вместе с тем важные особенности ограниченного в пространстве движения микрочастицы. Качественно рассмотрены прямоугольная яма конечной глубины и туннелирование квантовой частицы через энергетический барьер.

Рассмотрим одномерное движение частицы массы  $m$  вдоль оси  $x$  в прямоугольной потенциальной яме (рис. 2.1). Это пример финитного движения — движения в ограниченной области пространства.

Гамильтониан частицы имеет вид

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x), \quad (2.21)$$

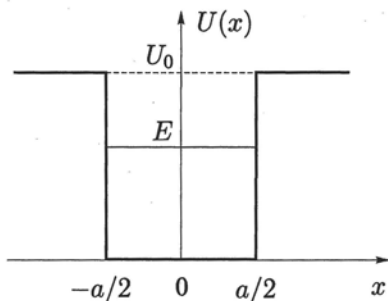


Рис. 2.1. Зависимость потенциальной энергии микрочастицы  $U(x)$  от координаты  $x$  в случае прямоугольной потенциальной ямы глубины  $U_0$ .  $E$  — полная энергия микрочастицы

где  $U(x) = U_0$  при  $x < -a/2$ ,  $x > a/2$  и  $U(x) = 0$ , при  $-a/2 \leq x \leq a/2$ .

Соответствующее стационарное уравнение Шредингера записывается в виде

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \varphi(x) = E\varphi(x), \quad (2.22)$$

где  $E$  — собственное значение оператора Гамильтона (полная энергия частицы).

**2.3.1. Прямоугольная бесконечно глубокая яма.** Сначала мы рассмотрим более простую бесконечно глубокую потенциальную яму с  $U_0 = \infty$ . Если микрочастица находится внутри такой ямы, то она не может из нее выйти, поскольку на границах ямы на нее действуют бесконечно большие силы  $F_x = -\partial U/\partial x$ , направленные внутрь ямы. Поэтому в области вне ямы ( $x < -a/2$ ,  $x > a/2$ ) волновая функция  $\varphi(x) = 0$  и граничные условия для  $\varphi(x)$  имеют вид

$$\varphi(-a/2) = \varphi(a/2) = 0. \quad (2.23)$$

Потенциальная функция  $U(x) = 0$  в интервале  $-a/2 \leq x \leq a/2$ , поэтому уравнение (2.22) внутри ямы приобретает форму

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi = E\varphi. \quad (2.24)$$

Если не накладывать на решение граничные условия, то уравнение (2.24) описывает свободное движение микрочастицы с кинетической энергией  $E$ . В этом случае его решение имеет вид волны де Бройля  $\varphi(x) = A \exp(ikx)$ .

Общее решение (2.24) для случая ямы можно записать в виде суперпозиции двух волн де Бройля

$$\varphi(x) = A_1 \exp(ikx) + A_2 \exp(-ikx), \quad (2.25)$$

где  $A_1$  и  $A_2$  — постоянные, а волновое число

$$k = \sqrt{2mE/\hbar^2}. \quad (2.26)$$

Поскольку потенциальная яма (и гамильтониан  $H$ ) симметрична по отношению к инверсии относительно точки  $x = 0$ , то  $|\varphi(x)|^2 = |\varphi(-x)|^2$ . Поэтому мы имеем две возможности: либо  $\varphi(x) = \varphi(-x)$  (волновая функция — симметричная,  $A_1 = A_2 \equiv A/2$ ), либо  $\varphi(x) = -\varphi(-x)$  (волновая функция — антисимметричная,  $A_1 = -A_2 \equiv B/2i$ ).

Таким образом, с учетом (2.25), имеем два типа собственных функций

$$\varphi_+(x) = A \cos(kx), \quad (2.27)$$

$$\varphi_-(x) = B \sin(kx). \quad (2.28)$$

Из граничного условия (2.23) для симметричной собственной функции  $\varphi_+(x)$  следует, что  $\cos(ka/2) = 0$ , откуда  $k_n a/2 = \pi n/2$ , где  $n = 1, 3, 5 \dots$  — нечетные целые числа. Таким образом, граничным условиям удовлетворяют не все решения (2.27), а только решения  $\varphi_n(x) = A_n \cos(k_n x)$  с квантованными значениями волнового числа

$$k_n = \pi n/a, \quad n = 1, 3, 5 \dots \quad (2.29)$$

Аналогично, из (2.23), в случае антисимметричной функции  $\varphi_-(x)$ , следует, что  $\sin(ka/2) = 0$ , откуда  $k_m a/2 = \pi m$ , где  $m = 1, 2, 3, 4 \dots$  — целые числа. Переобозначим  $m = n/2$ , тогда  $k_n a/2 = \pi n/2$ , где  $n = 2, 4, 6 \dots$  — четные целые числа, нумерующие антисимметричные собственные функции  $\varphi_n(x) = B_n \sin(k_n x)$  с разрешенными квантованными значениями волнового числа

$$k_n = \pi n/a, \quad n = 2, 4, 6 \dots \quad (2.30)$$

Постоянные  $A_n$  и  $B_n$  определяются из условия нормировки соответствующих собственных функций:

$$\int_{-a/2}^{a/2} |\varphi_n(x)|^2 dx = 1. \quad (2.31)$$

Используя (2.29) и (2.30) в (2.26), получаем разрешенные квантованные значения энергии микрочастицы

$$E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}. \quad (2.32)$$

Таким образом, спектр энергии частицы, совершающей финитное движение внутри потенциальной ямы, дискретен.

Определяя из условия (2.31) константы нормировки  $A_n$ , записываем полные (зависящие от координаты и времени) волновые функции для  $n$ -го разрешенного значения энергии  $E_n$

$$\psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right), \quad n = 1, 3, 5 \dots \quad (2.33)$$

$$\psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right), \quad n = 2, 4, 6 \dots \quad (2.34)$$

На рис. 2.2 показаны два нижних значения энергии  $E_n$  и соответствующие волновые функции  $\varphi_n(x)$ .

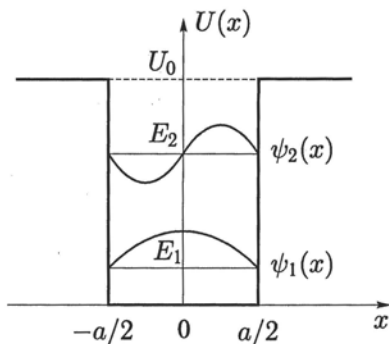


Рис. 2.2. Симметричная  $\varphi_1(x)$  и антисимметричная  $\varphi_2(x)$  волновые функции нижних энергетических состояний  $E_1$  и  $E_2$  микрочастицы в бесконечно глубокой потенциальной яме ( $U_0 \rightarrow \infty$ )

Правая часть формул (2.33) показывает, что собственная функция оператора энергии  $\varphi_n(x, t)$  представляет собой суперпозицию двух собственных функций оператора импульса, соответствующих движениям в противоположных направлениях вдоль оси  $x$ . Поэтому в состоянии с определенной энергией  $E_n$  импульс частицы не определен, точнее, определен по величине, но неопределен по направлению.

Квадрат модуля волновых функций (2.33) и (2.34) дает плотность вероятности  $w_n(x)$  обнаружить частицу в момент времени  $t$  в точке  $x$ :

$$w_n(x) = |\psi_n(x, t)|^2 = \frac{2}{a} \cos^2 \frac{\pi n x}{a}, \quad n = 1, 3, 5 \dots \quad (2.35)$$

$$w_n(x) = |\psi_n(x, t)|^2 = \frac{2}{a} \sin^2 \frac{\pi n x}{a}, \quad n = 2, 4, 6 \dots \quad (2.36)$$

внутри интервала  $(-a/2, a/2)$  и  $w_n(x) = 0$  вне его. Из (2.35), (2.36) видно, что плотность вероятности стационарного состояния не зависит от времени.

На рис. 2.3 показаны зависимости плотности вероятности  $w_n(x)$  для низших квантовых состояний с квантовыми числами  $n = 1$  и  $n = 2$ , а также для высоковозбужденного квантового состояния с  $n = 10$ . В основном ( $n = 1$ ) состоянии вероятнее всего обнаружить микрочастицу в центре ямы. Это предсказание квантовой механики качественно отличается от предсказания классической теории. Плотность вероятности обнаружения классической частицы, совершающей движение с постоянным импульсом внутри бесконечно глубокой потенциальной ямы, не зависит от координаты  $x$ : плотность вероятности  $w(x)$  — постоянна.

С ростом квантового числа  $n$  растет число максимумов плотности вероятности, равное  $n$ , и максимумы располагаются все ближе друг к другу (рис. 2.3). При очень больших  $n$  плотность распределения  $w_n(x)$  практически равномерна, т.е. в этом пределе частица ведет себя классическим образом.

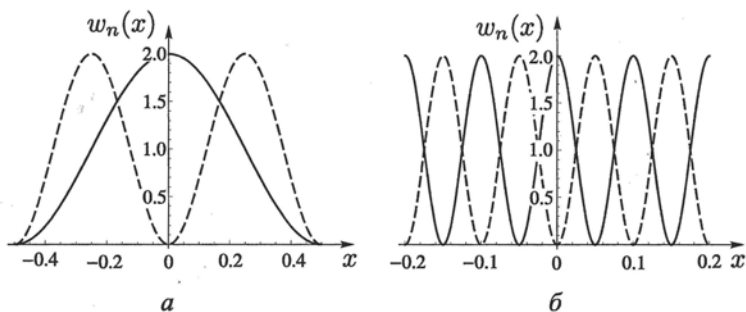


Рис. 2.3. Нормированная в интервале  $-1/2 \leq x \leq 1/2$  плотность вероятности обнаружения микрочастицы  $w_n(x) = 2 \cos^2 \pi n x$  для  $n = 1$  (сплошная кривая) и  $w_n(x) = 2 \sin^2 \pi n x$  для  $n = 2$  (штриховая) (а) и для  $n = 10$  (б)

**2.3.2. Прямоугольная яма конечной глубины.** Рассмотрим теперь движение частицы в яме конечной глубины  $U_0$  (рис. 2.1). Формально, в данном случае  $F = -\frac{\partial U}{\partial t} = \infty$ , как и в случае  $U_0 = \infty$ , однако физический анализ показывает, что это не так. Действительно, поскольку в реальной системе приращение потенциальной энергии  $\Delta U = U_0 < \infty$  происходит на конечном расстоянии  $\Delta x$ , то  $F = -\frac{\partial U}{\partial x} = -\frac{U_0}{\Delta x} < \infty$ . Поэтому процедура решения уравнения Шредингера (2.22) отличается от процедуры, описанной в п. 2.3.1.

Разобьем ось  $x$  на три области: область I ( $x < -a/2$ ), II ( $-a/2 \leq x \leq a/2$ ) и III ( $x \geq a/2$ ). Далее следует использовать уравнение Шредингера (2.22), где вид функции  $U(x)$  показан на рис. 2.1. Для каждой области надо найти его решения  $\varphi_I(x)$ ,  $\varphi_{II}(x)$  и  $\varphi_{III}(x)$ , а затем сшить эти решения на границах  $x = \pm a/2$ , используя условия непрерывности

функций  $\varphi(x)$  и их производных  $d\varphi(x)/dx$ . Мы исследуем эту задачу качественно.

Внутри ямы, в области II, где  $U(x) = 0$ , уравнение Шредингера задается формулой (2.24). Его решение имеет вид

$$\varphi_{II}(x) = A_2 \exp(ik_2x) + B_2 \exp(-ik_2x), \quad k_2 = (2mE/\hbar^2)^{1/2}. \quad (2.37)$$

В области I, где  $U(x) = U_0 > E$ , решение уравнения (2.22) имеет вид

$$\varphi_I(x) = A_1 \exp(k_1x) + B_1 \exp(-k_1x), \quad k_1 = (2m(U_0 - E)/\hbar^2)^{1/2}. \quad (2.38)$$

Аналогично, в области III

$$\varphi_{III}(x) = A_3 \exp(k_1x) + B_3 \exp(-k_1x). \quad (2.39)$$

Имеется шесть неизвестных коэффициентов  $A_i$  и  $B_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ). Поскольку решение должно оставаться конечным, мы должны положить  $B_1 = A_3 = 0$ . Таким образом, остается четыре неопределенных коэффициента и неизвестная энергия  $E$  — всего пять неопределенных величин. Условия непрерывности функций  $\varphi(x)$  и их производных  $d\varphi(x)/dx$  на двух границах  $x = \pm a/2$ , при подстановке в них (2.37)–(2.39), дают четыре уравнения. Таким образом, функция  $\varphi(x)$  находится с точностью до неопределенного коэффициента (амплитуды), причем система уравнений имеет решения, когда параметр  $E$  принимает определенные дискретные значения. На рис. 2.4 показаны два нижних энергетических уровня и соответствующие волновые функции.

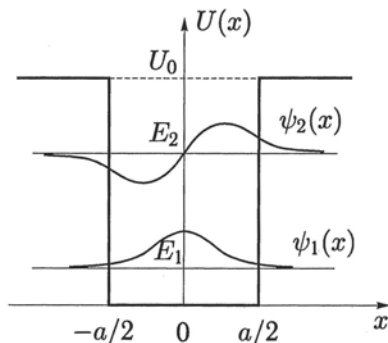


Рис. 2.4. Схематическое изображение двух волновых функций для низших энергетических состояний микрочастицы в потенциальной яме конечной глубины. В соответствии с (2.38), волновая функция возбужденного состояния  $\psi_2(x)$ , проникает дальше в классически недоступную область, чем волновая функция основного состояния  $\psi_1(x)$

Рассмотрим более подробно основное состояние с энергией  $E_1$ . Внутри ямы ( $-a/2 \leq x \leq a/2$ ) волновая функция ведет себя, аналогично случаю бесконечно глубокой ямы:  $\varphi_{II}(x) \sim \cos \left[ (2mE_1/\hbar^2)^{1/2} x \right]$ , а вне ямы в области положительных  $x$  ( $x \geq a/2$ ) волновая функция экспоненциально затухает:  $\varphi_{III}(x) \sim \exp \left[ -\sqrt{2m(U_0 - E_1)/\hbar^2} x \right]$ . Аналогично она затухает и в области  $x \leq -a/2$ .

Область, в которой полная энергия меньше потенциальной энергии,  $E < U(x)$ , называется классически недоступной областью. Это неравенство не выполняется в классической физике, где полная энергия  $E = K + U(x) > U(x)$ , поскольку кинетическая энергия  $K > 0$ . Классически недоступными на рис. 2.4 являются области  $x \leq -a/2$  и  $x \geq a/2$ . Поскольку экспоненциально затухающая волновая функция отлична от нуля за пределами ямы, то квантовая микрочастица может проникать в классически недоступную область.

**2.3.3. Туннелирование через барьер. Ток вероятности.** Способность квантового объекта проникать в классически недоступную область обуславливает эффект проникновения (туннелирования) микрочастицы через потенциальный барьер (рис. 2.5).

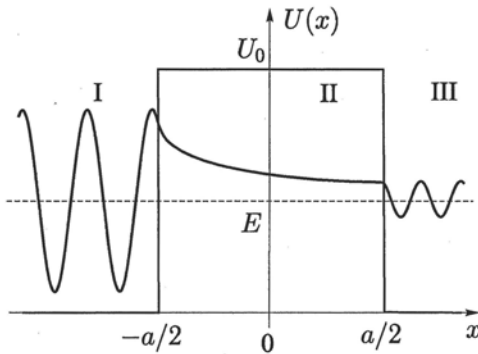


Рис. 2.5. Туннелирование микрочастицы через прямоугольный потенциальный барьер,  $U_0$  — высота барьера,  $E$  — полная энергия частицы. Классическая частица с энергией  $E < U_0$  не может проникнуть через такой барьер и отражается назад

На рис. 2.5 схематически изображено поведение волновых функций: осциллирующее в областях  $x \leq -a/2$  и  $x \geq a/2$  и экспоненциально затухающее в классически недоступной области  $-a/2 \leq x \leq a/2$ . Вероятность прохождения микрочастицы через барьер задается выражением

$$T \sim |\varphi_{II}(a)|^2 \sim \exp \left[ -2\sqrt{2m(U_0 - E)/\hbar^2} a \right], \quad (2.40)$$

где  $\varphi_{II}(x)$  — волновая функция в области II (рис. 2.5).

Физический смысл коэффициента прохождения через потенциальный барьер  $T$  становится ясным, если ввести понятие плотности потока вероятности. Рассмотрим микрочастицу с массой  $m$ , летящую свободно вдоль оси  $x$ . Нестационарное уравнение Шредингера имеет вид (2.15):

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi. \quad (2.41)$$

Умножаем обе части уравнения (2.41) слева на  $\psi^*$ , а уравнение, комплексно сопряженное уравнению (2.41), умножаем справа на  $\psi$ . Затем вычтем второе уравнение из преобразованного уравнения (2.41). В результате получаем уравнение для плотности вероятности  $\psi^* \psi$  в виде

$$i\hbar \frac{\partial \psi^* \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \psi^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi - \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi^* \right) \psi \right)$$

Оно преобразуется к виду

$$\frac{\partial \psi^* \psi}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} j_x, \quad (2.42)$$

где введена плотность потока вероятности вдоль оси  $x$ :

$$j_x = \frac{i\hbar}{2m} \left( \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right). \quad (2.43)$$

Уравнение (2.42) — уравнение непрерывности для плотности вероятности  $\psi^* \psi$ . Оно выражает закон сохранения вероятности: вероятность обнаружения микрочастицы в точке  $x$  в физически бесконечно малом объеме  $dx$  не создается и не уничтожается, а изменяется во времени за счет разности приходящего и уходящего из данного локального объема потоков вероятности.

Для микрочастицы с волновой функцией  $\psi(x, t) = A \exp[i(kx - \omega t)]$  (свободное движение в положительном направлении оси  $x$ ) для плотности потока вероятности имеем из (2.43):  $j_x = \frac{\hbar k}{m} \psi^* \psi = v \psi^* \psi$ , где  $v$  — скорость микрочастицы.

Пусть к барьеру, показанному на рис. 2.5, подлетает слева микрочастица, с которой связана плотность потока вероятности  $j_i$  («падающий» на барьер поток вероятности). Прощедший сквозь барьер поток  $j_t$  и отраженный поток вероятности  $j_r$ . По закону сохранения вероятности  $j_i = j_t + j_r$ . Мы можем теперь определить безразмерные коэффициент прохождения микрочастицы через потенциальный барьер по формуле  $T = j_t/j_i$  и коэффициент отражения от барьера  $R = j_r/j_i$ . Очевидно, что  $R + T = 1$ . Эти выражения и раскрывают физический смысл коэффициентов  $T$  и  $R$ .

Мы используем плотность потока вероятности (2.43) в п. 11.7.5 при рассмотрении принципов функционирования сверхпроводящих контак-

тов, реализующих кубиты в современных квантовых компьютерах на сверхпроводниках.

Квантовое туннелирование играет важную роль во многих физических системах и устройствах. Туннелирование  $\alpha$ -частиц из неустойчивых ядер вызывает радиоактивный распад элементов ( $\alpha$ -распад). В классических компьютерах, туннелирование электронов через изолирующие слои приводит к утечке электрического тока и нагреву компонентов компьютера и устанавливает нижний предел (1–3 нм) на размер компьютерных чипов.

При приложении достаточно сильного постоянного электрического поля к полупроводнику, поверхностный потенциальный барьер для электрона становится достаточно тонким для осуществления туннелирования электрона из объема полупроводника наружу, что приводит к появлению тока, экспоненциально сильно зависящего от напряженности поля (холодная электронная эмиссия). Эта зависимость является следствием экспоненциальной зависимости коэффициента прохождения потенциального барьера от его толщины, формула (2.40). Эффект холодной электронной эмиссии используется в электронных сканирующих микроскопах и в устройствах флэш-памяти.

Потенциальный барьер для электронов создается при разделении двух проводников или сверхпроводников тонким слоем изолятора. Эти, так называемые туннельные (или джозефсоновские) контакты находят применение как чувствительные магнитометры и вольтметры. В последнее время джозефсоновские сверхпроводящие контакты были использованы в качестве квантовых битов (кубитов) для создания аналогового квантового компьютера, содержащего более сотни кубитов в рабочем регистре (см. раздел 11.7.5).

## Глава 3

# АТОМ ВОДОРОДА. ПРИБЛИЖЕНИЕ ДВУХУРОВНЕВОГО АТОМА. КВАНТОВЫЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

В настоящей главе рассматриваются две квантовые системы, уравнение Шредингера для которых допускает аналитическое решение. Первой из них является атом водорода (Шредингер, 1926 г.). Электрон в атоме водорода движется в трехмерной центральносимметричной потенциальной яме и имеет дискретный энергетический спектр. Дискретность энергетического спектра характерна и для других, более сложных атомов. Неэквидистантность уровней энергии в атомных спектрах позволяет выделить два энергетических уровня (приближение двухуровневого атома). Двухуровневые атомы используются в качестве квантовых битов (кубитов) в прототипах квантовых компьютеров и в лазерах для генерации когерентного излучения, при переходах между двумя уровнями энергии.

Вторая система — квантовый гармонический осциллятор, который интересен тем, что широко встречается в физике (колебания атомов в молекулах и твердых телах, моды электромагнитного поля в резонаторе). Спектр гармонического осциллятора эквидистантный и содержит бесконечное число уровней. В этом отношении гармонический осциллятор является прямой противоположностью двухуровневому атому.

### 3.1. Уравнение Шредингера для атома водорода и его решение

Атом водорода состоит из положительно заряженного ядра — протона и отрицательно заряженного электрона. Ядро имеет размер порядка  $10^{-13}$  см, а размер атома — около  $10^{-8}$  см. Поскольку масса ядра больше массы электрона приблизительно в  $10^3$  раз, то ядро, с большой точностью, можно считать неподвижным.

Гамильтониан электрона имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} + U(r),$$

здесь  $\hat{\mathbf{p}}$  — оператор импульса,  $-e$  — заряд электрона,  $U(r) = -\frac{e^2}{r}$  — потенциальная энергия электрона,  $+e$  — заряд ядра. Поскольку  $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$  запишем оператор Гамильтона в следующем виде

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta + \hat{U}(r). \quad (3.1)$$

Введем сферические координаты стандартным образом

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta, \quad (3.2)$$

где  $\theta$  — угол между осью  $z$  и радиус-вектором  $\mathbf{r}$ , а  $\varphi$  — угол, между проекцией вектора  $\mathbf{r}$  на плоскость  $xy$  и осью  $x$ .

Лапласиан, записанный в сферических координатах (рис. 3.1), имеет вид

$$\Delta = \Delta_r + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\varphi}, \quad (3.3)$$

где

$$\begin{aligned} \Delta_r &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right), \\ \Delta_{\theta,\varphi} &= \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}, \\ 0 \leq r \leq +\infty, \quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi. \end{aligned} \quad (3.4)$$

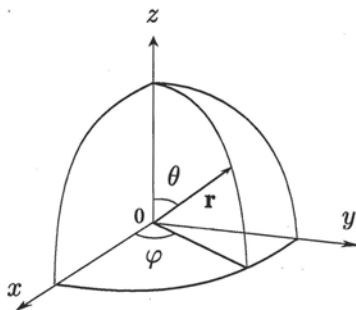


Рис. 3.1. Сферические координаты электрона в атоме водорода. Ядро находится в начале координат,  $\mathbf{r}$  — радиус-вектор электрона

Стационарное уравнение Шредингера

$$H\psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi) \quad (3.5)$$

с учетом (3.1)–(3.4) записывается в виде

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta,\varphi} \psi(r, \theta, \varphi) + \frac{2m_e}{\hbar^2} [E - U(r)] \psi(r, \theta, \varphi) = 0. \quad (3.6)$$

Уравнение (3.6), описывающее движение частицы в произвольном центрально-симметричном потенциальном поле  $U = U(r)$ , допускает разделение переменных, т.е. его решение может быть представлено в виде

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi), \quad (3.7)$$

где  $R(r)$  — радиальная часть волновой функции;  $Y(\theta, \varphi)$  — сферическая функция, которая определяет угловую часть волновой функции.

Подставляя волновую функцию (3.7) в уравнение Шредингера (3.6) и разделив обе части уравнения на  $\psi$ , получим следующее выражение:

$$\frac{\frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} [E - U(r)] R(r)}{R(r)} = - \frac{\Delta_{\theta, \varphi} Y}{Y(\theta, \varphi)} = \lambda = \text{const}. \quad (3.8)$$

Поскольку левая часть первого равенства в (3.8) зависит только от  $r$ , а правая часть — только от  $\theta$  и  $\varphi$ , то обе они должны равняться константе разделения переменных  $\lambda$ . Тогда из (3.8) получаем уравнение для радиальной части волновой функции:

$$\Delta_r R + \frac{2m_e}{\hbar^2} (E - U_{\text{эфф}}(r)) R = 0, \quad (3.9)$$

где введена эффективная потенциальная энергия

$$U_{\text{эфф}} = U(r) + \lambda \frac{\hbar^2}{2m_e r^2}. \quad (3.10)$$

Первое слагаемое описывает кулоновское притяжение электрона к ядру, а второе — отталкивание, обусловленное вращением электрона вокруг ядра. Уравнение для угловой части волновой функции следует также из (3.8) и имеет вид

$$\Delta_{\theta, \varphi} Y + \lambda Y = 0. \quad (3.11)$$

Функция  $Y = Y(\theta, \varphi)$ , в свою очередь, допускает разделение переменных

$$Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi).$$

Подставляем  $Y(\theta, \varphi)$  в уравнение (3.11) и делим обе части на  $Y$ . Вводя новую постоянную разделения  $m^2$  получаем два уравнения:

$$\frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + m^2 \Phi(\varphi) = 0, \quad (3.12a)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d}{d\theta} \right) \Theta + \left( \lambda - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta = 0. \quad (3.12b)$$

Таким образом, мы разделили переменные  $r$ ,  $\theta$  и  $\varphi$ , получив три уравнения для  $R(r)$ , (3.9), и для  $\Phi(\varphi)$  и  $\Theta(\theta)$ , (3.12). Решение уравнения (3.12a) имеет вид

$$\Phi(\varphi) = Ce^{im\varphi}.$$

Константа  $m$  называется *магнитным квантовым числом*. Граничные условия  $\varphi(0) = \varphi(2\pi)$  допускают для него лишь целые положительные и отрицательные значения

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

Для анализа уравнения (3.12b) сделаем замену переменных  $\cos \theta = \xi$ . Тогда оно сводится к виду

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

Существует регулярный метод решения уравнений такого вида — метод разложения в ряд.<sup>1)</sup> Условия сходимости ряда приводят к следующим ограничениям:

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

где  $l$  — *орбитальное квантовое число*. Решением уравнения (3.12b) являются функции

$$\Theta_{l,m} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos \theta), \quad (3.13)$$

где  $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$ . Входящие в (3.13) функции  $P_l^{|m|}(\cos \theta)$  — *присоединенные функции Лежандра*:

$$P_l^{|m|}(x) = (1 - x^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l(x),$$

где  $P_l(x)$  — *полиномы Лежандра*:

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} [(x^2 - 1)^l].$$

Таким образом, решение уравнения (3.11), определяющее угловую часть волновой функции, можно представить следующим образом:

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi}. \quad (3.14)$$

Теперь осталось определить радиальную часть волновой функции  $R(r)$ , являющуюся решением уравнения (3.9). Это уравнение сводится

<sup>1)</sup> Полное решение этого уравнения изложено в [2].

к одномерному уравнению Шредингера со специальным граничным условием при  $r = 0$ . Для этого используем подстановку

$$R(r) = \frac{f(r)}{r} \quad (3.15)$$

и, поскольку функция  $R(r)$  ограничена, то должно выполняться условие  $f(0) = 0$ . Подставляя (3.15) в уравнение (3.9) получим одномерное уравнение Шредингера:

$$\frac{d^2 f}{dr^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} (E - U_{\text{эфф}}(r)) f = 0. \quad (3.16)$$

Дальнейшее рассмотрение уравнения (3.16) требует конкретизации вида потенциала  $U(r)$ . В случае кулоновского потенциала имеем:

$$U_{\text{эфф}}(r) = -\frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2m_e r^2} l(l+1). \quad (3.17)$$

Проанализируем уравнение (3.16) качественно. Вид функции  $U_{\text{эфф}}$  зависит от  $l$ . Рассмотрим сначала случай  $l = 0$  и изобразим зависимость  $U_{\text{эфф}}(x)$  (см. рис. 3.2). Электрон совершает финитное движение в потенциальной яме, следовательно, его энергетический спектр дискретен с уровнями энергии  $E_1, E_2, E_3 \dots$ . Ниже минимального уровня  $E_1$  опуститься невозможно из-за соотношения неопределенностей. Теперь рассмотрим случай  $l > 0$ . Снова имеем потенциальную яму, в которой энергия имеет дискретный спектр (рис. 3.3).

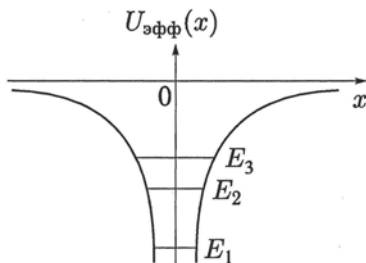


Рис. 3.2. Зависимость эффективной потенциальной энергии электрона от координаты  $x$  при  $l = 0$ . Электрон находится в потенциальной яме, полученной вращением кривой  $U_{\text{эфф}}(x)$  относительно оси энергий

Решая уравнение (3.16) в случае кулоновского потенциала (см., например, [2]) получим, что конечные и однозначные решения существуют только при следующих значениях энергии электрона:

$$E_n = -\frac{e^4 m_e}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad (3.18)$$

где число  $n$  принимает значения

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

и называется *главным квантовым числом*.

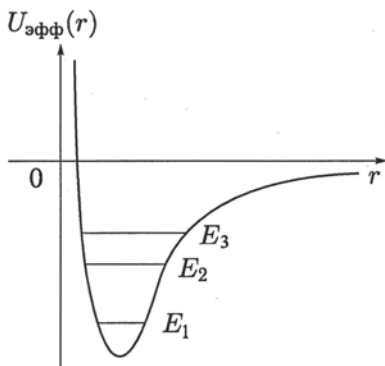


Рис. 3.3. Зависимость эффективной потенциальной энергии электрона от координаты  $r$  при  $l > 0$ .  $E_1, E_2, E_3$  — дискретные уровни энергии

Формула (3.18) в точности совпадает с формулой полуклассической теории атома водорода Бора и полностью подтверждается экспериментом.

Функция  $R_{nl}(r)$  задается выражением

$$R_{nl}(r) = \text{const} \exp\left(\frac{-r}{a_0 n}\right) \left(\frac{2r}{a_0 n}\right)^l L_{n-l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{a_0 n}\right), \quad (3.19)$$

где  $a_0 = \hbar^2/m_e e^2 = 0.5 \cdot 10^{-8}$  см — радиус первой боровской орбиты, а

$$L_k^n(x) = \frac{d^s}{dx^s} L_k(x), \quad \text{где } L_k(x) = e^x \frac{d^k}{dx^k} (e^{-x} x^k) \quad (3.20)$$

— *полином Лагерра*.

Таким образом, решение уравнения Шредингера для электрона в атоме водорода (3.6), имеет вид

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) \Theta_{l,m}(\theta) \Phi_m(\varphi). \quad (3.21)$$

Главное квантовое число  $n$ , орбитальное  $l$  и магнитное  $m$  квантовые числа могут принимать следующие значения:

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

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

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

Выпишем несколько нормированных волновых функций для низших энергетических состояний:

$$\begin{aligned} \psi_{100} &= (\pi a_0^3)^{-1/2} \exp(-r/a_0), \\ \psi_{200} &= (8\pi a_0^3)^{-1/2} \exp(-r/2a_0) \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right), \\ \psi_{21\pm 1} &= (8\sqrt{\pi a_0^3})^{-1} \exp(-r/2a_0) \sin \theta e^{\pm i\varphi} \frac{r}{a_0}, \\ \psi_{210} &= (4\sqrt{2\pi a_0^3})^{-1} \exp(-r/2a_0) \cos \theta \frac{r}{a_0}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Волновая функция  $\psi_{100}$  в (3.22) описывает основное состояние атома водорода ( $n = 1$ ), остальные три функции соответствуют первому возбужденному уровню энергии ( $n = 2$ ). Энергия, необходимая для отрыва электрона от атома водорода называется энергией ионизации и равна  $E_{ion} = |E_1| = 13.6\text{эВ}$ .

Теперь обсудим полученные математические результаты, чтобы понять квантовую структуру атома.

В классической физике атом описывается при помощи планетарной модели, сформулированной Резерфордом в 1913г. Анализируя эксперименты по бомбардировке тонких пленок металлов  $\alpha$ -частицами, через которые большинство  $\alpha$ -частиц проходит не рассеиваясь, и лишь малая часть (одна частица на 10 тысяч) резко отклоняется на угол более  $90^\circ$ , Резерфорд пришел к выводу о том, что частицы отклоняются за счет одного акта столкновения с атомом и, следовательно в центре атома должно находиться положительно заряженное ядро, заключающее в себе практически всю массу атома.

В полуклассической планетарной модели Бора электрон вращается вокруг ядра, находясь на стационарной орбите подобно планете, вращающейся вокруг Солнца. Энергия электрона на  $n$ -ой орбите  $E_n$  определяется формулой (3.18). Скачкообразный переход электрона с  $n$ -ой орбиты на  $m$ -ую орбиту сопровождается изменением энергии атома на величину

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

Полная энергия в этом процессе сохраняется, поскольку атом либо поглощает квант энергии  $\hbar\omega_{mn}$  ( $E_m > E_n$ ), либо испускает квант энергии  $\hbar\omega_{nm}$  при  $E_n > E_m$ .

А какая квантовая картина атома следует из решения уравнения Шредингера? Вероятность того, что мы обнаружим электрон в квантовом состоянии  $n, l, m$  в точке с координатами  $(r, \theta, \varphi)$  в бесконечно малом объеме  $\sin \theta d\theta d\varphi r^2 dr = dV$  имеет вид

$$w_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) \sin \theta dr d\theta d\varphi = |\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)|^2 \sin \theta d\theta d\varphi r^2 dr.$$

Найдем вероятность с которой можно обнаружить электрон в точке  $r$ , в интервале  $dr$ :

$$dP(r) = \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi w_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = w(r)dr,$$

где плотность вероятности того, что электрон, находящийся в квантовом состоянии  $n, l, m$ , будет обнаружен в точке  $r$ :

$$w(r) = w_{n,l}(r) = |R_{n,l}(r)|^2 r^2, \quad \int_0^{\infty} w_{n,l}(r) dr = 1.$$

Аналогично найдем вероятность обнаружения электрона в окрестности радиус-вектора  $\mathbf{r}$  (луча) с координатами  $(\theta, \varphi)$  в телесном углу  $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ :

$$w_{l,m}(\theta, \varphi) d\Omega = |Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega, \quad \int_{4\pi} d\Omega w_{l,m}(\theta, \varphi) = 1.$$

Из (3.14) следует, что угловая плотность вероятности  $w_{l,m}(\theta, \varphi) = w_{l,m}(\theta)$  не зависит от угла  $\varphi$ .

Рассмотрим сначала самое низкое (основное) квантовое состояние с квантовыми числами  $n = 1, l = 0, m = 0$  (состояние с  $l = 0$  называется  $s$ -состоянием). Волновая функция

$$\begin{aligned} \psi_{100} &= R_{10}(r) \Theta_{00}(\theta) \Phi_0(\varphi), \\ R_{10}(r) &= 2a_0^{-3/2} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right). \end{aligned}$$

На рис.3.4 (слева) представлены графики радиальной плотности вероятности для основного состояния:

$$w_{10}(r) = |R_{10}(r)|^2 r^2 \quad (3.23)$$

и первого возбужденного состояния с  $n = 1, l = 0, m = 0$ :

$$w_{20}(r) = |R_{20}(r)|^2 r^2. \quad (3.24)$$

Угловая плотность вероятности  $w_{00}(\theta, \varphi) = \text{const}$ . Поэтому полная плотность вероятности  $w_{100}(r, \theta, \varphi)$  обладает сферической симметрией. При этом максимум радиальной плотности вероятности в основном состоянии, (3.23) достигается при значении, равном радиусу первой боровской орбиты  $a_0$ .

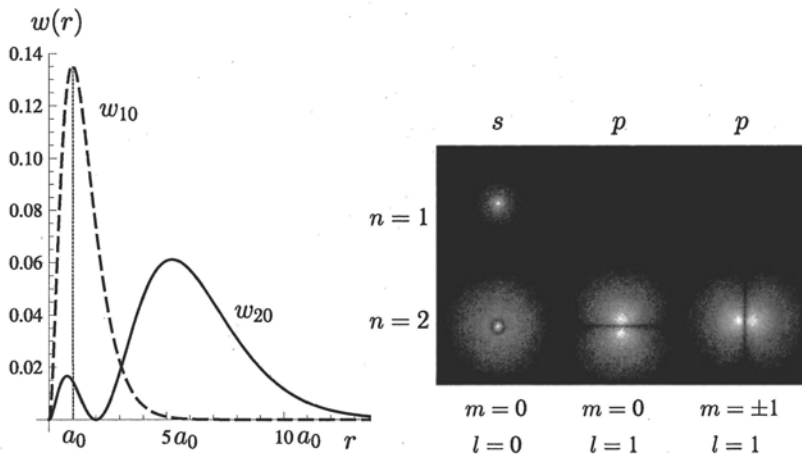


Рис. 3.4. Слева: радиальные плотности вероятности  $w_{10}$  и  $w_{20}$ ,  $a_0$  — радиус Бора. Справа: поперечные сечения плотности вероятности, величина которой отражена цветом (черный цвет соответствует минимальной плотности вероятности, белый — максимальной). Главное квантовое число  $n$  отмечено слева от каждого ряда. Сечение взято в плоскости  $xz$ ,  $z$  — вертикальная ось

Электрон в состоянии  $n = 1$ ,  $l = 0$ ,  $m = 0$ , таким образом, может быть обнаружен где угодно в пространстве, но с наибольшей вероятностью на поверхности сферы радиусом  $a_0$ . Вероятность его обнаружения также велика в шаровом слое с толщиной, определяемой шириной максимума радиальной функции (рис. 3.4). Для качественного представления такой квантовой картины атома вводится термин электронная оболочка, в которой сосредоточена плотность вероятности (в отличие от электронной орбиты в полуклассической теории Бора). Таким образом, в  $s$ -состоянии электронная оболочка имеет вид шарового слоя.

Рассмотрим теперь первое возбужденное состояние с  $n = 2$ ,  $l = 1$ ,  $m = 0, \pm 1$ , состояние с  $l = 1$  называется  $p$ -состоянием: для него с учетом (3.13), имеем

$$\begin{aligned} w_{1,0}(\theta) &= \Theta_{1,0}^2 = \frac{3}{4\pi} \cos^2 \theta, \\ w_{1,\pm 1}(\theta) &= \Theta_{1,\pm 1}^2 = \frac{3}{4\pi} \sin^2 \theta. \end{aligned} \quad (3.25)$$

В  $p$ -состоянии оболочка  $m = 0$  имеет вид гантели с осью, направленной вдоль оси  $z$  (рис. 3.4). При  $m = \pm 1$  ось гантели параллельна оси  $x$ . С увеличением квантового числа  $n$  и, следовательно, с увеличением числа возможных различных значений  $l$  и  $m$  угловая структура плотности вероятности  $w_{l,m}(\theta, \varphi)$  все больше усложняется (см. [2]). Угловая анизотропия волновых функций  $\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)$  (называемых также атомными орбиталями) проявляется в анизотропии межатомных связей при образовании молекул и кристаллов. Уравнение Шредингера

также применимо к более сложным атомам и молекулам. Однако, в большинстве таких случаев аналитических решений не существует, требуется либо принятие каких-либо упрощающих допущений, либо проведение компьютерных вычислений.

**3.1.1. Приближение двухуровневого атома.** Спектр атома водорода неэквидистантный. Расстояние между уровнями убывает с ростом энергии (увеличением квантового числа  $n$ ) как  $n^{-3}$  (см. (3.18)). Неэквидистантность энергетических уровней характерна и для спектров других атомов. Это позволяет выделить из всего спектра два уровня и управлять вероятностью их заселения.

Рассмотрим два уровня с энергиями  $E_1$  и  $E_2 > E_1$ , соответствующие собственные волновые функции  $\varphi_1(\mathbf{r})$  и  $\varphi_2(\mathbf{r})$ . В качестве  $E_1$  можно рассмотреть энергию основного состояния. Частота перехода  $\omega_{21} = (E_2 - E_1)/\hbar$ , вследствие неэквидистантности уровней энергии, отличается от других частот переходов  $\omega_{nm}$ . Поэтому действием импульсов резонансного электромагнитного поля с частотой  $\omega = \omega_{21}$  можно вызывать переходы атома лишь между уровнями  $E_1$  и  $E_2$ , и создавать суперпозиционные состояния  $\psi(\mathbf{r}, t) = a(t)\varphi_1(\mathbf{r}) + b(t)\varphi_2(\mathbf{r})$ , где можно полагать  $|a(t)|^2 + |b(t)|^2 = 1$ . Все остальные уровни и атомные переходы в этом соотношении полностью игнорируются. Такая модель называется моделью двухуровневого атома. Эта простая и эффективная модель используется для описания квантовых битов и атомов рабочей среды лазеров (см. главы 7, 8).

## 3.2. Квантовый гармонический осциллятор

Прототипом классического одномерного гармонического осциллятора является шарик массы  $m$  на пружинке, конец которой закреплен. Шарик совершает гармонические, с частотой  $\omega_0$ , колебания вдоль одной оси. Большое число физических систем приближенно описывается уравнением гармонического осциллятора. Всегда, когда изучается поведение колебательной физической системы в малой окрестности ее устойчивого положения равновесия, мы получаем уравнение гармонических колебаний. Примерами являются относительные колебания атомов в двухатомных молекулах и смещения атомов от своих положений равновесия в кристаллической решетке. Кроме этого, энергия электромагнитного поля в резонаторе может быть представлена в виде суммы энергий гармонических осцилляторов.

Пусть шарик совершает колебания вдоль оси  $x$ . Его потенциальная энергия  $U(x) = m\omega_0^2 x^2/2$ , где  $m$  — масса шарика,  $x$  — смещение. Если система (молекула) состоит из двух частиц (атомов) с массами  $m_1$ ,  $m_2$ , соединенных упругой связью («пружиной»), то  $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$  — приведенная масса, а  $x$  — относительная координата.

Стационарное уравнение Шредингера для одномерного гармонического осциллятора записывается в виде

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} \right) \varphi(x) = E\varphi(x). \quad (3.26)$$

Удобно перейти к безразмерным переменным:

$$z = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} x, \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega_0}. \quad (3.27)$$

Тогда уравнение Шредингера (3.26) перепишется в виде

$$\left( -\frac{d^2}{dz^2} + z^2 \right) \psi = 2\varepsilon\psi. \quad (3.28)$$

Частным решением уравнения (3.28) является собственная функция  $\psi_0 = \exp(-z^2/2)$ , при собственном значении  $\varepsilon = 1/2$ , т.е. при  $E = E_0 = \hbar\omega_0/2$ .

Полное решение ищется в виде

$$\psi(z) = \exp(-z^2/2)f(z). \quad (3.29)$$

Подставляя (3.29) в (3.28), получаем уравнение для  $f$ :

$$\frac{d^2 f}{dz^2} - 2z \frac{df}{dz} - f = -2\varepsilon f. \quad (3.30)$$

При  $2\varepsilon - 1 = 2n$ , где  $n$  — целое положительное число (включая ноль), уравнение (3.30) совпадает с уравнением Чебышева, решением которого являются полиномы Чебышева-Эрмита:

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2}.$$

Таким образом, полное решение уравнения Шредингера (3.28) имеет вид

$$\psi_n(z) = \exp(-z^2/2) H_n(z), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.31)$$

Соответствующие собственные значения энергии

$$E_n = \hbar\omega_0 \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (3.32)$$

Спектр квантового гармонического осциллятора эквидистантный с расстоянием между уровнями  $\hbar\omega_0$ .

Отметим, что при  $n = 0$  энергия  $E_0 = \hbar\omega_0/2 > 0$ . Эта, так называемая энергия нулевых колебаний обусловлена тем, что в состоянии с определенным  $n$  (т.е. в состоянии с определенной энергией) поло-

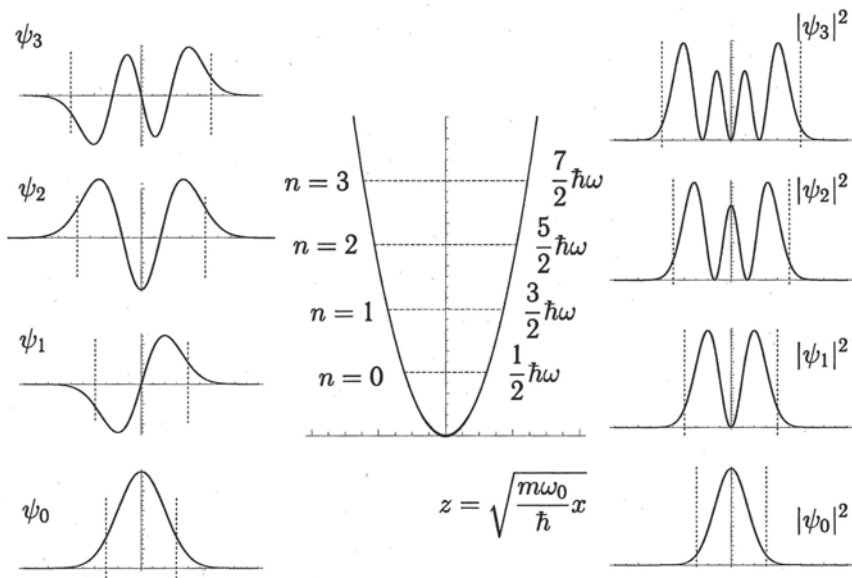


Рис. 3.5. Волновые функции  $\psi_n(x)$  (слева) и плотности вероятности  $|\psi_n(x)|^2$  (справа),  $n = 0, 1, 2, 3$  для частицы в параболической потенциальной яме (центр). Горизонтальные прямые обозначают соответствующие энергетические уровни. Вертикальные пунктирные линии показывают границы классически недоступной области

жение частицы  $x$  не может быть определено точно, поскольку  $x$  не коммутирует с гамильтонианом. Поэтому, в отличие от классического осциллятора, который в состоянии покоя с  $x = 0$  имеет нулевую полную энергию, квантовый осциллятор в нижнем энергетическом состоянии  $n = 0$ , описываемом гауссовской волновой функцией  $\psi_0(x)$  (формула (3.31) при  $n = 0$ ), имеет конечную энергию  $E_0$ .

Четыре первых (не нормированных) собственных функции (3.31) имеют вид

$$\begin{aligned} \psi_0 &= e^{-z^2/2}, & \psi_1 &= 2ze^{-z^2/2}, \\ \psi_2 &= (4z^2 - 2)e^{-z^2/2}, & \psi_3 &= (8z^3 - 12z)e^{-z^2/2}. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Графики этих собственных функций  $\psi_n(x)$  и соответствующих плотностей вероятности  $|\psi_n(x)|^2$  показаны на рис. 3.5. Собственные функции с четными  $n$  — четные (симметричны):  $\psi_{2n}(-z) = \psi_{2n}(z)$ , а с нечетными  $n$  — нечетны (антисимметричны):  $\psi_{2n+1}(-z) = -\psi_{2n+1}(z)$ .

Классический осциллятор с заданной энергией  $E$  имеет две точки поворота  $x_1 = (2E/m\omega_0^2)^{1/2}$  и  $x_2 = -x_1$ , в которых полная энергия  $E$  сравнивается с потенциальной энергией  $U(x)$  (на рис. 3.5 положения точек поворота обозначено вертикальными штриховыми линиями). Плотность вероятности  $|\psi_n(x)|^2$ , однако, не равна нулю в классиче-

ски недоступной области, где потенциальная энергия больше полной энергии. Осциллятор туннелирует в классически недоступную область, где плотность вероятности экспоненциально затухает, аналогично поведению плотности вероятности для частицы в потенциальной яме конечной глубины (см. п. 2.3.2).

Сравним квантовые плотности вероятности  $|\psi_n(x)|^2$ , рис. 3.5, с классической плотностью вероятности  $w_{\text{кл}}(x)$  найти частицу в точке  $x$ . Классический осциллятор совершает гармонические колебания по закону  $x(t) = a \sin(\omega_0 t)$ , где амплитуда  $a = (2E/m\omega_0^2)^{1/2}$ . Скорость частицы  $v(t) = a\omega_0 \cos(\omega_0 t) = a\omega_0 (1 - (x(t)^2/a^2))^{1/2}$ . Классическая вероятность найти частицу в точке  $x$  в интервале  $dx$  пропорциональна интервалу времени  $dt$  пребывания частицы в интервале  $dx$ :

$$w_{\text{кл}}(x)dx = \frac{dt}{T} = \frac{\omega_0 dx}{2\pi v} = \frac{dx}{2\pi a (1 - (x^2/a^2))^{1/2}}, \quad (3.34)$$

где  $T$  — период колебаний,  $x$  находится внутри классически доступной области:  $-a \leq x \leq +a$  (рис. 3.5).

Классическая плотность вероятности  $w_{\text{кл}}(x)$  максимальна в точках поворота  $x_{1,2} = \pm a$ . Из рис. 3.5 видно, что для низшего состояния  $n=0$ , предсказание классической теории качественно иное, чем квантовой: максимум  $|\psi_n(x)|^2$  достигается при  $x=0$ . Однако, с увеличением квантового числа  $n$ , два абсолютных максимума квантовой плотности вероятности становятся все ближе и ближе к точкам поворота, а их величина возрастает. Это поведение соответствует общему для квантовых систем правилу: в пределе больших энергетических квантовых чисел  $n$  (т.е. в пределе больших энергий) квантовые системы ведут себя классическим образом.

## Глава 4

# ДВИЖЕНИЕ ЭЛЕКТРОНА В ПЕРИОДИЧЕСКОМ ПОТЕНЦИАЛЕ. ЗОННЫЙ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР. МЕТАЛЛЫ, ПОЛУПРОВОДНИКИ И ДИЭЛЕКТРИКИ. НИЗКОРАЗМЕРНЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ

В потенциальной яме микрочастица (электрон) имеет дискретный энергетический спектр (Глава 3). Повторяя периодически в пространстве потенциальную яму, мы приходим к модели периодического потенциала.

Важнейшим примером движения микрочастицы в периодическом потенциале является движение электрона в кристалле, в котором атомы (ионы) образуют периодическую кристаллическую решетку. Электроны внешних оболочек атомов обобществляются и образуют электронный газ.

Как мы увидим, энергетический спектр электрона, движущегося в периодическом потенциале — зонный. Особенности зонного спектра объясняются различия в свойствах диэлектриков, полупроводников и металлов. Зонный спектр позволяет реализовывать полупроводниковый транзистор, который производит логические операции в классическом компьютере, а также выполняет функции ячейки памяти (бита) при выполнении вычислений.

### 4.1. Движение частицы в периодическом потенциале

**4.1.1. Кристаллическая решетка.** Кристалл образуется из элементарных ячеек. В самой простой — кубической ячейке атомы расположены в вершинах куба. В общем случае это параллелепипед со сторонами  $a_x$ ,  $a_y$ ,  $a_z$ . В случае куба, длины сторон равны друг другу:  $a_x = a_y = a_z = a$ .

Введем вектор трансляции  $\mathbf{l}$ :

$$\mathbf{l} = l_x \mathbf{a}_x + l_y \mathbf{a}_y + l_z \mathbf{a}_z \quad (4.1)$$

где  $\mathbf{a}_x$ ,  $\mathbf{a}_y$  и  $\mathbf{a}_z$  — векторы, направленные вдоль осей  $x$ ,  $y$  и  $z$ , длины которых равны  $a_x$ ,  $a_y$ ,  $a_z$  (рис. 4.1),  $l_i$  — целые числа, принимающие как положительные, так и отрицательные значения. Помещая атомы

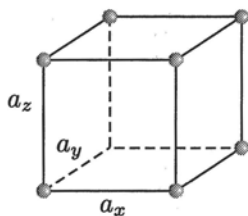


Рис. 4.1. Элементарная кристаллическая ячейка с размерами  $a_x$ ,  $a_y$ ,  $a_z$

в узлы с  $l_i = 1$ , а затем транслируя элементарную ячейку на векторы  $\mathbf{l}$ , построим кристалл. Если у нас есть такая решетка, построенная с помощью трансляции элементарной ячейки, то для нее можно ввести вектор обратной решетки  $\mathbf{g}$ :

$$\mathbf{g} = n_x \frac{2\pi}{a_x} \mathbf{x} + n_y \frac{2\pi}{a_y} \mathbf{y} + n_z \frac{2\pi}{a_z} \mathbf{z}, \quad (4.2)$$

$\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{y}$ ,  $\mathbf{z}$  — единичные орты,  $n_x$ ,  $n_y$ ,  $n_z$  — целые числа, принимающие как положительные, так и отрицательные значения. Вектор трансляции и вектор обратной решетки обладают важным совместным свойством. Их скалярное произведение

$$\mathbf{g} \cdot \mathbf{l} = 2\pi l_x n_x + 2\pi l_y n_y + 2\pi l_z n_z = 2\pi m, \quad (4.3)$$

где  $m$  — целое число. Поэтому

$$e^{i\mathbf{g}\mathbf{l}} = e^{i2\pi m} = 1. \quad (4.4)$$

Эта формула, будет использоваться при описании движения электрона в периодической решетке.

В кристаллической решетке, таким образом, атомы (ионы) расположены периодически с периодом  $\mathbf{l}$ . Они создают соответствующий периодический потенциал, так что потенциальная энергия электрона также периодична с периодом  $\mathbf{l}$ :

$$U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{l}). \quad (4.5)$$

Это обстоятельство играет первостепенную роль в физике кристаллического состояния: электроны движутся в *периодическом потенциале*, создаваемом ионами. Какой он и как его найти — это отдельные вопросы. Для нас сейчас это не важно, в нашем рассмотрении мы будем использовать лишь сам факт периодичности этого потенциала.

Для анализа уравнения Шредингера электрона, движущегося в периодическом потенциале, мы будем использовать аппарат преобразования Фурье периодических функций.

Периодическую функцию  $f(\mathbf{r} + \mathbf{l}) = f(\mathbf{r})$  можно разложить в ряд Фурье:

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} f_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}} \quad (4.6)$$

— функция с периодом  $\mathbf{l}$ , ее разложение в ряд Фурье содержит только вектора обратной решетки,  $f_{\mathbf{g}}$  — Фурье-компонента. Свойство скалярного произведения  $\mathbf{g} \cdot \mathbf{l}$  (4.3) как раз и обеспечивает выполнение условия периодичности  $f(\mathbf{r})$ . Если в этой функции произвести трансляцию на вектор  $\mathbf{l}$ , то, используя преобразование Фурье, получаем:

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{l}) = \sum_{\mathbf{g}} f_{\mathbf{g}} e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}} \underbrace{(e^{i\mathbf{g}\mathbf{l}})}_{1} = f(\mathbf{r}). \quad (4.7)$$

Фурье-образ  $f_{\mathbf{g}}$  находится интегрированием по объему элементарной ячейки  $\nu$ , это следует из теории рядов Фурье:

$$f_{\mathbf{g}} = \int_{\nu} f(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{g}\mathbf{r}} d\mathbf{r}. \quad (4.8)$$

**4.1.2. Уравнение Шредингера для электрона в периодическом потенциале. Блоховская волновая функция.** Приступим к записи и анализу стационарного уравнения Шредингера для волновой функции  $\psi(\mathbf{r})$  электрона в периодическом потенциале.

Рассмотрим для простоты одномерный случай,  $\psi(\mathbf{r}) = \psi(x)$ , и соответственно

$$U(x + l) = U(x). \quad (4.9)$$

Далее запишем гамильтониан электрона в периодическом потенциале:

$$H_{\text{эл}}(x) = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} + U(x), \quad (4.10)$$

где  $m_e$  — масса свободного электрона. Соответственно, уравнение Шредингера будет иметь вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + U(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (4.11)$$

Проанализируем его качественно. Используем периодичность потенциала (10). Это первый шаг. Отсюда сразу следует, что

$$U(x) = \sum_g U_g e^{igx}, \quad (4.12)$$

Представим функцию  $\psi$  в виде волнового пакета, не конкретизируя пока какие волновые числа (векторы)  $k$  могут фигурировать в нем:

$$\psi(x) = \sum_k C(k) e^{ikx}. \quad (4.13)$$

Функция  $\psi$  относится к большому объему, поэтому результаты не должны зависеть от вида граничных условий и можно использовать удобное граничное условие — периодическое.

Ставим периодические условия (так называемые условия Борна–Кармана) на границах:  $\psi(x=0) = \psi(L)$  и тогда функция  $\psi$  — периодическая с периодом, равным размеру кристалла  $L$  (но она, в отличие от потенциала, не является периодической с периодом, равным вектору трансляции!). Подставим эти разложения  $\psi$  и  $U(x)$  в уравнение Шредингера, умножим уравнение почленно на  $e^{-ikx}$ :

$$e^{-ikx} \left( \sum_{k'} \frac{\hbar^2 (k')^2}{2m_e} C(k') e^{ik'x} + \sum_{k'} \sum_g U_g C(k') e^{ik'x+igx} \right) = \varepsilon \sum_{k'} C(k') e^{ik'x} \quad (4.14)$$

и проинтегрируем по объему элементарной ячейки  $v$ .

Получим уравнение Шредингера в следующем виде:

$$\left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} - \varepsilon \right) C(k) + \sum_g U_g C(k-g) = 0. \quad (4.15)$$

Уравнение (4.15) можно трактовать так. Имеется волна с волновым числом  $k$ . Она испытывает дифракцию на множестве дифракционных решеток с векторами решетки  $g$ . Уравнение (4.15) показывает, что если первоначально есть волна с заданным  $k$ , то в результате дифракции появляются волны с волновыми векторами, сдвинутыми относительно  $k$  на  $g$ . Только такие волны с волновыми числами  $k-g$ , а также исходная волна  $k$  должны фигурировать в волновом пакете (4.13). Таким образом, волновой пакет электрона в кристалле имеет вид:

$$\psi_k = \sum_g C(k-g) e^{-igx} e^{ikx} = A_k(x) e^{ikx} \quad (4.16)$$

(суммирование включает значения  $g=0$ ,  $g>0$  и  $g<0$ ), где амплитуда волны

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

Легко доказать, что амплитуда периодична в пространстве с периодом, равным вектору трансляции:

$$A_k(x) = A_k(x+l). \quad (4.17)$$

Кроме этого, амплитуда периодична в  $k$ -пространстве:  $U_{k\pm g}(x) = A_k(x)$ .

Результат, который мы получили качественно: стационарное состояние электрона в периодической решетке описывается волновой функцией, которая является плоской волной с амплитудой, модулированной в пространстве с периодом, равным периоду решетки. Это утверждение составляет суть теоремы Блоха, а функция (4.16) называется функцией Блоха. Физическая суть нашего рассуждения: мы рассматриваем движение  $k$ -ого электрона в кристалле, происходит дифракция, уравнение Шредингера утверждает, что такая падающая волна при распространении в периодической решетке превращается в пакет волн с волновыми векторами, сдвинутыми по отношению к вектору падающей волны на вектора обратной решетки (рис. 4.2).

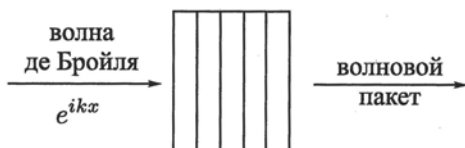


Рис. 4.2. Образование волнового пакета благодаря дифракции плоской волны на периодической структуре

Это означает, что волновой пакет, который мы задали формально в (4.13), имеет структуру (4.16): в нем содержится исходная волна  $e^{ikx}$  ( $g = 0$ ) и целая совокупность дифрагированных волн с волновыми векторами, сдвинутыми по отношению к исходному вектору  $\mathbf{k}$  на вектора обратной решетки.

Можно строго показать, что функция Блоха (4.16) действительно является решением уравнения Шредингера (4.11). Электрон в кристалле, таким образом, не рассеивается на периодическом потенциале, не меняет своего состояния, стационарно существует с волновой функцией  $\psi_{\mathbf{k}}$  — функцией Блоха. Отметим, что если электрон находится в состоянии  $\psi_{\mathbf{k}}$ , то величина  $\hbar\mathbf{k}$  не является собственным значением оператора импульса, поэтому  $\hbar\mathbf{k}$  не является импульсом электрона в кристалле. Но поскольку  $\hbar\mathbf{k}$  входит в законы сохранения при рассеянии электронов на колебаниях решетки, то эту величину называют квазиимпульсом.

## 4.2. Зонная структура энергетического спектра электрона. Приближение почти свободных электронов и приближение сильной связи

Определение энергетического спектра электрона в кристалле — важнейшая проблема физики твердого тела. Создание таких квантовых приборов как полупроводниковые транзистор и лазер было бы невозможным без понимания строения энергетического спектра электрона

в кристалле. Существуют два основных подхода к определению электронного энергетического спектра в кристаллах — это приближение почти свободных электронов и приближение сильной связи. Рассмотрим отдельно каждый из них.

**4.2.1. Зонный энергетический спектр в приближении почти свободных электронов.** Мы исходим из модели свободного электронного газа и смотрим, как изменяется волновая функция и спектр энергии электрона при помещении его в периодический потенциал, создаваемый ионной решеткой кристалла (рис. 4.3). Определяющую роль в этих изменениях играет дифракция свободного электрона на периодической решетке ионов. Фактически, в этом приближении мы и рассматривали уравнение Шредингера, потому что мы задавали волновую функцию электрона как пакет плоских волн. Мы нашли, что волновая функция электрона в периодическом потенциале задается функцией Блоха  $\psi_k = A_k(x)e^{ikx}$ , где амплитуда  $A_k(x)$  периодична с периодом решетки. Посмотрим теперь, как изменяется спектр энергии электрона при помещении его в периодический потенциал.

Если электрон свободен (но находится в «ящике» размера  $L$ ), то его энергетический спектр определяется соотношением  $E_k = \hbar^2 k^2 / 2m_e$ .

График представляет собой параболу (рис. 4.4), волновой вектор  $k$  квантован вследствие периодических граничных условий. Размер ячейки квантования  $2\pi/L$ , где  $L$  — размер кристалла. Каждому значению  $k$  соответствует энергетический уровень. Переходя к модели почти свободных электронов, мы вводим в ящик слабый периодический потенциал ионов. Можно ожидать, что при этом сохраняется параболическая зависимость, слабо возмущенная периодическим потенциалом, и записать:

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} \quad (4.18)$$

Вследствие взаимодействия с решеткой масса свободного электрона заменяется эффективной массой  $m_e^*$ . Но так обстоит дело лишь в области, где  $k$  достаточно мало и длина волны электрона  $2\pi/k$  много больше периода решетки.

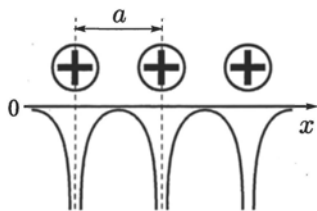


Рис. 4.3. Ионная решетка в кристалле.  $a$  — период кристаллической решетки. Внизу зависимость отрицательной кулоновской энергии взаимодействия электрона с ионной решеткой  $U(x)$  от координаты (0 — обозначает нулевую энергию)

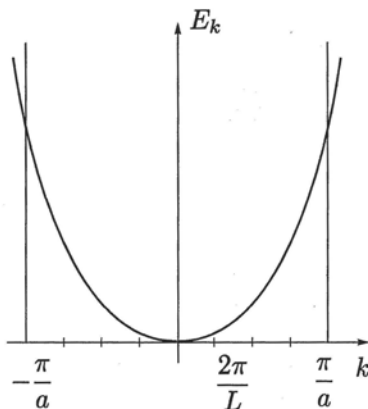


Рис. 4.4. Параболическая зависимость энергии электрона  $E_k$  от волнового числа  $k$ . В точках  $-\pi/a$  и  $\pi/a$  она должна сильно искажаться благодаря дифракционным эффектам (ср. рис. 4.6)

Если мы перейдем к достаточно большим значениям  $k$  (когда длина волны приближается к периоду решетки), то дифракционные эффекты очень сильно изменяют дисперсионную зависимость.

Проанализируем качественно, что при этом происходит. В этом анализе будем пренебрегать зависимостью амплитуды функции Блоха от координаты и считать, что волновая функция электрона — приближенно плоская волна:  $\psi_k = Ae^{ikx}$ . Она описывает электрон, движущийся в кристалле в положительном направлении оси  $x$ . Перейдем в точку на оси  $k$ , в которой  $k = \pi/a$ , где  $a$  — это период кристаллической решетки. Здесь происходит эффективное рассеяние (дифракция) волны на периодической структуре. Волны, рассеянные на периодической решетке, конструктивно интерферируют друг с другом и дают рассеянную назад волну. Условия конструктивной интерференции задаются условиями Брэгга. Получим их для рассматриваемого случая. На одномерную решетку с периодом  $a$  падает плоская волна, она частично отражается от атомной плоскости, что дает обратную волну 1, частично проходит дальше и отражается от второй плоскости (отраженная волна 2). Волна 1 и волна 2 интерферируют друг с другом (рис. 4.5).

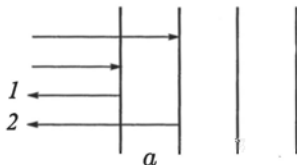


Рис. 4.5. Отражение электронной волны от атомных плоскостей. Разность хода между отраженными волнами 1 и 2 равна  $2a$

Условие их конструктивной интерференции заключается в том, что разность хода  $2a$  равняется целому числу волн:

$$2a = m\lambda, \quad (4.19)$$

где  $m$  — целые (положительные и отрицательные) числа. Отсюда получаем, что отраженная назад волна будет возникать в точках

$$k_m = \frac{\pi}{a}m. \quad (4.20)$$

Мы будем проводить дальнейшие рассуждения для точек на положительной полуоси  $k$ , но то же самое будет и происходить в точках, лежащих симметрично относительно  $k = 0$  на отрицательной полуоси. При  $m = 1$  получается первая такая точка:  $k_1 = g_1/2 = \pi/a$ . При этом значении  $k$  будет происходить конструктивная интерференция отраженных волн, и возникнет обратная волна. Эта точка называется границей первой зоны Бриллюэна. Вторая граница этой зоны лежит в точке  $-g_1/2 = -\pi/a$ . Зона Бриллюэна, следовательно, имеет ширину, равную вектору обратной решетки  $g_1 = 2\pi/a$ . Таким образом, в волновом пакете

$$\psi_k = \sum_g (C(k-g)e^{-igx})e^{ikx} \quad (4.21)$$

на границе зоны Бриллюэна ( $k = g_1/2$ ) есть падающая волна с  $g = 0$ :

$$C\left(\frac{g_1}{2}\right)e^{i\frac{g_1}{2}x}, \quad (4.22)$$

и есть отраженная волна с  $g = g_1$

$$C(k-g_1)e^{-i\frac{g_1}{2}x} = C\left(-\frac{g_1}{2}\right)e^{-i\frac{g_1}{2}x}. \quad (4.23)$$

Можно показать, что амплитуды этих двух волн много больше амплитуд остальных волн в волновом пакете (4.21). Тогда из уравнения Шредингера, (4.15), на границе первой зоны Бриллюэна,  $k = g_1/2 = \pi/a$ , следует однородная система двух алгебраических уравнений для амплитуды падающей волны  $C(g_1/2)$  и амплитуды отраженной волны  $C(-g_1/2)$ :

$$\begin{aligned} (E_{g_1/2}^0 - E)C(g_1/2) + U_{g_1}C(-g_1/2) &= 0, \\ U_{-g_1}C(g_1/2) + (E_{-g_1/2}^0 - E)C(-g_1/2) &= 0, \end{aligned} \quad (4.24)$$

где  $E_k^0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} = E_{-k}^0$  (важно отметить, что  $m_e$  — масса свободного электрона). Из равенства нулю детерминанта системы (4.24) получаем уравнение, решение которого дает:

$$E_{\pm}\left(\frac{g_1}{2}\right) = E_{g_1/2}^0 \pm |U_{g_1}|. \quad (4.25)$$

Таким образом, электрон с волновым вектором  $k = g_1/2$  (на границе зоны Бриллюэна) имеет два значения энергии. Эти значения лежат симметрично выше ( $E_+$ ) и ниже ( $E_-$ ) энергии свободного электрона  $E_{g_1/2}^0$  с волновым вектором  $k = g_1/2$ . В точке  $k = -g_1/2$ , на другой границе зоны Бриллюэна, происходит то же самое.

Кривая зависимости энергии от волнового вектора  $k$  почти свободного электрона, движущегося в периодической ионной решетке, изображена на рис. 4.6. Кривая дисперсии становится плоской вблизи границы и в ней появляется разрыв на границе зоны Бриллюэна. Появляется зона запрещенных энергий (или просто запрещенная зона). Ширина запрещенной зоны в данной модели, как следует из (4.25), равна  $E_g = 2|U_{g_1}|$ .

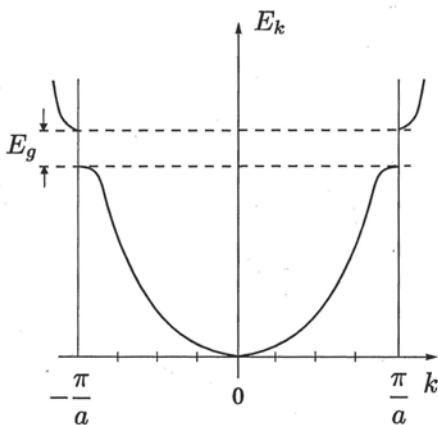


Рис. 4.6. Зависимость энергии от волнового вектора  $k$  почти свободного электрона, движущегося в периодической ионной решетке

Точно на границе зоны Бриллюэна падающая и отраженная волна имеют одну и ту же по величине амплитуду. Общее решение уравнения Шредингера здесь задается суперпозицией прямой и отраженных волн:

$$\begin{aligned}\psi_-(x) &= C \left(\frac{g_1}{2}\right)^- e^{i\frac{g_1}{2}x} + C \left(\frac{-g_1}{2}\right)^- e^{-i\frac{g_1}{2}x}, \\ \psi_+(x) &= C \left(\frac{g_1}{2}\right)^+ e^{i\frac{g_1}{2}x} + C \left(\frac{-g_1}{2}\right)^+ e^{-i\frac{g_1}{2}x}.\end{aligned}\quad (4.26)$$

Отношения коэффициентов находятся из соотношений

$$\frac{C(g_1/2)^-}{C(-g_1/2)^-} = -\frac{U_{g_1}}{|U_{g_1}|} = +1, \quad \frac{C(g_1/2)^+}{C(-g_1/2)^+} = \frac{|U_{g_1}|}{U_{-g_1}} = -1, \quad (4.27)$$

следующих из (4.24) и (4.25). При записи (4.27) использовано то, что фурье-компонента действительной и четной функции  $U(x)$  (рис. 4.3)

обладает свойством  $U_{g_1} = U_{g_1}^* = U_{-g_1}$ . Кроме того для  $U < 0$  имеем  $U_{g_1} < 0$ .

В результате, получаются две стоячие волны, причем знаку « $\leftarrow$ » соответствует косинус, а знаку « $\rightarrow$ » — синус:

$$\begin{aligned}\psi_-(x) &= C \left( e^{i\frac{g_1}{2}x} + e^{-i\frac{g_1}{2}x} \right) = 2C \cos \frac{\pi}{a}x, \\ \psi_+(x) &= C \left( e^{i\frac{g_1}{2}x} - e^{-i\frac{g_1}{2}x} \right) = 2iC \sin \frac{\pi}{a}x.\end{aligned}\quad (4.28)$$

И теперь понятно, почему имеются два значения энергии на границе зоны Бриллюэна. Имеется периодический ряд положительно заряженных ионов с периодом  $a$ , и плотность величины электронного заряда  $|e|\psi_-(x)|^2$  имеет максимумы в точках расположения ионов (см рис. 4.7), а  $|e|\psi_+(x)|^2$  имеет максимумы посередине между ядрами.

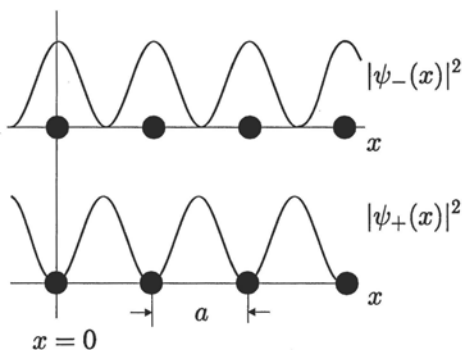


Рис. 4.7. Периодический ряд ионов с периодом  $a$ . Среднее расстояние электрона от иона в состоянии  $\psi_-$  меньше, чем в состоянии  $\psi_+$

Средняя потенциальная энергия электрон-ионного кулоновского взаимодействия будет меньше для состояния  $|\psi_-(x)|^2$  и, благодаря этому, полная энергия в состоянии  $(-)$  лежит ниже энергии  $(+)$ . Итак, из-за того, что на границе зоны Бриллюэна имеются две собственные функции оператора Гамильтона с двумя различными собственными значениями энергии получается расщепление спектра — зонная картина.

Аналогичное расщепление зон и появление запрещенных зон происходит и в точках  $\pm\frac{2\pi}{a}, \pm\frac{3\pi}{a}, \dots$  на оси  $k$ . В результате, получается много зон разрешенных энергий, отделенных друг от друга запрещенными зонами.

Это так называемая схема расширенных зон. А есть еще одна, более часто употребляемая картина — так называемая схема приведенных зон. Она основана на том, что волновая функция Блоха обладает сле-

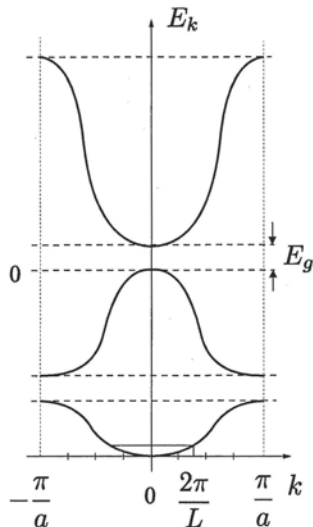


Рис. 4.8. Схема приведенных зон.  $E_g$  — ширина запрещенной зоны

дующим свойством: если сдвинуть  $k$  на целое число векторов обратной решетки, то волновая функция не меняется:

$$\psi_k(x) = \psi_{k \pm g}(x). \quad (4.29)$$

Если волновая функция инвариантна при таком сдвиге, то и спектр энергии тоже должен быть инвариантен. Поэтому мы можем сдвигать спектр вдоль оси  $k$  на любой вектор обратной решетки  $g$ , используя то, что вектор  $k$  определен с точностью до произвольного вектора обратной решетки. Эта схема называется схемой приведенных зон. В ней все ветви спектра приводятся к первой зоне Бриллюэна (рис. 4.8).

**4.2.2. Зонный энергетический спектр в приближении сильной связи. Образование энергетических зон из атомных уровней.** Приближение почти свободных электронов описывает валентные электроны, т.е. наиболее слабо связанные с ядром электроны внешних электронных оболочек атома. При образовании кристалла они обобществляются и образуют электронный газ, на который ионы оказывают периодическое в пространстве воздействие. Оно рассматривалось в п. 4.2 как некое возмущение. Этот метод не работает для электронов, находящихся на более близких к ядру электронных оболочках (электронов, сильно связанных с ядром).

Для того, чтобы рассчитать энергетический спектр для электронов из глубоких оболочек используется приближение сильной связи, в котором в качестве исходных функций, из которых строится функция Блоха, используются атомные волновые функции. Ранее теорему Блоха мы получили, исходя из приближения почти свободных электронов, но

на самом деле она не связана с применимостью этого приближения. Ее можно в общем виде сформулировать так. В периодическом потенциале волновая функция, при сдвиге на вектор трансляции  $\mathbf{l}$ , должна меняться следующим образом:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{l}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{l}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (4.30)$$

Условие (4.30) должно налагаться на любую волновую функцию электрона в кристалле.

Итак, мы попробуем построить блоховскую волновую функцию, удовлетворяющую условию (4.30), используя атомные волновые функции. Исходя из общего положения о том, что электроны обобществляются при сближении атомов, мы записываем волновую функцию для электрона в кристалле в виде суперпозиции атомных волновых функций, каждая из которых центрирована в точке расположения атома:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_i} \varphi_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \equiv A_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (4.31)$$

где амплитуда  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r})} \varphi_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ ,  $N$  — число атомов в кристалле,  $\mathbf{r}_i$  — радиус-вектор  $i$ -го атома,  $\varphi_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$  — атомная волновая функция, принадлежащая какой-то определенной атомной оболочке. Амплитуда  $A_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  в (4.31) периодична по  $\mathbf{r}$  с периодом, равным вектору трансляции  $\mathbf{l}$ , и периодична по  $\mathbf{k}$  с периодом, равным вектору трансляции  $\mathbf{g}$ , (4.2). Функция  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ , (4.31), удовлетворяет условию теоремы Блоха (4.30).

Энергия электрона в состоянии  $\mathbf{k}$  находится по формуле

$$E_{\mathbf{k}} = \langle \psi_{\mathbf{k}}^* | \hat{H} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{ij} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \langle \varphi_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) | \hat{H} | \varphi_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \rangle, \quad (4.32)$$

где  $\hat{H}$  — оператор Гамильтона электрона,  $\psi_{\mathbf{k}}$  — блоховская волновая функция (4.31).

Кристаллы замечательны тем, что они обладают свойством трансляционной инвариантности. Рассмотрим какой-то  $j$ -й атом. Тогда в (4.32) будем иметь сумму по  $i$  относительно этого  $j$ -го атома. Результат суммирования формально зависит от  $j$ . Но, по сути, результат суммирования по  $i$  не должен зависеть от того, какой атом  $j$  мы рассматриваем в качестве начала координат. Чтобы учесть это, сделаем замену:  $\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j = \boldsymbol{\rho}_i$ ,  $\mathbf{r} - \mathbf{r}_j = \mathbf{r}'$ . Матричный элемент в (4.32) тогда переписывается в виде

$$\begin{aligned} \langle \varphi_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) | \hat{H} | \varphi_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \rangle &= \langle \varphi_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) | \hat{H} | \varphi_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j - \boldsymbol{\rho}_i) \rangle \equiv \\ &\equiv \langle \varphi_a(\mathbf{r}') | \hat{H} | \varphi_a(\mathbf{r}' - \boldsymbol{\rho}_i) \rangle. \end{aligned}$$

Результат суммирования по  $i$  не зависит от  $j$ , поэтому в (4.32) суммирование по  $j$  дает  $N$ . Тогда из (4.32) имеем:

$$E_{\mathbf{k}} = \sum_i e^{i\mathbf{k}\rho_i} \langle \varphi_a(\mathbf{r}') | \hat{H} | \varphi_a(\mathbf{r}' - \rho_i) \rangle, \quad (4.33)$$

где  $\rho_i$  — радиус-вектор  $i$ -го атома относительно атома, помещенного в начало координат (реперного атома) с радиусом-вектором  $\rho_0 = 0$ . В (4.33) суммирование по  $i$  включает случай  $i = 0$ .

Рассмотрим сначала этот вклад с  $\rho_0 = 0$ . Экспонента даст единицу, а матричный элемент:

$$\langle \varphi_a(\mathbf{r}) | \hat{H} | \varphi_a(\mathbf{r}) \rangle = E_a = -|E_a|,$$

где  $E_a < 0$  — энергия электрона на атомном уровне (отрицательная энергия соответствует связанному состоянию электрона в атоме).

Теперь рассмотрим ближайших к реперному атому соседей и просуммируем по ним. Запишем соответствующий матричный элемент в (4.33) в общем виде:

$$\int d\mathbf{r}' \langle \varphi_a(\mathbf{r}') | \hat{H} | \varphi_a(\mathbf{r}' - \rho_1) \rangle \equiv -\gamma, \quad (4.34)$$

где  $\rho_1$  — радиус-вектор ближайшего к реперному атому соседа. Интеграл (4.34) — это так называемый интеграл перекрытия. В нем фигурируют атомные волновые функции, центрированные на двух соседних узлах кристаллической решетки. Таким образом, энергия электрона задается выражением:

$$E_{\mathbf{k}} = -|E_a| - \gamma \sum_i e^{i\mathbf{k}\rho_i}, \quad (4.35)$$

где, в принятом нами приближении, сумма берется только по ближайшим соседям. Вид этой суммы зависит от симметрии решетки.

Рассмотрим самый простой случай — кубической, объемно-центрированной решетки. Элементарная ячейка — куб со стороной  $a$ , в его вершинах находятся атомы (рис. 4.1,  $a_x = a_y = a_z = a$ ). Суммирование производится по ближайшим соседям к реперному атому. Радиус-векторы ближайших к нему соседей вдоль оси  $x$ :

$$\rho_1 = \{a, 0, 0\}, \quad -\rho_1 = \{-a, 0, 0\}$$

и еще две аналогичные пары радиус-векторов ближайших соседей вдоль осей  $y$  и  $z$ .

Тогда, производя суммирование в (4.35), с учетом вышесказанного, получаем, для энергии электрона в кристалле:

$$E_{\mathbf{k}} = -|E_a| - 2\gamma(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a). \quad (4.36)$$

Первая зона Бриллюэна будет представлять собой куб с размером ребра  $2\pi/a$  (см. рис. 4.9).

Итак, мы рассчитали матричный элемент оператора энергии электрона в состоянии  $\mathbf{k}$  и нашли закон дисперсии  $E_{\mathbf{k}}$  электрона в трехмерном кубическом кристалле. Вблизи центра зоны Бриллюэна с  $\mathbf{k} = 0$ , в области, где модуль  $\mathbf{k}$  мал, можно разложить косинус в ряд. Вблизи центра зоны Бриллюэна закон дисперсии принимает вид:

$$E_{\mathbf{k}} \approx \text{const} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}, \quad (4.37)$$

где эффективная масса электрона

$$m_e^* = \frac{\hbar^2}{2\gamma a^2} \quad (4.38)$$

обратно пропорциональна интегралу перекрытия  $\gamma$ . Значит, когда интеграл перекрытия велик, то эффективная масса электрона мала и наоборот. Если мы начинаем удалять атомы друг от друга все больше и больше, то интеграл перекрытия  $\gamma$  становится все меньше и меньше. В пределе больших межатомных расстояний, электроны локализируются вблизи атомов — никакого их обобществления не происходит. В этом случае, эффективная масса электрона  $m_e^*$ , определяемая формулой (4.38), становится бесконечно большой ( $\gamma = 0$ ), т.е. подвижность таких электронов становится пренебрежимо малой. Это случай диэлектрика. Наоборот, если сжимать кристалл, увеличивая  $\gamma$  и при этом уменьшая  $m_e^*$ , то можно диэлектрик перевести в металлическое состояние. Например, под давлением порядка 100 килобар полупроводниковый кремний металлизирован. Также известна проблема получения металлического водорода под большим давлением.

Что касается ширины зоны разрешенных энергий, то, в приближении сильной связи, она будет определяться, с точностью до константы, интегралом перекрытия  $\gamma$  (см. рис. 4.9 и (4.39)).

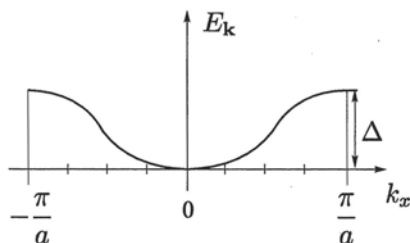


Рис. 4.9. Закон дисперсии для одномерного движения электрона в кристалле вдоль оси  $x$ . По формуле (4.36), где положено  $k_y = k_z = 0$  и за начало отсчета энергии взято значение  $-(|E_a| + 2\gamma)$ . Ширина одномерной зоны  $\Delta = 4\gamma$

В трехмерном случае  $E_{k=0} = -|E_a| - 6\gamma$ ,  $E_{k=\pi/a} = -|E_a| + 6\gamma$  и ширина зоны

$$\Delta = E_{k=\pi/a} - E_{k=0} = 12\gamma \quad (4.39)$$

Таким образом, при разнесении атомов на достаточно большие расстояния ( $\gamma \rightarrow 0$ ,  $\Delta \rightarrow 0$ ), зоны вырождаются в атомные уровни. Если же мы сближаем атомы (интеграл перекрытия  $\gamma$  достаточно велик), то каждый уровень расщепляется в энергетическую зону, причем ширина расщепления тем меньше, чем глубже атомный уровень, поскольку на более глубоких уровнях атомные волновые функции сильнее локализованы, и параметр перекрытия волновых функций  $\gamma$  меньше (рис. 4.10).

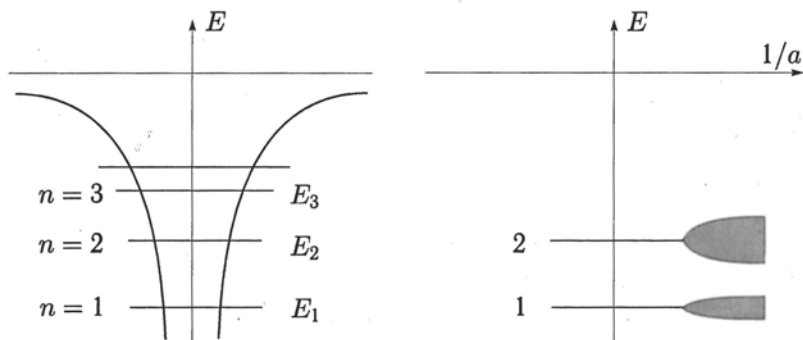


Рис. 4.10. Расщепление атомных энергетических уровней ( $n = 1, n = 2$  и т.д.) в энергетические зоны (1, 2 и т.д.) при уменьшении межатомного расстояния  $a$  в кристалле. Чем ниже лежит атомный уровень, тем уже соответствующая зона

Можно сосчитать число электронных состояний в энергетической зоне в кристалле, состоящем из  $N$  атомов. В кристалле из  $N$  независимых атомов каждый атомный уровень энергии  $N$ -кратно вырожден. Перекрытие атомных волновых функций в соседних узлах кристаллической решетки снимает это вырождение и каждый атомный уровень энергии расщепляется на  $N$  уровней в зоне. Поскольку на каждом уровне могут находиться 2 электрона (со спином вверх и со спином вниз), то полное число разрешенных состояний в зоне, рассчитанной в приближении сильной связи, равно  $2N$ , как и в случае почти свободных электронов.

На этом мы завершаем иллюстративное рассмотрение образования электронного зонного спектра в приближении сильной связи. Более подробное рассмотрение зонной структуры в реальных кристаллах можно найти в книге [9].

### 4.3. Зонная теория и разделение твердых тел на металлы, полупроводники и диэлектрики

Зонная теория объясняет деление твердых тел на три основных класса: диэлектрики, полупроводники и металлы. На самом деле, полупроводники и диэлектрики относятся к одному классу, но отличаются шириной запрещенной зоны. В полупроводниках, ширина запрещенной зоны  $0.1 - 2$  эВ, а в диэлектриках — несколько эВ.

Посмотрим, как зонная теория позволяет провести классификацию твердых тел. Рассмотрим простейший случай кристаллов с одним атомом в элементарной ячейке. Построим основное состояние кристалла, рассматривая кристалл при температуре  $T = 0$ . В кристалле имеется  $N_e$  электронов и, чтобы образовать основное состояние, нужно расположить их по энергетическим уровням в зонах, начиная с нижнего уровня.

Рассмотрим сначала случай нечетной валентности. Простейшим примером является атом Na. У него 11 электронов, один электрон находится на последней оболочке. Валентность равна единице. Когда атомы соединяются в кристалл, образуется ионный остов и электронный газ. Если имеется  $N$  атомов, то в электронном газе будут находиться  $N_e = N$  электронов. В соответствии с принципом Паули в каждом квантовом состоянии может находиться лишь один фермион (частица с полуцелым спином), в частности электрон со спином  $1/2$ . Квантовое состояние определяется заданием квантовых чисел. В рассматриваемом случае одно квантовое состояние характеризуется заданием числа  $k$  и проекции спина на ось  $z$ :  $S_z$ .  $S_z$  принимает два значения  $\pm 1/2$  (см. Главу 7). Таким образом, в состоянии с квантовым числом  $k$  может находиться два электрона. Поэтому число разрешенных состояний в валентной зоне равняется числу разрешенных состояний волнового числа  $k$  в зоне Бриллюэна, умноженному на два. Число разрешенных значений  $k$  в зоне Бриллюэна равно ширине зоны  $2\pi/a$ , поделенному на размер ячейки квантования  $2\pi/L$ :  $\frac{2\pi/a}{2\pi/L} = \frac{L}{a} = N$  — числу атомов, составляющих кристалл (мы рассматриваем одномерный случай). Значит, число разрешенных состояний в зоне Бриллюэна для одновалентного случая равняется  $2N$ , а число электронов, которые надо расположить в этой зоне  $N$  — вдвое меньше. Это означает, что в основном состоянии одновалентного кристалла Na, валентная зона заполнена наполовину.

Теперь учтем, что электроны в не полностью заполненной зоне проводят электрический ток и кристалл с такой зоной является металлом. Напротив, полностью заполненная зона, отделенная запрещенной зоной от зоны разрешенных состояний, не проводит электричество и кристалл с полностью заполненной валентной зоной является диэлектриком (полупроводником).

В случае натрия мы получили наполовину заполненную зону,

так что такая зона проводит электрический ток. Таким образом, натрий является металлом. Это рассуждение можно провести и в случае элементов с любой нечетной валентностью. Получается тот же результат, поскольку последовательно заполняются все зоны с самого низа, а последняя зона опять окажется заполненной наполовину. Итак, при соединении элементов из таблицы Менделеева с нечетной валентностью в кристалл с одним атомом в элементарной ячейке получаются металлы.

Рассмотрим теперь случай четной валентности. В зоне по-прежнему имеется  $2N$  разрешенных состояний, но теперь имеется  $2N$  электронов (валентность 2) и они полностью заполняют зону. Значит, как правило, двухвалентные элементы — диэлектрики. В них имеется полностью заполненная зона, отделенная запрещенной зоной  $E_g$  от пустой зоны (рис. 4.11). Есть исключения, например, кальций. Валентность кальция равна 2, а он является металлом. Но кальций — плохой металл с низкой проводимостью. Это связано с деталями зонной структурой. Зоны могут быть сдвинуты друг относительно друга по оси  $k$ . В кальции зоны сдвинуты и немного перекрываются по энергиям, так что верхняя зона оказывается частично заполненной.

Случай, когда в элементарной ячейке кристалла находится более одного атома, более сложен и связь валентности и класса твердого тела не столь однозначна. Тем не менее, применяя зонную теорию, можно объяснить принадлежность твердого тела к тому или иному классу и в общем случае.

#### 4.4. Низкоразмерные наноструктуры. Квантовая яма, сверхрешетка, квантовая трубка, квантовая точка

До сих пор в этой главе мы рассматривали объемные кристаллы, электронные спектры в которых не зависят от размера кристалла  $L$ . Формально это получается переходом к пределу  $L \rightarrow \infty$ . При этом линейный размер ячейки квантования квазиимпульса электрона  $2\pi L \rightarrow 0$  и спектр энергетических уровней внутри зон становится квазинепрерывным. В пределе  $L \rightarrow \infty$ , плотность электронного и дырочного

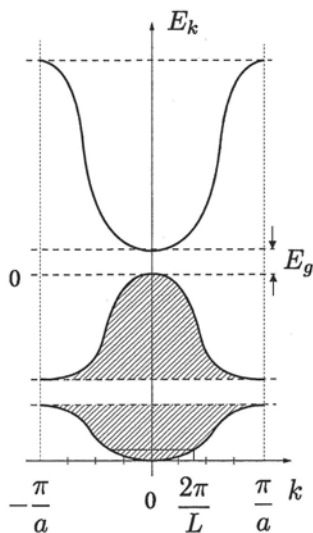


Рис. 4.11. В полупроводнике самая верхняя заполненная (со штриховкой) зона называется валентной, следующая пустая зона — зоной проводимости

токов, (5.1), не зависит от объема кристалла  $V$ , поскольку в этом пределе в (5.1) можно заменить суммирование по квазиимпульсу  $\mathbf{k}$  интегрированием по формуле  $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow (V/8\pi^3) \int d\mathbf{k}$ , где  $d\mathbf{k} = dk_x dk_y dk_z$  — физически бесконечно малый элемент объема в трехмерном  $\mathbf{k}$  — пространстве.

В трехмерном (3D) кристалле электрон движется «свободно» в каждом из трех направлений вдоль осей  $x$ ,  $y$  и  $z$ . Зонный спектр, изображенный на рис. 4.11, — это иллюстрация энергетического спектра электрона, движущегося в каком-то определенном направлении внутри 3D полупроводника, Ограничивая искусственно это свободное движение по каким-то направлениям областью размером  $a$ , мы получаем низкоразмерные 2D, 1D и 0D — полупроводниковые (или композитные) структуры: двумерную квантовую яму, одномерную квантовую трубку (проволоку) и нульмерную квантовую точку, соответственно. Отличительной особенностью энергетических спектров электрона в этих структурах является наличие характерной энергии размерного квантования, определяемой соотношением неопределенности (п.1.4):  $\Delta E \sim \pi^2 \hbar^2 / 2a^2 m_e^*$ ,  $m_e^*$  — эффективная масса электрона.

Рассмотрим сначала более подробно 2D квантовую яму. Внутри образца макроскопических размеров встраивается плоский слой из другого материала толщиной  $a \sim 1 \div 100$  нм. Это может быть, например, полупроводниковый слой внутри окисла, или слой полупроводника в объеме другого полупроводника (рис. 4.12). Такой объект можно получить послойно с помощью молекулярно-лучевой эпитаксии (роста), напыляя слой за слоем нужные материалы, используя хорошо контролируемые атомные пучки и восстанавливая затем кристаллическую структуру материала посредством отжига (длительного нагрева). В настоящее время эта технология достаточно хорошо развита.

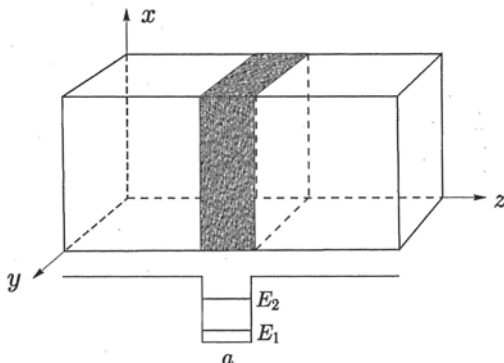


Рис. 4.12. Квантовая яма. Движение по оси  $z$  ограничено областью размера  $a$ . Внизу показаны два нижних энергетических уровня (4.30). Движение по осям  $x$  и  $y$  — свободное. Электроны образуют 2D электронный газ

Материалы подбираются так, что слой представляет для электронов потенциальную яму. Если размер ямы  $a$  становится сравнимым с длиной волны де Бройля, то, при движении по оси  $z$ , электрон (и дырка) оказываются в связанном состоянии, при этом образуются дискретные энергетические уровни (рис. 4.12). Движение по другим осям —  $x$  и  $y$  свободное, т.е. получается двумерный электронный газ.

Рассмотрим энергетический спектр электрона в полупроводниковой квантовой яме толщиной  $a$  (рис. 4.13). Для движения электрона по оси  $z$  в зоне проводимости получаем, используя результаты п. 2.3.1, проекцию волнового вектора на ось  $z$  и энергию дискретных энергетических уровней в виде:

$$k_{zn} = \frac{\pi}{a}n, \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2a^2 m_e^*}, \quad (4.40)$$

где  $m_e^*$  — эффективная масса электрона в зоне проводимости,  $n$  — положительные и отрицательные целые числа.

По осям  $x$  и  $y$  движение свободное, поэтому  $k_x$  и  $k_y$  изменяются непрерывно, а энергия определяется как  $E_{xy} = \frac{\hbar^2}{2m_e^*} (k_x^2 + k_y^2) \equiv \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_e^*}$ . Таким образом, получаем трехмерный энергетический спектр электрона в квантовой яме в виде:

$$E_n(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left( n^2 \frac{\pi^2}{a^2} + k_x^2 + k_y^2 \right). \quad (4.41)$$

Зависимость  $E_n$  от  $k_x$  и  $k_y$  представляет собой набор парабол, соответствующих числам  $n = 1, 2, 3$  и так далее (рис. 4.13). Их называют подзонами, чтобы отличить от энергетических зон объемного полупроводника. Изменяя размер квантовой ямы, т.е. параметр  $a$ , можно управлять энергетическим спектром электронов в ней, изменяя расстояние между уровнями энергии.

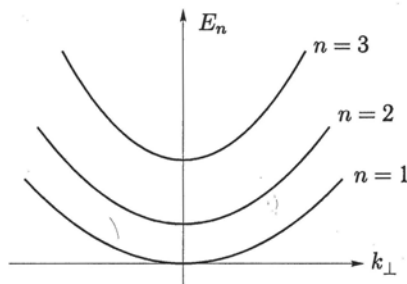


Рис. 4.13. Зависимость двумерных энергетических подзон электрона в квантовой яме от волнового числа  $k_{\perp} = (k_x^2 + k_y^2)^{1/2}$ . Полный спектр подзон получается вращением парабол вокруг вертикальной оси

Взаимодействие электрона в полупроводнике с окружением (например, с колебаниями кристаллической решетки — фононами) приводит к тому, что энергетические уровни уширяются и, благодаря этому, могут перекрываться. Условие того, что уровни в спектре (4.41) разрешены можно записать в виде

$$\frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2 m_e^*} > \hbar T_2^{-1},$$

где, при комнатной температуре  $T_2^{-1} \sim 10^{12} \text{ с}^{-1}$ , — ширина уровня, определяемая электрон-фононным взаимодействием. Отсюда получаем ограничение на толщину квантовой ямы

$$a < \frac{\hbar^{1/2} \pi}{(2m_e^* T_2^{-1})^{1/2}} \sim 10 \text{ нм}.$$

Квантовая яма, таким образом, — это 2D наноструктура.

Самое распространенное приложение квантовой ямы — двойной гетеропереход, на котором сделаны современные полупроводниковые лазеры<sup>1)</sup> (общие принципы работы лазера рассмотрены в п.8.3). Двойной гетеропереход представляет собой  $p-n$  переход, образованный двумя областями полупроводника AlGaAs с шириной запрещенной зоны  $E_{g1}$ , причем одна область  $p$ -типа, а вторая  $n$ -типа. Между ними имеется тонкий слой полупроводника GaAs с шириной запрещенной зоны  $E_g < E_{g1}$  (рис. 4.14).

Область, занятая GaAs, представляет собой 2D квантовую яму, в которой запираются как электроны ( $e$ ), инжектируемые в яму из  $n$ -области, так и дырки ( $h$ ), инжектируемые из  $p$ -области. Их время жизни в яме оказывается большим, при этом идет более эффективная рекомбинация электронов и дырок, сопровождаемая интенсивным излучением.

Аналогично тому, как из энергетических уровней атомов, при их сближении друг с другом в кристалле, получаются энергетические зоны (рис. 4.10), из дискретных уровней одной квантовой ямы, повторенной периодически, получается зонный спектр. Это происходит при достаточно малом периоде следования квантовых ям и малой их толщине, причем число уровней в каждой зоне равно числу квантовых ям. Квантовая структура, получаемая периодическим расположением квантовых ям, называется сверхрешеткой. Варьируя период следования ям в сверхрешетке и их размеры, можно управлять энергетическим спектром электрона. Сверхрешетки используются для создания высокоэффективных перестраиваемых по частоте приемников ИК излучения.

<sup>1)</sup> За создание полупроводниковых гетероструктур и гетеролазеров, играющих большую роль в науке, технологии и в нашей повседневной жизни (проигрывание и запись компакт-дисков!), российский ученый Ж.И. Алферов получил в 2000 году Нобелевскую премию.

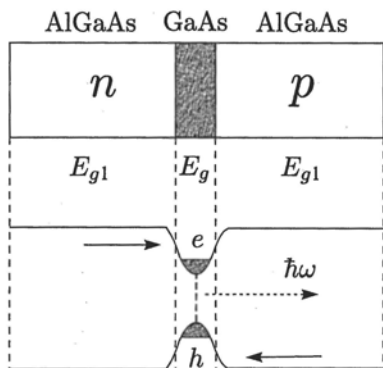


Рис. 4.14. Схема работы лазера на двойном гетеропереходе. Рекомбинация долгоживущих в квантовой яме электронов и дырок приводит к интенсивному излучению квантов света  $\hbar\omega$

Квантовая проволока представляет собой 1D структуру, в которой потенциальная яма двумерна, движение электрона оказывается свободным только в одном измерении — вдоль проволоки. Поперечное сечение квантовой проволоки может быть различным (прямоугольным, круглым, эллиптическим и другим). Такую структуру можно получить аналогично квантовой яме, внедряя один материал в другой, или просто изготовив тончайшее волокно из какого-либо материала (например, углеродную нанотрубку). При этом появляется тенденция к образованию дискретных уровней энергии  $E_n = \pi^2 \hbar^2 n^2 / 2m_e^* a^2$ , где  $n$  — целые числа. Варьируя поперечный размер квантовой проволоки  $a$ , можно изменять положение уровней энергии и расстояние между ними.

Квантовая точка представляет собой структуру нулевой размерности (0D-структура). В этом случае потенциальная яма для электрона трехмерна, движение электрона по всем трем измерениям ограничено и, соответственно, энергетический спектр — дискретный. Квантовую точку еще называют *кластером* или *искусственным атомом*. Варьируя размеры квантовой точки, можно управлять ее энергетическим спектром. Получают ее внедрением в материал инородного объекта нанометровых размеров. Другим методом является самоорганизация нанокластеров при напылении пленок с последующим отжигом. Так, например, получают нанокластеры Si в матрице SiO<sub>2</sub>. Квантовые точки используются для изготовления транзисторов, солнечных батарей, светоизлучающих диодов и диодных лазеров. В последнее время полупроводниковые квантовые точки стали использоваться для физической реализации квантовых битов — кубитов (см. п. 11.7.4).

Для более полного ознакомления с физикой полупроводниковых низкоразмерных наноструктур можно порекомендовать книгу [9].

## Глава 5

# ***P* — *N* ПЕРЕХОД И ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЙ ТРАНЗИСТОР. ФИЗИЧЕСКАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ БИТОВ И ЛОГИЧЕСКИХ ОПЕРАТОРОВ В КЛАССИЧЕСКОМ КОМПЬЮТЕРЕ**

В настоящей главе мы пройдем путь от зонного энергетического спектра полупроводника к полупроводниковому транзистору и реализации битов с помощью транзисторов в классическом компьютере.

### **5.1. Электроны и дырки в полупроводниках**

Рассмотрим двухзонную модель полупроводника:  $v$  — валентная зона,  $c$  — зона проводимости (рис. 5.1). В основном состоянии при  $T = 0$  все уровни внутри валентной зоны заняты, а в зоне проводимости — пустые. Допустим, мы переводим один электрон из валентной зоны в одно из состояний в зоне проводимости, тогда в валентной зоне возникает вакантное состояние — дырка.

Дырка — это полностью заполненная валентная зона без одного электрона. Исходя из этого определения, можно найти характеристики дырок. Например, квазиимпульс дырки:

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

где суммирование производится по всем значениям вектора  $\mathbf{k}$  в зоне.

Плотность электрического тока, создаваемого одной дыркой:

$$\mathbf{j}_h = -\frac{2e}{V} \sum_{k'} f_v(k') \mathbf{v}_{k'} + \frac{e}{V} f_v(k) \mathbf{v}_k = 0 + \frac{e}{V} f_v(k) \mathbf{v}_k = \frac{e}{V} f_v(k) \mathbf{v}_k,$$

где  $f_v(k)$  — вероятность заполнения состояния с квазиимпульсом  $\hbar \mathbf{k}$  в валентной зоне. Поскольку валентная зона практически полностью заполнена, то число заполнения  $f_v(k)$  можно положить равным 1, то есть  $\mathbf{j}_h = \frac{e}{V} \mathbf{v}_k$ . Видно, что ток дырок — это ток положительных зарядов, по модулю равных величине заряда электрона  $e$ .

Энергия дырки

$$E_h = \sum_{k'} E_v(k') - E_v(k) = \text{const} - E_v(k),$$

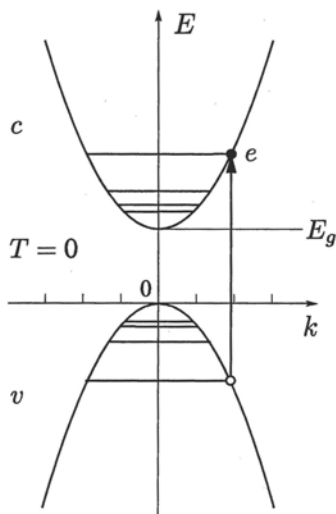


Рис. 5.1. Зависимость энергии электрона  $E$  от волнового числа  $k$  в двухзонном полупроводнике. Образование дырки в валентной зоне при переводе электрона в зону проводимости (обозначено стрелкой).

то есть с ростом  $k$  энергия дырки возрастает, поскольку энергия электрона в валентной зоне  $E_v(k) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_v}$ , где  $m_v$  — эффективная масса электрона в валентной зоне. Эффективная масса дырки равна эффективной массе электрона в валентной зоне  $m_v$ .

Получается очень наглядная картина: при оптическом возбуждении в зоне проводимости образуется газ электронов, а в валентной зоне газ дырок. Такой двухкомпонентный газ в полупроводниках называется электрон-дырочной плазмой. В  $p-n$  переходах и транзисторах осуществляется другой способ создания газа электронов и дырок — так называемая инжекция (см. пп. 5.3). При описании свойств полупроводника надо рассматривать оба эти газа. Например, плотность электрического тока в полупроводнике записывается в виде

$$j = j_e + j_h = -\frac{2e}{V} \sum_{k'} f_c(k') \mathbf{v}_{ek'} + \frac{2e}{V} \sum_{k'} f_h(k') \mathbf{v}_{hk'}, \quad (5.1)$$

где  $j_e$  и  $j_h$ , соответственно, плотность электронного и дырочного тока,  $f_h(k) = 1 - f_v(k)$ ,  $f_c(k)$  и  $f_v(k)$  — вероятности заполнения состояния  $k$  в зоне проводимости и в валентной зоне соответственно.

При рассмотрении процессов переноса в собственных (без примесей) полупроводниках обычно используется приближение электронейтральности электрон-дырочной плазмы («амбиполярный» перенос плазмы).

## 5.2. Легирование полупроводников. Доноры и акцепторы

Легирование полупроводников состоит во введении в них каких-либо примесных атомов. Необходимость легирования вызвана тем, что собственные полупроводники обладают пренебрежимо малой проводимостью в обычных условиях. Проводимость характеризуется коэффициентом электропроводности  $\sigma$ , который фигурирует в законе Ома  $j = \sigma E$  ( $j$  — плотность электротока,  $E$  — напряженность электрического поля). Для электронов

$$\sigma = \frac{e^2 n_e \tau}{m_c},$$

$n_e$  — концентрация электронов,  $m_c$  — эффективная масса электрона в зоне проводимости,  $\tau$  — время релаксации импульса электрона.

Рассмотрим собственный полупроводник с шириной запрещенной зоны  $E_g = 1$  эВ. При  $T = 0$  валентная зона полностью заполнена, а зона проводимости пустая. Оценим концентрацию электронов полупроводника в зоне проводимости  $n_c$  при комнатной температуре ( $T = 300$  К). Используя распределение Больцмана, оценим концентрацию электронов в зоне проводимости:

$$n_c = n_v e^{-\frac{E_g}{kT}} \approx 10^{23} \text{ см}^{-3} e^{-\frac{1 \text{ эВ}}{2.5 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}}} = 10^{23} e^{-40} \sim 10^6 \text{ см}^{-3},$$

где  $n_v$  — концентрация электронов в валентной зоне.

Отношение электропроводностей полупроводника и металла

$$\frac{\sigma_{\text{пп}}}{\sigma_{\text{мет}}} = 10^{-17}.$$

Получается, что проводимость чистого полупроводника при комнатной температуре практически нулевая.

Чтобы повысить концентрацию электронов в зоне проводимости до  $10^{19} - 10^{21} \text{ см}^{-3}$ , в полупроводник вносят примеси. Технология внесения примесей состоит в следующем. Сначала кристалл полупроводника бомбардируют атомными пучками, при этом атомы примеси хаотично располагаются в решетке. Для внедрения примеси именно в узел решетки необходимо осуществить температурный или лазерный отжиг. В первом случае, имплантированный образец часами выдерживают в печи при высокой температуре, что делает внедренные атомы подвижными и обеспечивает перестройку кристаллической решетки. Во втором — облучают кристалл лазерными импульсами. В этом случае процесс восстановления кристаллической решетки происходит всего за  $10^{-7}$  секунды.

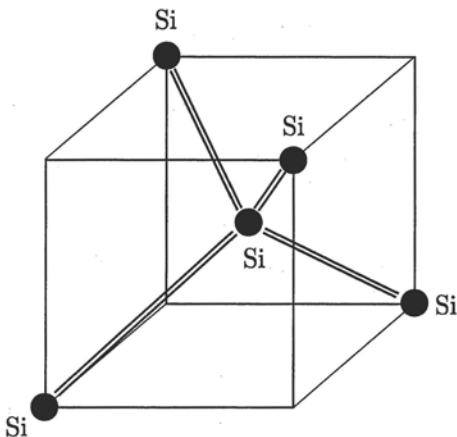


Рис. 5.2. Ячейка кристалла кремния. Центральный атом Si соединен с четырьмя ближайшими атомами Si ковалентными связями. При внедрении примеси и отжиге центральный атом Si заменяется на атом примеси (см. рис. 5.3).

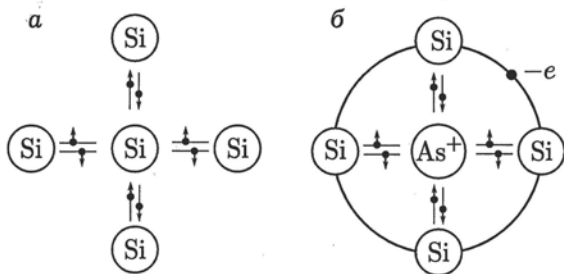


Рис. 5.3. Введение донора в решетку кремния. *а*) кристаллическая ячейка чистого кремния (вид сверху на трехмерную ячейку, рис. 5.2), *б*) кристаллическая ячейка кремния, легированная мышьяком. Ион  $\text{As}^+$  и связанный с ним электрон образуют примесный центр. Масштаб на рисунке не соблюден: расстояние между ионом и электроном составляет примерно 100 размеров кристаллической ячейки (см. текст)

Примеси делятся на донорные и акцепторные. Рассмотрим четырехвалентный полупроводник кремний (Si) с примесью пятивалентного мышьяка (As).

В ячейку кристалла Si с ковалентной связью (рис. 5.2) вводится атом As, который осуществляет ковалентную связь с 4-мя ближайшими атомами Si (рис. 5.3). Один электрон у атома As при этом оказывается лишним. Этот электрон вращается вокруг иона  $\text{As}^+$ . Образуется связанное состояние иона и электрона — так называемый *примесный центр*. Задача определения энергетического спектра электрона в при-

месном центре оказывается аналогичной задаче о водородоподобном атоме.

Гамильтониан электрона в примесном центре:

$$H = \frac{p_c^2}{2m_c} - \frac{e^2}{r\epsilon_0},$$

$m_c$  — эффективная масса электрона в зоне проводимости,  $r$  — модуль радиуса-вектора электрона относительно иона,  $p_c = m_c dr/dt$  — импульс электрона,  $\epsilon_0$  — статическая диэлектрическая проницаемость полупроводника ( $\epsilon_0 \sim 15$ ), которая учитывает экранирование заряда из-за поляризационных эффектов в среде. В этом состоит существенное количественное отличие от задачи для атома водорода, потому что там не фигурирует такое большое число в знаменателе выражения для потенциальной энергии. Для того, чтобы ввести диэлектрическую проницаемость, необходимо, чтобы расстояние между электроном и дыркой было существенно больше параметра решетки  $a$ , так как введение диэлектрической проницаемости требует усреднения по большому числу атомов. Кроме того, в кинетической энергии фигурирует эффективная масса электрона  $m_c \ll m_e$ .

Уравнение Шредингера:

$$\left(\frac{\mathbf{p}_c^2}{2m_c} - \frac{e^2}{r\epsilon_0}\right)\psi = E\psi,$$

аналогично уравнению Шредингера для атома водорода, поэтому можно сразу записать спектр энергетических уровней центра:

$$E^{(n)} = -\frac{m_c e^4}{2\hbar^2 \epsilon_0^2} \frac{1}{n^2} = (E_{\text{водород}}^{(n)}) \left(\frac{m_c}{m_e}\right) \frac{1}{\epsilon_0^2},$$

где

$$E_{\text{водород}}^{(n)} = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}$$

— энергия  $n$ -го уровня в атоме водорода (см. гл. 3).

Сравним пространственные масштабы и энергии связи атома водорода и примесного центра. Радиус Бора

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \sim 5 \cdot 10^{-9} \text{ см.}$$

Радиус примесного центра

$$a_{\text{центра}} = \frac{\hbar^2 \epsilon_0}{m_c e^2} = a_0 \left(\epsilon_0 \frac{m_e}{m_c}\right).$$

Приведем численные оценки

$$\frac{m_e}{m_c} \approx 10, \quad \epsilon_0 \sim 10 \quad \Rightarrow \quad a_{\text{центра}} \sim 10^{-6} \text{ см} \gg a_0.$$

То есть наше предположение о малости параметра решетки относительно радиуса центра выполняется.

Энергию связи электрона в примесном центре определим как  $E_{\text{связи}} = E^{(1)}$ .

Тогда

$$E_{\text{связи}} \sim 5 \cdot 10^{-3} \text{эВ} \ll k_B T \sim 2.5 \cdot 10^{-2} \text{эВ}$$

при  $T = 300\text{К}$ . Мы использовали здесь энергию ионизации атома водорода

$$\left| E_{\text{водород}}^{(1)} \right| = \frac{m_e e^4}{2\hbar^2} = 13.6 \text{эВ}.$$

Таким образом, в запрещенной зоне, под дном зоны проводимости возникают уровни энергии электрона в примесном центре. Поскольку, при комнатной температуре  $k_B T \gg E_{\text{связи}} \sim 10^{-3} \text{эВ}$ , все примесные центры оказываются ионизованными, отдав все электроны в зону проводимости. При этом в зону проводимости вводится столько электронов, сколько было введено в кристалл атомов примеси. В таком полупроводнике перенос заряда осуществляют электроны в зоне проводимости (полупроводник *n*-типа).

Если же теперь ввести в четырехвалентный кристалл Si атомы с валентностью 3 (например, атомы бора), то справедливы те же рассуждения, но относительно дырок. Введенный атом бора становится акцептором, принимая из валентной зоны один электрон для насыщения ковалентные связи. В результате получается отрицательный ион, вокруг которого обращается положительная дырка. Над потолком валентной зоны образуются уровни, на которые переходят электроны из валентной зоны, образуя в ней дырки, которые и осуществляют перенос заряда. Эти уровни отделены от валентной зоны на величину равную энергии связи  $E_{\text{связи}} \sim 10^{-3} \text{эВ}$ . Это полупроводник *p*-типа.

### 5.3. Принципы работы *p* – *n* перехода и полупроводникового транзистора

*p* – *n* переход — это две смежные области полупроводника, в которые введены примеси разного типа. В область *p*-типа введены акцепторы, а в область *n*-типа — доноры (рис. 5.4).

Обычно это достигается при помощи ионной имплантации, таким образом, работают только тонкие приповерхностные слои. Зонная схема легированных полупроводников показана на рис. 5.5.

Уровни **акцептора** принимают на себя электроны, таким образом, в валентной зоне образуются положительно заряженные дырки. Но, несмотря на то, что в **акцепторной** области есть положительный заряд дырок, в целом ее заряд равен нулю,



Рис. 5.4. *p* – *n* переход.

поскольку существует также отрицательный заряд ионизированных примесей, и поэтому, выполнено условие электронейтральности. Это очень важное условие работы  $p-n$  перехода и, следовательно, транзистора. В  $n$ -области имеются **доноры**, они ионизированы и отдают в зону проводимости отрицательно заряженные электроны. Условие электронейтральности для **донорной** области аналогично: хотя в зоне проводимости имеются свободные носители – электроны, но ионизированные примеси имеют положительный заряд, и в  $n$ -области полный заряд также равен нулю.

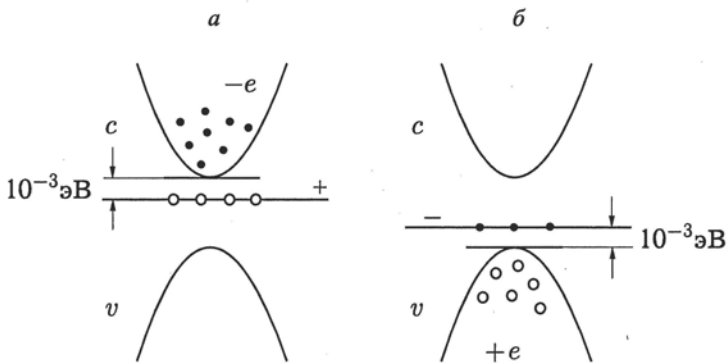


Рис. 5.5. Ионизация доноров (а) и акцепторов (б) образует газ отрицательно заряженных электронов в зоне проводимости (с) и газ положительно заряженных дырок в валентной зоне (v)

Рассмотрим последовательность диаграмм, которые объясняют работу  $p-n$  перехода. Это — распределение концентрации носителей заряда, диаграмма направления электрических токов и их компенсации, диаграмма, объясняющая появление области пространственного заряда. Также рассмотрим стационарное состояние, распределение потенциала, и, наконец, управление этим потенциалом, то есть диодом.

Основными носителями в  $p$ -области являются дырки и концентрация их  $n_h$  при переходе в  $n$ -область падает (в идеализированном случае график — «ступенька»). Концентрация электронов  $n_e$  соответственно падает при переходе в  $p$ -область (рис. 5.6, а).

Дырки и электроны можно рассматривать по отдельности. Начнем с дырок. Поскольку имеется градиент концентрации дырок, то возникает диффузионный поток дырок, который пропорционален градиенту концентрации дырок со знаком «минус», т.е. направлен из  $p$ -области в  $n$ -область. Поскольку заряд дырки положителен, то соответствующий электрический ток,  $j_{\text{диф}}^h$ , направлен в ту же сторону (рис. 5.6, б). В результате, в электронейтральную  $n$ -область переходят дырки, и образуют в ней положительный избыточный заряд. Аналогично, из-за градиента концентрации электронов, возникает диффузионный поток

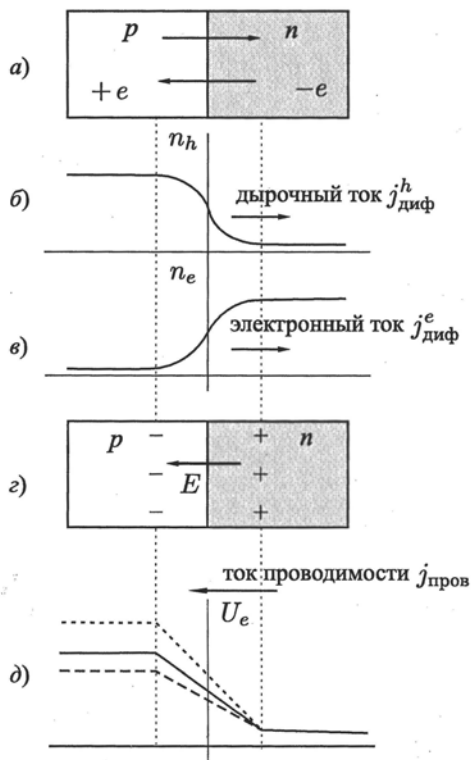


Рис. 5.6. Баланс процессов переноса и потенциальный барьер для электронов в  $p-n$  переходе. Аналогичный барьер имеется и для дырок

электронов из  $n$ -области в  $p$ -область, и в результате возникает избыточный отрицательный заряд в  $p$ -области. Следовательно, в области перехода появляется область объемного заряда, в которой возникает электрическое поле  $E$ , направленное из  $n$ - в  $p$ -область (рис. 5.6, г). Поле индуцирует ток проводимости, плотность которого равна

$$\mathbf{j}_{\text{пров}} = \sigma \cdot \mathbf{E},$$

Вклад в проводимость  $\sigma$  дают как электроны, так и дырки:  $\sigma = \sigma_e + \sigma_h$ , а  $\mathbf{j}_{\text{пров}}$  направлен по полю: из  $n$ -области в  $p$ -область (рис. 5.6, г).

Диффузионные электротоки дырок и электронов направлены в одну и ту же сторону (из  $p$ -области в  $n$ -область, рис. 5.6, в, г). Таким образом, суммарный диффузионный электрический ток

$$j_{\text{диф}} = j_{\text{диф}}^e + j_{\text{диф}}^h$$

направлен противоположно току проводимости. В стационарном состоянии суммарный диффузионный ток компенсирует ток проводимости:

$$j_{\text{пров}} = j_{\text{диф}}^e + j_{\text{диф}}^h.$$

Таким образом, стационарное состояние  $p-n$  перехода характеризуется наличием двойного слоя зарядов, суммарный ток равен нулю. Если рассмотреть зависимость потенциальной энергии электрона (это ключевая характеристика  $p-n$  перехода) от координаты, то, получается, что при проходе электрона через  $n$ -область справа налево вдали от области пространственного заряда, где поля нет (заряды двойного слоя компенсируют друг друга), энергия электрона остается постоянной ( $U_e = 0$ , рис. 5.6,  $\delta$ ). А при переходе через область пространственного заряда надо совершать работу против поля  $E$  и потенциальная энергия электрона возрастает (возникает потенциальный барьер, рис. 5.6,  $\delta$ ). В стационарном состоянии, из-за наличия этого потенциального барьера, электроны, которых много справа от области пространственного заряда, не переходят в  $p$ -область, и во внешней цепи нет тока. Если приложить внешнее напряжение нужного знака (плюс к  $p$ -области), то потенциальный барьер уменьшается (рис. 5.6,  $\delta$ , штриховая линия) и, благодаря этому, возникает дисбаланс токов: диффузионный электронный ток возрастает (происходит инжекция электронов в  $p$ -область), ток проводимости уже не компенсирует диффузионный ток, и в цепи возникнет электронный ток. Одновременно то же самое происходит и с дырками, так что ток через открытый внешним напряжением диод переносят как электроны, так и дырки. Если же поменять знаки внешнего напряжения, то  $p-n$ -переход заперт (рис. 5.6,  $\delta$ , пунктир). Таков принцип работы  $p-n$  перехода.

Транзистор — это два последовательно соединенных  $p-n$  перехода. На рис. 5.7 показана наиболее распространенная схема  $n-p-n$  транзистора, можно взять и  $p-n-p$  систему. Левая  $n$ -область на рис. 5.7 называется коллектором, правая  $n$ -область — эмиттером, а средняя  $p$ -область — базой.

На стыке различных областей ( $n-p$  и  $p-n$ ) транзистора так же возникают двойные объемные заряды. В стационарном состоянии тока через транзистор нет (из-за потенциальных барьеров для электронов и дырок!). При подаче управляющего напряжения нужного знака (на рис. 5.7 к  $p$ -области приложено напряжение  $U > 0$ ) барьеры уменьша-

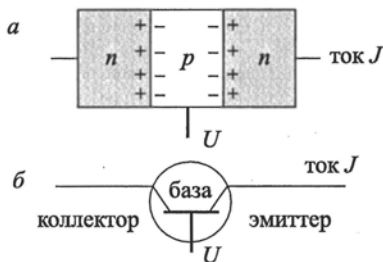


Рис. 5.7. Биполярный  $n-p-n$  транзистор (а). Изображение  $n-p-n$  транзистора в электронной схеме (б).  $U$  — управляющее напряжение, подводимое к базе.

ются и через транзистор течет ток. Если же на рис. 5.7 напряжение  $U = 0$ , то ток равен нулю.

Заканчивая обсуждение работы полупроводникового транзистора, поставим следующий вопрос. Почему и при каких условиях можно описывать перенос заряда в транзисторе (в общем случае — в полупроводниках и металлах) классически — в терминах диффузионного тока и тока проводимости? Ведь электроны и дырки в полупроводнике являются квантовыми микрочастицами, обладающими типично квантовым — зонным энергетическим спектром. Ответ на этот вопрос связан с так называемым явлением декогеренции — потери квантовым объектом своих квантовых свойств благодаря случайным воздействиям окружения-системы с макроскопически большим числом степеней свободы (например, порядка числа Авогадро  $10^{23} \text{ см}^{-3}$ ) (см. п. 8.2).

В идеальной кристаллической решетке электрон (или дырка) находится в стационарном квантовом состоянии с блоховской волновой функцией  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = A_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$  (формула (4.16)) и движется без рассеяния с квазиимпульсом  $\hbar\mathbf{k}$ . Нарушение периодичности решетки благодаря флуктуации электронной плотности, смещения атомов решетки из положения равновесия, наличие примесей и дефектов приводит к рассеянию электронов. В единичном акте упругого столкновения и рассеяния носителя заряда изменяется направление его импульса  $\hbar\mathbf{k}$ , а его энергия не изменяется (т.е. носитель остается на том же энергетическом уровне в той же зоне, что и до рассеяния). Если такие рассеивающие столкновения происходят достаточно часто, то движение электрона и дырки приобретает характер классической диффузии (случайных скачков в пространстве). Частичная потеря носителем своих квантовых свойств происходит на характерном времени релаксации квазиимпульса электрона  $\tau$ . Это характерное для данного процесса время можно назвать также временем декогеренции (потери квантовой когерентности) и ввести универсальное обозначение для этого времени  $T_2$ . Благодаря декогеренции, на временах  $t > T_2$ , электрон и дырка ведут себя в процессе переноса заряда как классические заряженные частицы. С другой стороны они сохраняют квантовый характер в отношении своего энергетического — зонного спектра. Классическое описание явлений переноса заряда в транзисторе возможно при достаточно малых характерных временах  $T_2$ , когда длина свободного пробега носителя  $l_e = T_2 v_e$ , где  $v_e$  — тепловая скорость электрона, много меньше характерных масштабов процесса или системы (длины диффузии носителя, размера нанокристалла и других).

Явление декогеренции квантовой системы благодаря взаимодействию с окружением носит универсальный характер. В различных квантовых устройствах, выполняющих различные функции, декогеренция может играть как деструктивную, так и конструктивную роль. Так, на временах, больших  $T_2$ , квантовый бит (кубит) превращается в классический бит (см. п. 8.2), что представляет собой большую проблему для физической реализации квантового компьютера (п. 11.7). В ла-

зерах, наоборот, явление декогеренции играет конструктивную роль, приводя, на временах больших  $T_2$ , к подстройке фазы поляризации всех излучающих двухуровневых атомов под фазу электромагнитного поля в резонаторе лазера (вынужденное излучение) (см. п. 8.3).

Хотя принцип работы транзистора классический, он, по сути, является квантовым прибором, потому что основан на квантовой зонной схеме полупроводника. Полупроводниковый транзистор — это основа современного компьютера, так как биты в компьютерных чипах реализуются транзисторами.

## 5.4. Хранение чисел и реализация логических операций с помощью полупроводниковых транзисторов

В памяти компьютера число хранится в двоичном коде в виде последовательности нулей и единиц. В полупроводниковой памяти каждая бинарная ячейка памяти, содержащая ноль (или единицу), реализуется транзистором, работающим как переключатель. Транзистор с током, текущим от коллектора к эмиттеру, реализует состояние ноль, а транзистор без тока — состояние единица. На рис. 5.8 показана схема такого переключения транзистора (сравните с рис. 5.7).

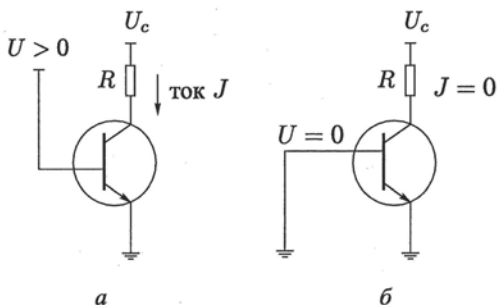
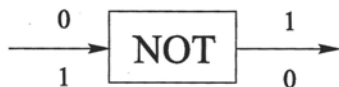


Рис. 5.8. а) Транзистор включен. Постоянно действующее напряжение  $U_c > 0$ , управляющее напряжение  $U < U_c$ ,  $R$  — сопротивление. б) Транзистор выключен.  $U = 0$ , ток  $J = 0$

Операции сложения, вычитания, умножения и деления выполняются с помощью логических операторов, таких как AND, OR, NOT и других.

Рассмотрим, в качестве примера, простейшую логическую операцию NOT, изображаемую следующим образом:

Если на входе 0, то на выходе 1, если на входе 1, то на выходе 0. Эта операция реализуется транзистором, работающим как инвертор: на



входе  $A$ , на выходе  $\bar{A}$  (не  $A$ ). Схема транзисторного инвертора показана на рис. 5.9 (сравните с рис. 5.8).

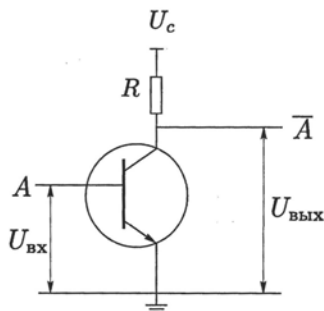


Рис. 5.9. Реализация оператора NOT с помощью транзистора

В этой схеме за 0 принимается малое значение входного ( $U_{вх}$ ) или выходного ( $U_{вых}$ ) напряжения, а за 1 принимается большое значение ( $U_{вх}$ ) или ( $U_{вых}$ ). Когда входное напряжение  $U_{вх}$  на базе транзистора велико,  $A = 1$ , транзистор включен и проводит ток  $J$ , так что все постоянно приложенное напряжение  $U_c$  падает на сопротивлении  $R$  ( $U_c = JR$ ), при этом выходное напряжение  $U_{вых}$  равно нулю ( $\bar{A} = 0$ ). Когда же входное напряжение  $U_{вх}$  мало ( $A = 0$ ), транзистор выключен, ток  $J = 0$  и выходное напряжение  $U_{вых} = U_c$  ( $\bar{A} = 1$ ). Таким же образом, комбинируя большее число транзисторов, реализуют сложные логические операторы AND, OR и другие.

За один такт при выполнении программы осуществляется переключение нескольких транзисторов из состояния с током в состояние без тока (или наоборот). Как видите, это классические представления, и транзистор работает в классическом приборе — компьютере, но основа работы прибора — по сути квантовая. Если перейти от квантовой механики к классической, то  $p - n$  переход исчезает, так как в классическом пределе зонной структуры нет и дырки, как существенно квантовые объекты, исчезают.

Объективная тенденция в микроэлектронике сегодня — это миниатюризация транзисторов, реализующих один бит (рис. 1.2), и в перспективе, создание компьютера, использующего для реализации одного бита один квантовый объект (атом, спин) (см. главу 11).

## Глава 6

# ОПЕРАТОРЫ МОМЕНТА ИМПУЛЬСА И ОРБИТАЛЬНОГО МАГНИТНОГО МОМЕНТА. СПИН. МАТРИЧНАЯ ФОРМУЛИРОВКА КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Нашей темой в 6 и 7 главах является спин — собственный механический момент электрона и соответствующий спиновый магнитный момент. Спиновый магнитный момент является базовым элементом устройств квантовой обработки информации. Понятие спина вводится по аналогии с орбитальным механическим моментом (моментом импульса) электрона в атоме. Поэтому сначала стандартным образом вводится оператор орбитального момента импульса, находятся его собственные функции и собственные значения. Рассматривается пространственное квантование вектора орбитального магнитного момента. Далее обсуждается эксперимент по обнаружению спина и устанавливается аналогия квантовых свойств спина и орбитального магнитного момента. Для введения операторов спина — квантового объекта, не имеющего классического аналога, осуществляется переход от волновой к матричной формулировке квантовой механики. В волновой квантовой механике физические величины представлены дифференциальными операторами, действующими на волновую функцию. В матричном представлении, которое используется в квантовой информации, операторы физических величин представлены матрицами, а волновая функция заменяется вектором-столбцом (вектором состояния). Оператор спина вводится в матричном представлении в главе 7.

### 6.1. Связь орбитального магнитного момента электрона в атоме с моментом импульса

В соответствии с классической планетарной моделью атома, электрон движется по орбите радиуса  $r$  вокруг положительно заряженного ядра со скоростью  $v$  (рис. 6.1). Орбитальное движение электрона вызывает круговой электрический ток в атоме.

Величина тока по определению — это заряд, проходящий через сечение проводника за единицу времени:

$$J = \frac{e}{T}, \quad T = \frac{2\pi r}{v}.$$

Таким образом:

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

здесь  $e$  — величина заряда электрона ( $e > 0$ ). Из электродинамики известно, что с круговым движением заряда («витком тока») связан магнитный момент, величина которого

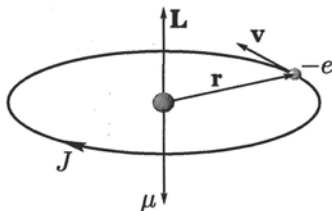


Рис. 6.1. Орбитальное движение электронов в атоме

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

где  $c$  — скорость света в вакууме.

Орбитальный механический момент электрона равен:

$$\mathbf{L} = [\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}],$$

где  $\mathbf{p} = m_e \mathbf{v}$  — импульс электрона. Таким образом, движение электрона в атоме характеризуется координатой, импульсом и орбитальным моментом импульса, который, для краткости, чаще называют моментом импульса. В случае  $\mathbf{r} \perp \mathbf{p}$  (рис. 6.1)

$$L = r m_e v.$$

Из этих формул получаем, что величина орбитального магнитного момента связана с величиной момента импульса:

$$\mu_l = \frac{e}{2m_e c} L, \quad (6.1)$$

где мы обозначили орбитальный магнитный момент через  $\mu_l$ . Удобно ввести величину, называемую магнетоном Бора

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c},$$

тогда из (6.1) получим следующую формулу, связывающую векторы орбитальных магнитного и механического моментов:

$$\mu_l = -\frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{L}. \quad (6.2)$$

Знак минус обусловлен отрицательным зарядом электрона (вектор орбитального момента  $\mathbf{L}$  направлен в сторону противоположную направлению вектора  $\boldsymbol{\mu}$  (рис. 6.1).

## 6.2. Операторы момента импульса

Введем оператор вектора орбитального момента частицы

$$\hat{\mathbf{L}} = [\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}}].$$

Рассмотрим три его проекции на оси  $x$ ,  $y$ ,  $z$ :

$$\begin{aligned} L_x &= y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial z}\right), \\ L_y &= z\hat{p}_x - x\hat{p}_z = i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial x}\right), \\ L_z &= x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right). \end{aligned}$$

Здесь использован оператор импульса

$$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla,$$

где  $\nabla$  — оператор градиента.

Определим правила коммутации операторов момента импульса с операторами координат и импульсов. Можно показать, что

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, x] &= 0, & [\hat{L}_x, y] &= i\hbar z, & [\hat{L}_x, z] &= -i\hbar y, \\ [\hat{L}_y, y] &= 0, & [\hat{L}_y, z] &= i\hbar x, & [\hat{L}_y, x] &= -i\hbar z, \\ [\hat{L}_z, z] &= 0, & [\hat{L}_z, x] &= i\hbar y, & [\hat{L}_z, y] &= -i\hbar x. \end{aligned}$$

Например,

$$[\hat{L}_x, y] = \hat{L}_x y - y \hat{L}_x = (y\hat{p}_z - z\hat{p}_y)y - y(y\hat{p}_z - z\hat{p}_y) = i\hbar z.$$

Аналогичные соотношения коммутации имеют место для операторов момента импульса и импульса

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, p_x] &= 0, & [\hat{L}_x, p_y] &= i\hbar p_z, & [\hat{L}_x, p_z] &= -i\hbar p_y, \\ [\hat{L}_y, p_y] &= 0, & [\hat{L}_y, p_z] &= i\hbar p_x, & [\hat{L}_y, p_x] &= -i\hbar p_z, \\ [\hat{L}_z, p_z] &= 0, & [\hat{L}_z, p_x] &= i\hbar p_y, & [\hat{L}_z, p_y] &= -i\hbar p_x. \end{aligned}$$

При помощи этих формул можно найти правила коммутации для операторов компонент момента импульса друг с другом

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= \hbar(\hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x) = \hat{L}_x(z\hat{p}_x - x\hat{p}_z) - (z\hat{p}_x - x\hat{p}_z)\hat{L}_x = \\ &= (\hat{L}_x z - z\hat{L}_x)\hat{p}_x - x(\hat{L}_x \hat{p}_z - \hat{p}_z \hat{L}_x) = -iy\hat{p}_x + ix\hat{p}_y = i\hbar \hat{L}_z. \end{aligned}$$

Таким образом, имеем

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

$$[\widehat{L}_y, \widehat{L}_z] = i\hbar\widehat{L}_x, \quad (6.3)$$

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

Введем оператор квадрата вектора полного момента импульса:

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

Этот оператор коммутирует с каждым из операторов  $\widehat{L}_x$ ,  $\widehat{L}_y$ ,  $\widehat{L}_z$ :

$$[\widehat{L}^2, \widehat{L}_x] = 0, \quad [\widehat{L}^2, \widehat{L}_y] = 0, \quad [\widehat{L}^2, \widehat{L}_z] = 0. \quad (6.4)$$

Соотношения (6.3) и (6.4) означают, что квадрат момента импульса может быть одновременно измерен только с одной из проекций момента, при этом две другие проекции остаются неопределенными.

**6.2.1. Собственные функции и собственные значения оператора момента импульса.** Определим возможные значения проекции момента импульса на какое-либо произвольно выбранное направление и возможные значения абсолютной величины момента импульса. Для решения этой задачи перейдем в сферическую систему координат, задав направление оси  $z$ . После преобразования (3.2) из декартовой системы координат в сферическую получим

$$\widehat{L}_x = i\hbar(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{ctg}\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}), \quad (6.5)$$

$$\widehat{L}_y = -i\hbar(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \operatorname{ctg}\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}), \quad (6.6)$$

$$\widehat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}, \quad (6.7)$$

$$\widehat{L}^2 = -\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi}, \quad (6.8)$$

где  $\Delta_{\theta,\varphi}$  — оператор Лапласа для сферы, формула (3.4).

Поставим задачу о нахождении собственных значений и собственных функций оператора  $\widehat{L}^2$  в сферических координатах:

$$-\hbar^2\Delta_{\theta,\varphi}\psi(\theta, \varphi) = L^2\psi(\theta, \varphi), \quad (6.9)$$

где  $L^2$  — собственное значение оператора  $\widehat{L}^2$ .

Задача (6.9) рассмотрена в главе 3 при решении уравнения Шредингера для атома водорода. Собственными функциями являются сферические функции

$$\psi_{l,m}(\theta, \varphi) = Y_{l,m}(\theta, \varphi), \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (6.10)$$

Собственные значения квадрата момента импульса равны

$$L_l^2 = \hbar^2 l(l+1). \quad (6.11)$$

Задача на собственные значения оператора проекции момента импульса на ось  $z$  состоит в решении уравнения

$$\widehat{L}_z \psi = L_z \psi. \quad (6.12)$$

В сферической системе координат, согласно (6.7), это уравнение приобретает вид

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = L_z \psi.$$

Подставив сюда собственную функцию  $\psi = \psi_{l,m}$ , и учитывая, что она зависит от  $\varphi$  как  $e^{im\varphi}$ , получаем, что  $\psi_{l,m}$  удовлетворяет уравнению (6.12) при собственных значениях оператора  $L_z$

$$L_z = \hbar m, \quad m = 0, \pm 1, \dots, \pm l. \quad (6.13)$$

Соответственно, квадрат орбитального магнитного момента

$$\mu_l^2 = \mu_B^2 l(l+1) \quad (6.14)$$

и проекция орбитального магнитного момента на ось  $z$  равна

$$(\mu_l)_z = \mu_B \cdot m. \quad (6.15)$$

### 6.3. Квантование орбитального магнитного момента электрона в атоме водорода

Рассмотрим в качестве примера атом водорода, в котором состояние электрона описывается волновой функцией  $\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)$ , где  $n = 1, 2, 3, \dots$  — главное квантовое число,  $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$  — орбитальное квантовое число,  $m = -l, \dots, +l$  — магнитное квантовое число (см. главу 3).

В основном состоянии

$$n = 1, l = 0, m = 0,$$

$$\mu_l = 0, \mu_z = 0.$$

Орбитальный магнитный момент равен нулю. Качественно это объясняется тем, что  $s$ -орбиталь имеет сферическую форму, её можно представить как суперпозицию континуума круговых орбит. Система со сферической симметрией не должна иметь магнитного момента.

В первом возбужденном состоянии

$$n = 2, l = 0, m = 0,$$

$$l = 1, m = 0, \pm 1.$$

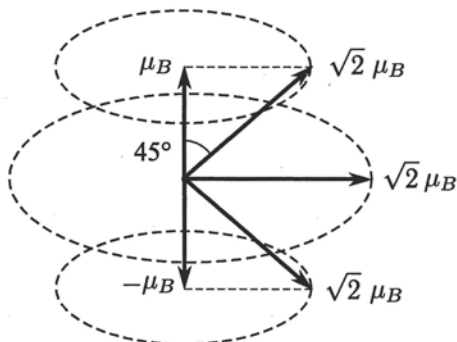


Рис. 6.2. Квантование вектора орбитального магнитного момента электрона в атоме водорода в состоянии  $n = 2$

В  $s$ -состоянии ( $l = 0$ ) орбитальный магнитный момент  $\mu_l = 0$ . В  $p$ -состоянии ( $l = 1$ )  $\mu_l^2 = 2\mu_B^2$ , а проекции момента  $(\mu_l)_z = 0, \pm\mu_B$ .

На рис. 6.2 показана схема квантования орбитального момента для случая  $n = 2$ . Вектор длины  $\sqrt{2}\mu_B$  может занимать три угловых положения в пространстве. Поскольку  $\mu_x$  и  $\mu_y$  не определены, то в состоянии  $m = \pm 1$  вектор  $\mu_l$  может находиться где угодно на поверхности конусов под углом  $45^\circ$  к оси  $z$ , а в состоянии  $m = 0$ , конец вектора  $\mu_l$  может находиться где угодно на окружности радиуса  $\sqrt{2}\mu_B$ .

То обстоятельство, что  $L_x$  и  $L_y$  полностью не определены, объясняется тем, что сферическая функция, квадрату модуля которой пропорциональна плотность вероятности, зависит от  $\varphi$  как

$$Y_{l,m}(\varphi) \sim e^{im\varphi}.$$

Поэтому плотность вероятности обнаружить проекцию вектора орбитального момента на плоскость  $xy$  с углом  $\varphi$  не зависит от этого угла:  $|Y_{l,m}(\varphi)|^2 = \text{const}$ .

## 6.4. Спин

Помимо орбитального механического момента, электрон обладает собственным механическим моментом, называемым спином. Одними из наиболее простых и ярких экспериментов, доказывающих существование спина, являются эксперименты Штерна и Герлаха (1922 г), суть которых заключается в следующем. Узкий пучок атомов серебра в основном состоянии ( $s$ -состоянии) пропускается через неоднородное магнитное поле (направленное вдоль оси  $z$ ) и наблюдается расщепление пучка на две компоненты (рис. 6.3).

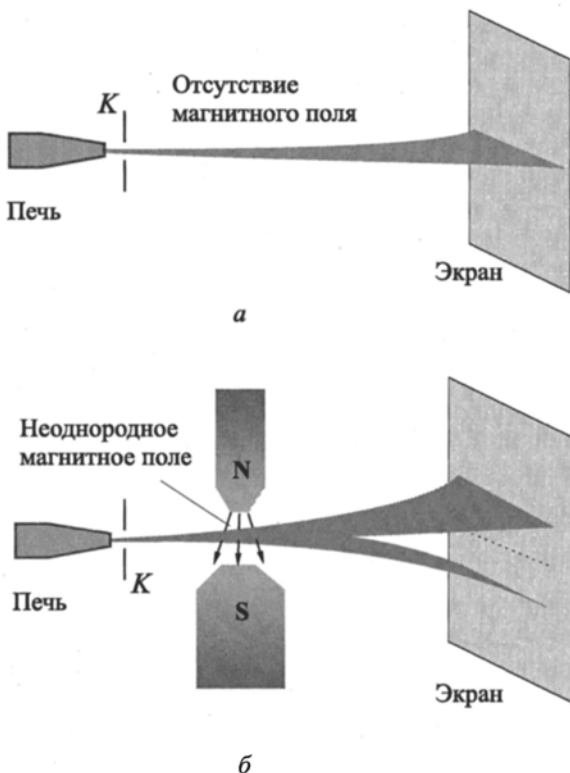


Рис. 6.3. Схема эксперимента Штерна и Герлаха по обнаружению спина атомного электрона. Атомы, испущенные с поверхности образца серебра при нагревании его в печи, проходят через коллиматор  $K$ . Сформированный таким образом узкий атомный пучок падает на экран. Поведение пучка атомов:  $a$  — в отсутствие магнитного поля,  $b$  — в присутствии неоднородного магнитного поля

Если атом имеет магнитный момент  $\mu_z$ , то в неоднородном магнитном поле с индукцией  $B_z(z)$  он приобретает энергию  $H(z) = -\mu_z B_z(z)$  и на него, вдоль оси  $z$ , будет действовать сила, равная

$$F_z = -\frac{\partial H}{\partial z} = -\mu_z \frac{\partial B}{\partial z}. \quad (6.16)$$

В эксперименте пучок атомов приготавливался в основном  $s$ -состоянии, в котором механический и магнитный орбитальные моменты атома равны нулю. Если предположить, что магнитный момент атома обусловлен только орбитальным движением электрона, то сила (6.16) будет равна нулю и пучок должен пройти неоднородное магнитное поле без расщепления, что противоречит результатам эксперимента. Следовательно в  $s$ -состоянии атом обладает магнитным моментом.

В эксперименте наблюдаются два четких изображения щели, т.е. возможны лишь две ориентации магнитного момента атома с проекциями на ось  $z$ :  $\pm|\mu_z|$ . Анализ экспериментальных данных показал, что величина отклонения пучков соответствует величине проекции магнитного момента атома на ось  $z$ , равному магнетону Бора:  $|\mu_z| = \mu_B$ .

Таким образом атом, находящийся в  $s$ -состоянии, и имеющий только один электрон, обладает магнитным векторным моментом  $\mu$ , проекция которого на направление магнитного поля принимает только два значения  $\pm\mu_B$ .

Этот экспериментальный результат бросил серьезный вызов квантовой механике. Для решения этой проблемы было введено новое понятие спина — собственного магнитного момента электрона. Электрон при этом рассматривался как вращающийся заряженный волчок (термин спин означает вращение). Такая интерпретация просуществовала некоторое время, но была позже отвергнута. Теория спина была построена Дираком с использованием релятивистской квантовой механики.

Из теории Дирака следует, что существует определенное соответствие между характеристиками спина и орбитального момента, иллюстрируемое следующей таблицей:

$\mathbf{L}$	$\mathbf{S}$
$L_z$	$S_z$
$L^2 = \hbar^2 l(l+1)$	$S^2 = \hbar^2 s(s+1)$
$l = 0, 1, \dots, n-1$	$s = \frac{1}{2}$
$\mu_l = -\frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{L}$	$\mu_s = -\frac{2\mu_B}{\hbar} \mathbf{S}$
$L_z = m_l \hbar$	$S_z = m_s \hbar$
$-l \leq m_l \leq l$	$-s \leq m_s \leq s$
$\Delta m_l = \Delta m_s = \pm 1$	

В левой части таблицы приведены характеристики орбитального момента, а в правой — соответствующие характеристики спина.  $\mathbf{S}$  — вектор спинового механического момента (спина),  $S_z$  — проекция спина на ось  $z$ ,  $S^2$  — квадрат спинового момента,  $s = 1/2$ -спиновое число (аналог орбитального числа  $l$ ),  $\mu_s$  — спиновый магнитный момент.

Анализируя данные в таблице получаем, что разрешены всего два значения проекции спина  $S_z$ :  $S_z = +\hbar/2$  и  $S_z = -\hbar/2$ . Как квантовая система с двумя состояниями, спин является удобным объектом для реализации квантовых битов (кубитов). Однако для описания кубитов требуется перейти от волновой формулировки квантовой механики к матричной.

## 6.5. Матричная формулировка квантовой механики

В предыдущих разделах мы описывали состояние квантового объекта при помощи волновой функции  $\psi(\mathbf{r}, t)$ , зависящей от координат и времени. Описание состояния с помощью функции, зависящей

от координат, называется *координатным представлением*. Волновая функция в  $\mathbf{r}$ -представлении содержит информацию о возможных результатах измерения координаты микрочастицы.

Координатное представление волновой функции  $\psi(\mathbf{r}, t)$  не является единственным. Совокупность коэффициентов  $F_n$  разложения волновой функции по собственным функциям  $\varphi_n$  оператора  $\hat{F}$  представляет собой волновую функцию состояния в представлении, соответствующем оператору  $\hat{F}$ , или  $F$ -представлением. Таким образом, волновую функцию можно записать в энергетическом представлении ( $E$ -представление), в импульсном ( $p$ -представление) и других представлениях.

Совокупность коэффициентов в разложении функции  $\psi(\mathbf{r}, t)$  представляется в виде вектора-столбца, соответственно дифференциальные операторы, представляющие физические величины, заменяются матрицами, действующими на эти вектора.

Матричную формулировку квантовой механики ввел Гейзенберг в 1925 году. Годом позже Шредингер дал волновую формулировку квантовой механики, а позже показал эквивалентность матричной и волновой формулировок.

**6.5.1. Стационарная система.** Введем матричную формулировку квантовой механики сначала в стационарном случае в представлении оператора  $\hat{F}$ . Допустим, что задача на собственные функции и собственные значения оператора  $\hat{F}$  решена, т.е. известны  $F_n$  и  $\varphi_n$ :

$$\hat{F}\varphi_n = F_n\varphi_n. \quad (6.17)$$

Нас интересуют собственные функции и собственные значения другого оператора  $\hat{A}$ :

$$\hat{A}\psi(x) = A\psi(x), \quad \int |\psi(x)|^2 dx = 1. \quad (6.18)$$

Оператор  $\hat{A}$  не коммутирует с оператором  $\hat{F}$ , иначе собственные функции операторов будут совпадать.

Так как система собственных функций полна, разложим волновую функцию  $\psi$  по собственным функциям оператора  $\hat{F}$ :

$$\psi(x) = \sum_m c_m \varphi_m(x).$$

Подставим это разложение в уравнение (6.18) и получим

$$\sum_m c_m (\hat{A}\varphi_m) = A \sum_m c_m \varphi_m.$$

Умножим это уравнение слева на  $\varphi_k^*$  и проинтегрируем по  $dx$ .

$$\int \varphi_k^* dx \sum_m c_m \hat{A}\varphi_m = A \sum_m c_m \int \varphi_k^* \varphi_m dx.$$

В силу ортогональности функций  $\varphi_k$  интегралы  $\int \varphi_k^* \varphi_m dx$  с  $m \neq k$  в правой части равенства равны нулю, а  $\int \varphi_k^* \varphi_k dx = 1$  в силу их нормировки. Таким образом, получим

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

или

$$\sum_m c_m (A_{km} - A \delta_{mk}) = 0, \quad (6.19)$$

где матричный элемент  $A_{km} = \int \varphi_k^* \hat{A} \varphi_m dx$ . Таким образом, мы получили систему алгебраических уравнений (6.19) с неизвестными  $c_m$ , такая система обладает не нулевыми решениями при условии обращения в нуль определителя

$$\det |A_{km} - \delta_{mk} A| = 0.$$

Корни этого уравнения представляют собой возможные значения величины  $A$  (собственные значения оператора  $\hat{A}$ ), а совокупность величин  $c_m$ , которые находятся из уравнения (6.19) для каждого конкретного  $A$ , определяет соответствующую собственную функцию, которую можно представить в виде вектора-столбца. Таким образом, дифференциальный оператор  $\hat{A}$  в матричной квантовой механике заменяется матрицей  $A_{km}$ , а волновые функции — векторами-столбцами.

**6.5.2. Нестационарная система.** Теперь рассмотрим нестационарную систему, когда гамильтониан явно зависит от времени. Этот случай интересен с точки зрения квантовых вычислений, поскольку они включают в себя эволюцию квантовых состояний во времени.

Запишем нестационарное уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(x, t). \quad (6.20)$$

Подставляя в (6.20)  $\psi(x, t)$  в виде ряда

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

умножая слева на  $\varphi_m^*(x)$  и интегрируя по  $x$ , находим:

$$i\hbar \frac{dc_m}{dt} = \sum_n H_{mn}(t) c_n, \quad (6.21)$$

где матричный элемент оператора Гамильтона

$$H_{mn}(t) = \int \varphi_m^*(x) \hat{H}(t) \varphi_n(x) dx \quad (6.22)$$

в явном виде записывается как

$$\hat{H} = \begin{vmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} & \dots & H_{1n} & \dots \\ H_{21} & H_{22} & H_{23} & \dots & H_{2n} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ H_{m1} & H_{m2} & H_{m3} & \dots & H_{mn} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}.$$

В соответствии с (6.21), временная эволюция волновой функции определяется эволюцией коэффициентов  $c_n$ . Набор коэффициентов  $c_n$  образует вектор-столбец и обозначается как

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ \vdots \\ c_n(t) \end{pmatrix}. \quad (6.23)$$

Нестационарное уравнение Шредингера в матричном представлении записывается в следующей компактной форме

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\psi\rangle. \quad (6.24)$$

Уравнение (6.24) может быть использовано для описания временной эволюции спина (см. главу 7). Однако перед этим необходимо ввести матричные операторы спина, поскольку рецепт построения матричного перехода (6.22) для спина не применим.

## Глава 7

# ОПЕРАТОРЫ СПИНА. КУБИТ И ЕГО ПРЕДСТАВЛЕНИЕ НА СФЕРЕ БЛОХА. УПРАВЛЕНИЕ КУБИТОМ ПРИ ПОМОЩИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ

В настоящей главе вводится матричный оператор спина и находят-ся его собственные векторы и собственные значения. Это позволяет ввести концепцию спинового кубита, рассмотреть его свойства, в част-ности, дать наглядное представление произвольного вектора состояния кубита вектором единичной длины на сфере Блоха («блоховского век-тора»). Вводятся основные однокубитовые операторы, используемые в квантовых вычислениях, как операторы поворота блоховского вектора и рассмотрена процедура физической реализации таких поворотов с помощью скрещенных постоянного и переменного магнитных полей.

### 7.1. Операторы спина

При введении оператора спина нельзя действовать по обычной схеме, как это делалось в случае импульса или момента импульса (гла-ва 6), поскольку спин не имеет классического аналога. Для этой цели мы используем аналогию между орбитальным магнитным моментом и спином.

Введем оператор спина  $S$ , задавая его проекции на оси координат  $S_x, S_y, S_z$  и постулируем соотношения коммутации между ними, по аналогии со случаем орбитального магнитного момента:

$$[S_x, S_y] = S_x S_y - S_y S_x = i\hbar S_z,$$

$$[S_y, S_z] = S_y S_z - S_z S_y = i\hbar S_x,$$

$$[S_z, S_x] = S_z S_x - S_x S_z = i\hbar S_y.$$

Удобно перейти к безразмерным операторам спина  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  по форму-лам

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x, \quad S_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y, \quad S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z,$$

которые должны удовлетворять следующим соотношениям коммута-ции:

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z, \quad [\sigma_y, \sigma_z] = 2i\sigma_x, \quad [\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y.$$

Этим соотношениям коммутации удовлетворяют так называемые матрицы Паули:

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

Операторы проекции спинового магнитного момента выражаются через матрицы Паули:

$$\mu_x = -\mu_B \sigma_x, \quad \mu_y = -\mu_B \sigma_y, \quad \mu_z = -\mu_B \sigma_z.$$

Решим задачу на собственные векторы и собственные значения для постулированных таким образом операторов спина. Найдем, например, собственные векторы и собственные значения оператора  $\sigma_z$ :

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

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

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

Таким образом, собственный вектор, соответствующий  $\lambda = +1$ , имеет вид  $|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ . Проекция спина на ось  $z$  равна  $S_z = \hbar/2$ . Аналогично получаем второе решение  $\lambda = -1$ ;  $c_1 = 0, c_2 = 1$ . Соответствующий собственный вектор  $|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ . Проекция спина на ось  $z$  равна  $S_z = -\frac{\hbar}{2}$ . Таким образом мы получили два базисных состояния:  $|0\rangle$  — спин направлен вверх  $\uparrow$  и  $|1\rangle$  — спин направлен вниз  $\downarrow$ .

## 7.2. Понятие кубита

Классический бит реализуется системой, которая может находиться только в двух состояниях, например 0 или 1. Кубит (квантовый бит) — это квантовая система, которая может находиться в базисных состояниях  $|0\rangle$  или  $|1\rangle$ , а также в суперпозиционном состоянии:

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle, \quad (7.1)$$

где  $|0\rangle$  и  $|1\rangle$  — вектора-столбцы,  $a$  и  $b$ , в общем случае, являются комплексными числами. Условие нормировки имеет вид:

$$\langle\psi|\psi\rangle = |a|^2 + |b|^2 = 1. \quad (7.2)$$

Таким образом, состояние кубита можно рассматривать как вектор в двумерном комплексном векторном пространстве. Условие (7.2) то-

гда означает, что этот вектор имеет единичную длину. Состояния  $|0\rangle$  и  $|1\rangle$  называются *состояниями вычислительного базиса* и образуют ортонормированный базис данного векторного пространства:  $\langle 0|0\rangle = \langle 1|1\rangle = 1$ ,  $\langle 0|1\rangle = \langle 1|0\rangle = 0$ <sup>1)</sup>.

Примером кубита является спиновый магнитный момент, имеющий два базисных квантовых состояния со спином вверх и спином вниз (п. 7.1), что позволяет использовать его для хранения и обработки информации. Другим примером является система двух энергетических уровней в атоме — двухуровневый атом (п. 3.1.1).

### 7.3. Представление кубита на блоховской сфере

Состояния кубита  $|\psi\rangle$  можно наглядно представлять на так называемой сфере Блоха. Введем три величины  $\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z$  по формулам

$$\begin{aligned}\lambda_x &= b^*a + ba^*, \\ \lambda_y &= i(b^*a - a^*b), \\ \lambda_z &= a^*a - b^*b.\end{aligned}\quad (7.3)$$

Можно показать, что

$$\lambda_x^2 + \lambda_y^2 + \lambda_z^2 = 1.$$

Величины  $\lambda_x, \lambda_y$  и  $\lambda_z$  будем рассматривать как компоненты вектора  $\lambda$  единичной длины, называемого вектором Блоха. Из рис. 7.1 видно, что ориентация этого вектора определяется в сферической системе координат заданием двух углов  $\theta$  и  $\varphi$ , причем

$$\begin{aligned}\lambda_x &= \sin \theta \cos \varphi, \\ \lambda_y &= \sin \theta \sin \varphi, \\ \lambda_z &= \cos \theta.\end{aligned}\quad (7.4)$$

Из (7.3) и (7.4) тогда имеем

$$\lambda_z = |a|^2 - |b|^2 = \cos \theta.$$

Рис. 7.1. Представление кубита на сфере Блоха

Условие нормировки дает

$$|a|^2 + |b|^2 = 1.$$

<sup>1)</sup> Скалярное произведение двух векторов в обозначениях Дирака записывается как  $\langle \mathbf{a}|\mathbf{b}\rangle$  и соответствует умножению длины вектора  $\mathbf{a}$  на проекцию вектора  $\mathbf{b}$  на данный вектор  $\mathbf{a}$ . Результатом произведения является скаляр. Т.е.  $\langle 0|0\rangle = (1\ 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1 \cdot 1 + 0 \cdot 0 = 1$ , аналогично вычисляются скалярные произведения  $\langle 1|1\rangle, \langle 0|1\rangle, \langle 1|0\rangle$ .

Решение этой системы уравнений имеет вид:

$$|a| = \cos \frac{\theta}{2}, \quad |b| = \sin \frac{\theta}{2}.$$

Таким образом, произвольный вектор состояния кубита  $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$  записывается в виде

$$|\psi\rangle = |a| e^{i\varphi_a} |0\rangle + |b| e^{i\varphi_b} |1\rangle = e^{i\varphi_a} (\cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle), \quad (7.5)$$

где  $e^{i\varphi_a}$  и  $e^{i\varphi_b}$  — фазовые множители,  $\varphi_a$  — абсолютная (глобальная) фаза кубита,  $\varphi = \varphi_b - \varphi_a$  — (относительная) фаза кубита.

При вычислении средних значений операторов спина  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ , которые действуют на базисные состояния  $|0\rangle$  и  $|1\rangle$ , фазовые множители  $e^{i\varphi_a}$  и  $e^{-i\varphi_a}$  взаимно сокращаются, поэтому в выражении (7.5) можно положить  $\varphi_a = 0$ , и называть относительную фазу  $\varphi_b - \varphi_a$  просто фазой кубита.

**7.3.1. Операторы поворота вектора Блоха.** Действием операторов поворота вектор Блоха можно поворачивать на блоховской сфере. Однокубитовые логические операции при проведении квантовых вычислений состоят в переводе кубита из одного состояния в другое на сфере Блоха. Поскольку при таких операциях длина вектора Блоха остается равной 1 (т.е. норма вектора состояния сохраняется), то такие операции называются унитарными, а операторы, которые их совершают называются унитарными операторами.

Оператор поворота блоховского вектора на угол  $\alpha$  вокруг оси  $x$  по часовой стрелке представляется в следующем виде:

$$\hat{R}_x(\alpha) = \cos \frac{\alpha}{2} \hat{I} - i \sin \frac{\alpha}{2} \hat{X}, \quad (7.6)$$

где  $\hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$  — оператор идентичности,  $\hat{X} = \hat{\sigma}_x$  — матрица Паули.

Рассмотрим следующий пример: как изменится состояние  $|0\rangle$ , если подействовать на него оператором  $R_x\left(\frac{\pi}{2}\right)$  (рис. 7.2).

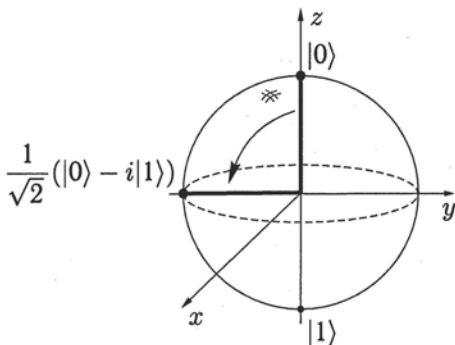
Отметим, что

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

т.е. оператор  $\hat{X}$  представляет собой оператор NOT. Тогда

$$R_x\left(\frac{\pi}{2}\right) |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{I} - i\hat{X}) |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - i|1\rangle).$$

Мы действительно повернули вектор на сфере Блоха на угол  $\pi/2$  вокруг оси  $x$  по часовой стрелке (правило буравчика), как показано на рис. 7.2. Введем еще два аналогичных оператора поворота вокруг

Рис. 7.2. Действие оператора  $R_x\left(\frac{\pi}{2}\right)$  на состояние  $|0\rangle$ 

осей  $y$  и  $z$

$$\begin{aligned} R_y(\alpha) &= \cos \frac{\alpha}{2} \hat{I} - i \sin \frac{\alpha}{2} \hat{Y}, \\ R_z(\alpha) &= \cos \frac{\alpha}{2} \hat{I} - i \sin \frac{\alpha}{2} \hat{Z}, \end{aligned} \quad (7.7)$$

где  $\hat{Z} = \hat{\sigma}_z$ ,  $\hat{Y} = \hat{\sigma}_y$  — матрицы Паули.

Возможна другая форма представления операторов поворота:

$$\begin{aligned} \hat{R}_x(\alpha) &= e^{-i\frac{\alpha}{2}\hat{X}}, \\ \hat{R}_y(\alpha) &= e^{-i\frac{\alpha}{2}\hat{Y}}, \\ \hat{R}_z(\alpha) &= e^{-i\frac{\alpha}{2}\hat{Z}}, \end{aligned} \quad (7.8)$$

которая эквивалентна исходному представлению (7.6), (7.7). Докажем это на примере оператора  $\hat{R}_x(\alpha)$ . Учтем, что оператор  $e^{-i\frac{\alpha}{2}\hat{X}}$  представляется в виде разложения в ряд Тейлора:

$$e^{-i\frac{\alpha}{2}\hat{X}} = 1 + \left(-\frac{i\alpha}{2}\right)\hat{X} + \frac{1}{2!}\left(-\frac{i\alpha}{2}\right)^2\hat{X}^2 + \frac{1}{3!}\left(-\frac{i\alpha}{2}\right)^3\hat{X}^3 + \dots \quad (7.9)$$

Заметим, что четная степень оператора  $\hat{X} = \text{NOT}$  дает единичный оператор, т.е.  $\hat{X}^{2n} = \hat{I}$  для любого  $n$ , нечетная степень оператора  $\hat{X}$  дает  $\hat{X}^{2n+1} = \hat{X}^{2n}\hat{X} = \hat{I}\hat{X} = \hat{X}$  для любого  $n$ . Следовательно, сгруппировав четные и нечетные степени в разложении (7.9), получим:

$$\begin{aligned} e^{-i\frac{\alpha}{2}\hat{X}} &= 1 + \frac{1}{2!}\left(\left(-\frac{i\alpha}{2}\right)^2 + \dots\right)\hat{I} + \left(\left(-\frac{i\alpha}{2}\right) + \frac{1}{3!}\left(-\frac{i\alpha}{2}\right)^3 + \dots\right)\hat{X} = \\ &= \cos \frac{\alpha}{2}\hat{I} - i \sin \frac{\alpha}{2}\hat{X}, \end{aligned} \quad (7.10)$$

что и требовалось доказать. Аналогично доказывается эквивалентность представлений (7.7) и (7.8) для операторов  $\hat{R}_y(\alpha)$  и  $\hat{R}_z(\alpha)$ .

Теоретически, с помощью комбинации этих операторов поворота можно переводить вектор Блоха из любого начального в любое конечное состояние. Рассмотрим теперь как осуществить такую операцию экспериментально.

#### 7.4. Физическая реализация поворотов вектора Блоха

До настоящего момента мы решали статические задачи, рассмотрим теперь динамическую задачу о временной эволюции кубита. Физическая реализация поворотов вектора Блоха, в случае спина, осуществляется с помощью двух взаимно перпендикулярных магнитных полей (рис. 7.3). В простейшем случае поля создаются токами, текущими через катушки. Оси катушек расположены перпендикулярно друг другу. При помощи первой катушки-соленооида, ось которой направлена вдоль оси  $z$ , создается постоянное магнитное поле. Вторая катушка, ось которой направлена вдоль оси  $x$ , создает переменное магнитное поле в радиочастотном диапазоне ( $10^6 - 10^8$  Гц). В результате вдоль оси  $z$  возникает постоянное магнитное поле, вдоль оси  $x$  — переменное магнитное поле. Управляемый спин находится в точке пересечения осей катушек. Описанная схема использовалась при проведении первых экспериментов по управлению направлением спинового магнитного момента.

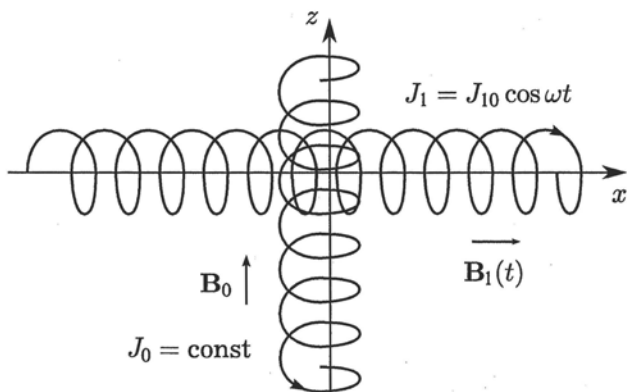


Рис. 7.3. Установка, позволяющая изменять направление спинового магнитного момента

По катушке, ось которой направлена вдоль  $z$ , течет постоянный ток  $J_0 = \text{const}$ , создающий магнитное поле с вектором индукции  $\mathbf{B}_0 = \mathbf{e}_z B_0$ . По второй катушке, ось которой направлена вдоль  $x$ , течет переменный ток  $J_1 = J_{10} \cos \omega t$ ,  $\omega$  — заданная частота. Этот ток создает переменное магнитное поле  $\mathbf{B}_1(t) = 2B_1 \cos \omega t \mathbf{e}_x$  (коэффициент 2 в амплитуде поля  $2B_1$  выбран для удобства дальнейших вычислений).

Вектор магнитного момента  $\mu$ , как известно, совершает вращение (ларморовская прецессия) вокруг вектора магнитного поля  $\mathbf{B}_0$  (см. рис. 7.4 и формулы (7.35), (7.36)).

Представим  $\mathbf{B}_1(t)$  в виде:

$$\mathbf{B}_1(t) = 2B_1 \cos \omega t e_x = B_1(\cos \omega t e_x + \sin \omega t e_y) + B_1(\cos \omega t e_x - \sin \omega t e_y) = \mathbf{B}_1^{(+)} + \mathbf{B}_1^{(-)}. \quad (7.11)$$

Формула (7.11) показывает, что вектор поля, осциллирующий вдоль оси  $x$ , может быть представлен в виде суммы двух векторов, один из которых,  $\mathbf{B}_1^{(+)}$ , вращается в ту же сторону, что и вектор  $\mu$  (рис. 7.4), а другой,  $\mathbf{B}_1^{(-)}$ , в противоположную сторону.

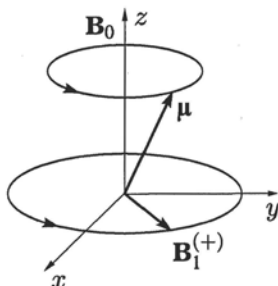


Рис. 7.4. Вектор  $\mu$  совершает прецессию вокруг вектора поля  $\mathbf{B}_0$ . Вектор  $\mathbf{B}_1^{(+)}$  из (7.11) вращается в ту же сторону

Эффективное воздействие на магнитный момент оказывает лишь поле  $\mathbf{B}_1^{(+)}$ , влиянием поля  $\mathbf{B}_1^{(-)}$  можно пренебречь. В этом, так называемом *приближении вращающейся волны (или резонансном приближении)* из (7.11) получаем:

$$\mathbf{B}_1(t) \cong B_1(\cos \omega t e_x + \sin \omega t e_y). \quad (7.12)$$

Запишем гамильтониан спина в магнитном поле  $\mathbf{B} = \mathbf{B}_0 + \mathbf{B}_1(t)$ :

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}), \\ \boldsymbol{\mu} &= -\frac{2\mu_B}{\hbar} \mathbf{S}, \\ \hat{S}_x &= \frac{\hbar}{2} \hat{X}, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \hat{Y}, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \hat{Z}. \end{aligned} \quad (7.13)$$

С учетом (7.12),

$$\hat{H} = B_0 \mu_B \hat{Z} + B_1 \mu_B (\hat{X} \cos \omega t + \hat{Y} \sin \omega t). \quad (7.14)$$

Введем новые обозначения:

$$\begin{aligned} 2B_0\mu_B &= \hbar\omega_0, \\ 2B_1\mu_B &= \hbar\omega_1, \end{aligned} \quad (7.15)$$

$\omega_0$  — частота прецессии спина в постоянном магнитном поле  $B_0$ ,  $\omega_1$  — параметр.

В этих обозначениях гамильтониан записывается в виде

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega_0}{2}\hat{Z} + \frac{\hbar\omega_1}{2}(\hat{X}\cos\omega t + \hat{Y}\sin\omega t) = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (7.16)$$

$\hat{H}_0$  — оператор энергии спина в постоянном магнитном поле,  $\hat{V}$  — оператор энергии спина в переменном поле.

Гамильтониан (7.16) описывает двухуровневую систему с частотой перехода  $\omega_0$ , взаимодействующую с переменным магнитным полем. Отметим, что расщепление энергетического уровня спина на два возникает в постоянном магнитном поле  $B_0$  (рис. 7.5). На рисунке слева: постоянное магнитное поле выключено, два состояния спина (спин вверх и спин вниз) имеют одну и ту же нулевую энергию (уровень энергии вырожден), справа: вдоль оси  $z$  включено постоянное магнитное поле  $B_0$ . Уровень энергии состояния  $|0\rangle$  (спин вверх) поднимается, уровень энергии состояния  $|1\rangle$  (спин вниз) опускается. Возникает расщепление энергетических уровней равное  $\Delta E = \hbar\omega_0 = e\hbar B_0/m_e c$ . Частота  $\omega_0$  называется частотой ларморовской прецессии.

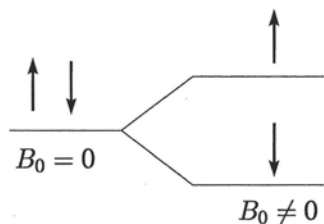


Рис. 7.5. Расщепление энергетического уровня спина на два в постоянном магнитном поле

Уравнение Шредингера для вектора состояния спина  $|\varphi\rangle$  имеет вид:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\varphi\rangle = \hat{H}|\varphi\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{V})|\varphi\rangle. \quad (7.17)$$

Сделаем замену переменных, позволяющую убрать быстрые осцилляции. Введем новый вектор  $|\psi(t)\rangle$ , подействовав на исходный вектор  $|\varphi\rangle$  оператором поворота против часовой стрелки на угол  $\omega t$  вокруг оси  $z$ :

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\omega t\hat{Z}/2}|\varphi(t)\rangle. \quad (7.18)$$

Вектор  $|\psi\rangle$  описывает эволюцию кубита в системе отсчета вращающейся с угловой скоростью  $\omega$  вокруг оси  $z$  по часовой стрелке. Тогда

$$|\varphi(t)\rangle = e^{-i\omega t \hat{Z}/2} |\psi(t)\rangle. \quad (7.19)$$

Подставляем (7.19) в (7.17) и дифференцируем по времени:

$$\frac{\hbar\omega}{2} \hat{Z} e^{-i\omega t \hat{Z}/2} |\psi\rangle + e^{-i\omega t \hat{Z}/2} i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H} e^{-i\omega t \hat{Z}/2} |\psi\rangle. \quad (7.20)$$

Используя (7.16) и действуя слева оператором  $e^{i\omega t \hat{Z}/2}$  на обе части (7.20), получим уравнение Шредингера для вектора  $|\psi\rangle$ :

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \frac{\hbar(\omega_0 - \omega)}{2} \hat{Z} |\psi\rangle + e^{i\omega t \hat{Z}/2} \hat{V} e^{-i\omega t \hat{Z}/2} |\psi\rangle, \quad (7.21)$$

откуда, деля на  $i\hbar$  и подставляя  $\hat{V}$  из (7.16), получаем

$$\frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = -i \frac{(\omega_0 - \omega) \hat{Z}}{2} |\psi\rangle - \left(i \frac{\omega_1}{2}\right) e^{i\omega t \hat{Z}/2} (\hat{X} \cos \omega t + \hat{Y} \sin \omega t) e^{-i\omega t \hat{Z}/2} |\psi\rangle. \quad (7.22)$$

Чтобы провести дальнейшие преобразования, докажем следующее соотношение:

$$e^{i\alpha \hat{Z}/2} \hat{X} e^{-i\alpha \hat{Z}/2} = \hat{X} \cos \alpha - \hat{Y} \sin \alpha. \quad (7.23)$$

Для этого используем формулы

$$\hat{X} \hat{Z} = -i \hat{Y},$$

$$\hat{Y} \hat{Z} = i \hat{X}.$$

Тогда

$$\begin{aligned} e^{i\alpha \hat{Z}/2} \hat{X} e^{-i\alpha \hat{Z}/2} &= \left(\cos \frac{\alpha}{2} \hat{I} + i \sin \frac{\alpha}{2} \hat{Z}\right) \hat{X} \left(\cos \frac{\alpha}{2} \hat{I} - i \sin \frac{\alpha}{2} \hat{Z}\right) = \\ &= \left(\cos \frac{\alpha}{2} \hat{I} + i \sin \frac{\alpha}{2} \hat{Z}\right) \left(\cos \frac{\alpha}{2} \hat{X} - \sin \frac{\alpha}{2} \hat{Y}\right) = \\ &= \cos^2 \frac{\alpha}{2} \hat{X} - \cos \frac{\alpha}{2} \sin \frac{\alpha}{2} \hat{Y} - \sin \frac{\alpha}{2} \cos \frac{\alpha}{2} \hat{Y} - \\ &\quad - \sin^2 \frac{\alpha}{2} \hat{X} = \cos \alpha \hat{X} - \sin \alpha \hat{Y}. \end{aligned} \quad (7.24)$$

Аналогично

$$e^{i\alpha \hat{Z}/2} \hat{Y} e^{-i\alpha \hat{Z}/2} = \hat{X} \sin \alpha + \hat{Y} \cos \alpha. \quad (7.25)$$

Используя соотношения (7.23) и (7.25), запишем уравнение Шредингера (7.22) в более простом виде:

$$\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} = -i\frac{(\omega_0 - \omega)}{2}\widehat{Z}|\psi\rangle - i\frac{\omega_1}{2}\widehat{X}|\psi\rangle. \quad (7.26)$$

Решение этого уравнения выглядит следующим образом:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i((\omega_0 - \omega)\widehat{Z}/2 + \omega_1\widehat{X}/2)t}|\psi(0)\rangle. \quad (7.27)$$

Мы получили решение уравнения Шредингера для спина, который находится в двух скрещенных полях: постоянном и переменном. Чтобы понять физический смысл этого решения, рассмотрим два предельных случая.

#### *a) Переменное магнитное поле выключено*

$$B_1 = 0, \omega = 0,$$

$$\omega_1 \sim B_1 = 0.$$

В этом случае из (7.19) получаем, что  $|\varphi(t)\rangle = |\psi(t)\rangle$  и из (7.27) имеем:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega_0 t \widehat{Z}/2}|\psi(0)\rangle. \quad (7.28)$$

Оператор поворота вокруг оси  $z$  действует на вектор начального состояния  $|\psi(0)\rangle = |\varphi(0)\rangle$ . С помощью вектора состояния  $|\psi(t)\rangle$  можно вычислить средние значения операторов, которые соответствуют средним значениям физических величин.

Пусть начальное состояние задано в виде

$$|\varphi(0)\rangle = |\psi(0)\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle. \quad (7.29)$$

Этому состоянию соответствует вектор Блоха с  $\theta = \frac{\pi}{2}, \varphi = 0$ .

Вычислим среднее значение проекции спина на ось  $z$  в момент времени  $t = 0$ :

$$\langle S_z \rangle_{t=0} = \frac{\hbar}{2}\langle \widehat{Z} \rangle = 0, \quad (7.30)$$

так как  $\langle 0|\widehat{Z}|0\rangle = 1, \langle 1|\widehat{Z}|1\rangle = -1$ .

Проекция на другие оси в начальный момент времени равны:

$$\langle S_x \rangle_{t=0} = \frac{\hbar}{2}\langle \widehat{X} \rangle = \frac{\hbar}{2}, \quad (7.31)$$

$$\langle S_y \rangle_{t=0} = \frac{\hbar}{2}\langle \widehat{Y} \rangle = 0. \quad (7.32)$$

Полученный результат означает, что при  $t = 0$  спин направлен вдоль оси  $x$ .

Запишем вектор состояния в момент времени  $t$ . Используя формулу (7.28), имеем

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-i\frac{\omega_0 t}{2}\hat{Z}} \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} = \left( \cos \frac{\omega_0 t}{2} \hat{I} - i \sin \frac{\omega_0 t}{2} \hat{Z} \right) \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} = \\ &= \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \cos \frac{\omega_0 t}{2} - i \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \sin \frac{\omega_0 t}{2}. \end{aligned} \quad (7.33)$$

Вычислим среднее значение оператора  $\hat{X}$  в момент  $t$ :

$$\begin{aligned} \langle X \rangle_t &= \left( \frac{\langle 0| + \langle 1|}{\sqrt{2}} \cos \frac{\omega_0 t}{2} + i \frac{\langle 0| - \langle 1|}{\sqrt{2}} \sin \frac{\omega_0 t}{2} \right) \hat{X} \cdot \\ &\cdot \left( \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \cos \frac{\omega_0 t}{2} - i \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \sin \frac{\omega_0 t}{2} \right), \end{aligned} \quad (7.34)$$

используя  $\hat{X}|0\rangle = |1\rangle$ ,  $\hat{X}|1\rangle = |0\rangle$  и учитывая ортонормированность базисных векторов, получим

$$\langle \hat{X} \rangle_t = \cos^2 \frac{\omega_0 t}{2} - \sin^2 \frac{\omega_0 t}{2} = \cos \omega_0 t. \quad (7.35)$$

Аналогично

$$\langle \hat{Y} \rangle_t = \sin \omega_0 t. \quad (7.36)$$

Таким образом, мы показали, что вектор спина вращается с угловой скоростью  $\omega_0$  вокруг оси  $z$ , вдоль которой направлен вектор постоянного магнитного поля  $\mathbf{B}_0$ .

**б) Резонанс** Рассмотрим теперь второй предельный случай — случай резонанса:  $\omega = \omega_0$ . Решение (7.27) в этом случае принимает вид:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega_1 t \hat{X}/2} |\psi(0)\rangle, \quad (7.37)$$

и, с учетом (7.19), имеем окончательно искомый вектор состояния

$$|\varphi(t)\rangle = e^{-i\omega_0 t \hat{Z}/2} e^{-i\omega_1 t \hat{X}/2} |\psi(0)\rangle, \quad (7.38)$$

Вектор Блоха  $|\varphi(t)\rangle$ , (7.38), совершает быстрое осцилляционное движение — прецессию вокруг оси  $z$  по часовой стрелке с частотой  $\omega = \omega_0$ . Во вращающейся с частотой  $\omega_0$  системе отсчета вектор Блоха задается формулой (7.37).

Оператор  $\exp(-i\omega_1 \hat{X}/2)$  в формулах (7.37) и (7.38) осуществляет поворот вектора Блоха на блоховской сфере вокруг оси  $x$ . Таким образом, при наличии переменного магнитного поля, направленного вдоль  $x$  и выполнении условия резонанса  $\omega = \omega_0$  можно осуществить

поворот вектора Блоха вокруг оси  $x$  на угол  $\omega_1 t$  по часовой стрелке за время  $t$ . При наличии переменного поля направленного вдоль оси  $y$  можно осуществить поворот вокруг оси  $y$ . В результате появляется возможность совершать любые повороты вектора Блоха на сфере Блоха, т.е. реализовать любую однокубитовую операцию.

Управлять кубитом, то есть фактически контролировать угол поворота вектора Блоха в эксперименте, можно подбором параметров  $\omega_0$ ,  $\omega_1$  и варьируя интервал времени  $t$ , подбирая импульсы магнитных полей нужной амплитуды и длительности. На этих принципах основана хорошо развитая техника ядерного магнитного резонанса (ЯМР), которая используется при квантовых вычислениях в спиновых квантовых компьютерах. В квантовых компьютерах, основанных на ионах, управление осуществляется электромагнитным полем лазерных импульсов (см. п. 8.3.2).

## Глава 8

# МАТРИЦА ПЛОТНОСТИ. ДЕКОГЕРЕНЦИЯ КУБИТА. ЛАЗЕРНАЯ ГЕНЕРАЦИЯ И НЕСТАЦИОНАРНЫЕ КОГЕРЕНТНЫЕ АТОМНЫЕ ПРОЦЕССЫ. КВАНТОВЫЕ ИЗМЕРЕНИЯ

Состояние кубита, изолированного от окружения, называется *чистым состоянием*. В предыдущей главе мы изучали свойства именно такого, идеализированного кубита, используя для описания чистых состояний вектор состояния. Однако, кубит никогда не бывает изолированным от влияния окружения. Состояние кубита, взаимодействующего с окружением, называется *смешанным состоянием*. В настоящей главе, для описания смешанного состояния реального кубита, мы вводим аппарат матрицы плотности. В рамках этого подхода, вводится и изучается важная концепция декогеренции кубита — необратимой релаксации когерентного, суперпозиционного состояния кубита благодаря случайным воздействиям окружения. В устройствах квантовой обработки информации декогеренция кубитов играет деструктивную роль.

Напротив, в таких квантовых устройствах, как лазеры, также использующих двухуровневые атомы, релаксация атомной подсистемы играет конструктивную роль. Мы рассмотрим вопрос о том, как двухуровневые атомы функционируют в лазере и проведем сравнение с когерентным атомным процессом, используемым при проведении квантовых вычислений.

При измерении состояния кубита, он взаимодействует с макроскопически большим измерительным устройством, что также приводит к декогеренции кубита. В этой главе вводятся постулаты теории измерений кубита, позволяющие предсказывать результаты измерений. Рассмотрены конкретные примеры измерений спинового кубита. Декогеренция кубитов при их эволюции и измерении является одним из главных препятствий на пути создания квантовых компьютеров и квантовых алгоритмов (см. гл. 11).

### 8.1. Уравнения эволюции двухуровневой системы

До сих пор мы изучали идеализированные квантовые объекты. Число степеней свободы их было мало (у кубита их две) и взаимодей-

ствием их с окружающей средой пренебрегалось. Такие системы, называемые динамическими, описываются с помощью волновой функции или, в матричной квантовой механике, вектором состояния. Состояния, описываемые волновой функцией или вектором состояния, называются *чистыми состояниями*.

Для вычисления средних значений операторов в чистом состоянии удобно также ввести оператор плотности кубита по формуле  $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ , или

$$\hat{\rho} = a^*a|0\rangle\langle 0| + ab^*|0\rangle\langle 1| + ba^*|1\rangle\langle 0| + b^*b|1\rangle\langle 1|. \quad (8.1)$$

Среднее оператора  $\hat{Z}$ , например, вычисляется как след (Sp) от  $\hat{\rho}Z$ :

$$\langle\hat{Z}\rangle = Sp(\hat{\rho}Z) = \langle 0|\hat{\rho}|0\rangle\langle 0|Z|0\rangle + \langle 1|\hat{\rho}|1\rangle\langle 1|Z|1\rangle = a^*a - b^*b. \quad (8.2)$$

Аналогично,

$$\langle\hat{X}\rangle = ab^* + b^*a, \quad \langle\hat{Y}\rangle = i(ab^* - ba^*), \quad (8.3)$$

Отметим, что  $\langle\hat{X}\rangle$ ,  $\langle\hat{Y}\rangle$ ,  $\langle\hat{Z}\rangle$  совпадают с проекциями вектора Блоха  $\lambda_x$ ,  $\lambda_y$  и  $\lambda_z$  (ср. с (7.3)). Таким образом, средние значения операторов в чистом состоянии выражаются через билинейные комбинации коэффициентов  $a$  и  $b$ .

Однако, кубиты не являются изолированными идеальными объектами. Они взаимодействуют с окружающим миром. Это взаимодействие ведет к релаксации суперпозиционного квантового состояния кубита. При построении квантовых компьютеров и квантовых каналов связи взаимодействие кубитов с окружением играет деструктивную роль и создает трудности при их практической реализации. Следует отметить, что имеются квантовые приборы, использующие двухуровневые системы, в которых взаимодействие с окружением играет конструктивную роль, более того, является необходимым условием их функционирования. Наиболее ярким примером таких устройств является лазер. Мы рассмотрим принципы работы лазера в разделе 8.3.

Окружающая кубит среда — это система с огромным числом степеней свободы (например, с  $N \sim 10^{23}$  числом колеблющихся атомов в  $1\text{ см}^3$  в твердом теле). Ее называют термостатом. Состояния термостата описываются статистически с помощью функции распределения  $f(\dots y_i \dots)$ , где  $y_i$  — координаты и импульсы частиц термостата ( $1 \leq i \leq N$ ,  $N \gg 1$ ). Взаимодействие кубита с термостатом приводит к тому, что его вектор состояния становится зависимым от переменных термостата:

$$|\psi\rangle = a(\dots y_i \dots)|0\rangle + b(\dots y_i \dots)|1\rangle,$$

т.е. является случайной величиной. Состояние кубита, взаимодействующего с термостатом, называется *смешанным состоянием* и описы-

вается не вектором состояния, а так называемой матрицей плотности. Введем матрицу плотности двухуровневой системы следующим образом. Усреднение оператора (8.1) по переменным термостата (обозначаемое чертой сверху) определяет оператор матрицы плотности

$$\hat{\rho} = \rho_{00}|0\rangle\langle 0| + \rho_{01}|0\rangle\langle 1| + \rho_{10}|1\rangle\langle 0| + \rho_{11}|1\rangle\langle 1|, \quad (8.4)$$

где элементы матрицы плотности двухуровневой системы есть

$$\rho_{00} = \overline{a^*a}, \quad \rho_{01} = \overline{b^*a}, \quad \rho_{10} = \overline{a^*b}, \quad \rho_{11} = \overline{b^*b}. \quad (8.5)$$

Получим уравнения для диагональных и недиагональных элементов матрицы плотности двухуровневой системы.

Выключим сначала взаимодействие кубита с термостатом, т.е. рассмотрим чистое состояние. Гамильтониан кубита

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (8.6)$$

где оператор  $\hat{H}_0$  имеет два собственных вектора  $|0\rangle$  и  $|1\rangle$ , а  $\hat{V}$  — оператор взаимодействия с магнитным или электромагнитным полем, управляющим эволюцией кубита (см. главу 7). Вектор состояния кубита  $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$  подчиняется уравнению Шредингера

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

Подставляя  $|\psi\rangle$ , имеем

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

отсюда

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial a}{\partial t} &= a\langle 0|\hat{H}|0\rangle + b\langle 0|\hat{H}|1\rangle, \\ i\hbar \frac{\partial b}{\partial t} &= a\langle 1|\hat{H}|0\rangle + b\langle 1|\hat{H}|1\rangle, \end{aligned}$$

где  $\langle m|\hat{H}|n\rangle = H_{mn}$  — матричный элемент оператора Гамильтона (8.6). Используем то, что

$$\begin{aligned} H_0|0\rangle &= E_0|0\rangle, \\ H_0|1\rangle &= E_1|1\rangle. \end{aligned}$$

Будем считать, что  $E_0 > E_1$ <sup>1)</sup>, обозначим  $V_{01} = \langle 0|V|1\rangle$ ,  $V_{10} = \langle 1|V|0\rangle$ . Предполагается, что  $V_{00} = V_{11} = 0$  (см. п. 8.1.2). Тогда

<sup>1)</sup> Отметим, что здесь и далее, в соответствии с общепринятыми обозначениями состояний на блоховской сфере (рис. 7.1), индекс «1» относится к нижнему состоянию, а индекс «0» к верхнему (в отличие от обозначения атомных энергетических уровней (п. 3.1.1), где верхнему уровню соответствовал индекс «2».)

$$i\hbar \frac{\partial a}{\partial t} = aE_0 + bV_{01}, \quad (8.7)$$

$$-i\hbar \frac{\partial b^*}{\partial t} = b^*E_1 + a^*V_{10}^*. \quad (8.8)$$

Перейдем к билинейным комбинациям коэффициентов  $a$  и  $b$ :

$$\begin{aligned} \rho_{00} &= a^*a, & \rho_{10} &= a^*b, \\ \rho_{01} &= b^*a, & \rho_{11} &= b^*b. \end{aligned}$$

Для краткости мы обозначаем билинейные комбинации коэффициентов теми же символами, что и элементы матрицы плотности (8.5). Умножая (8.7) на  $b^*$  и (8.8) на  $a$  и, вычитая из первого уравнения второе, получаем уравнение для недиагональной комбинации

$$\frac{\partial \rho_{01}}{\partial t} + i\omega_{01}\rho_{01} = \frac{iV_{01}}{\hbar}(\rho_{00} - \rho_{11}),$$

где  $\omega_{01} = \frac{E_0 - E_1}{\hbar}$  — частота перехода между двумя состояниями  $E_0$  и  $E_1$ .

Аналогично получаем уравнение для диагональной комбинации

$$\frac{\partial \rho_{00}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}(V_{10}\rho_{01} - V_{01}\rho_{10}). \quad (8.9)$$

В силу нормировки  $\rho_{00} + \rho_{11} = 1$ . Введем разность населенностей  $\rho_{00} - \rho_{11} = D$  (разность вероятностей нахождения кубита на уровнях  $E_0$  и  $E_1$ ).

Тогда из (8.9) имеем

$$\frac{\partial D}{\partial t} = \frac{2i}{\hbar}(V_{10}\rho_{01} - V_{01}\rho_{10}) \quad (8.10)$$

и кроме того

$$\frac{\partial \rho_{01}}{\partial t} + i\omega_{01}\rho_{01} = \frac{iV_{01}}{\hbar}D. \quad (8.11)$$

Уравнения (8.10) и (8.11) составляют замкнутую систему уравнений, поскольку  $\rho_{10} = \rho_{01}^*$ . Эти два уравнения эквивалентны уравнению для вектора состояния

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = (H_0 + V) |\psi\rangle.$$

Уравнения (8.10) и (8.11) описывают временную эволюцию любой двухуровневой квантовой системы в чистом состоянии. Рассмотрим в качестве примеров спин и двухуровневый атом.

**8.1.1. Уравнения эволюции спина в скрещенных магнитных полях.** В случае спина

$$H_0 = B_0 \mu_B \hat{Z}, \quad E_0 = B_0 \mu_B,$$

$$E_1 = -B_0 \mu_B, \quad \omega_{01} = \frac{2B_0 \mu_B}{\hbar} \equiv \omega_0,$$

$$V = B_1 \mu_B (\hat{X} \cos \omega t + \hat{Y} \sin \omega t), \quad V_{01} = \frac{\hbar \omega_1}{2} e^{-i\omega t},$$

где  $\omega_1$  задается формулой (7.15). С этими параметрами уравнения (8.10) и (8.11) становятся эквивалентными уравнению (7.17) из главы 7.

Однако, решение уравнений (8.10) и (8.11) и вычисление средних значений операторов гораздо проще, чем решение операторного уравнения (7.17). Продемонстрируем это на примере эволюции спина в постоянном магнитном поле ( $H_0 \neq 0, V = 0$ ).

Пусть начальное состояние задано в виде (7.29):  $|\psi(0)\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ , т.е.  $\theta(0) = \pi/2, \varphi(0) = 0$  и  $|a(0)| = |b(0)| = 1/\sqrt{2}$ . Из (8.11) имеем

$$\rho_{01}(t) = (b^* a)_t = \rho_{01}(0) e^{-i\omega_{01} t} = \frac{1}{2} e^{-i\omega_{01} t}. \quad (8.12)$$

Среднее значение оператора  $\hat{X}$  в момент времени  $t$  есть

$$\begin{aligned} \langle \hat{X} \rangle_t &= (a^* \langle 0| + b^* \langle 1|) \hat{X} (a|0\rangle + b|1\rangle) = \\ &= a^* b + \text{к.с.} = 2 \operatorname{Re}(b^* a)_t = \cos \omega_{01} t. \end{aligned} \quad (8.13)$$

Аналогично  $\langle \hat{Y} \rangle_t = \sin \omega_{01} t$ .

Вектор спина вращается в плоскости  $z = 0$  вокруг оси  $z$  по часовой стрелке. Этой картине соответствует вращение вектора Блоха. Из (7.3) следует, что  $\lambda_z(t) = 0, \lambda_x(t) = \cos \omega_{01} t, \lambda_y(t) = \sin \omega_{01} t$ . Вектор Блоха вращается вокруг оси  $z$  по часовой стрелке, оставаясь в экваториальной плоскости. В случае, когда  $\lambda_z(t) = D(t) > 0$  (или  $\lambda_z(t) < 0$ ) аналогичное вращение совершает проекция блоховского вектора на плоскость  $\lambda_z = 0$  (рис. 7.1). Таким образом, свободному ( $V_{01} = 0$ ) кубиту, представленному спином в постоянном магнитном поле или двухуровневым атомом (см. п. 8.1.2), в чистом, суперпозиционном ( $\rho_{01} \neq 0$ ) состоянии присуще постоянное внутреннее осцилляционное движение с частотой  $\omega_{01}$  (выражаясь поэтически: у кубита есть «сердце», бьющееся постоянно с частотой  $\omega_{01}$ ). Это незатухающее движение есть следствие колебательного характера уравнения (8.11) для свободного кубита ( $V_{01} = 0$ ) в чистом состоянии. В базисных состояниях  $|0\rangle$  и  $|1\rangle$  осцилляций нет. Как мы увидим, взаимодействие кубита с термостатом вызывает необратимое разрушение этого колебательного движения (см. (8.2.2)).

**8.1.2. Уравнения эволюции двухуровневого атома в электромагнитном поле.** В случае двухуровневого атома

$$V = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E},$$

где  $\mathbf{d} = e\mathbf{r}$  — дипольный момент электрона в атоме,  $\mathbf{r}$  — оператор радиуса-вектора электрона относительно ядра,  $e$  — заряд электрона,

$$\omega_{01} = \frac{E_0 - E_1}{\hbar},$$

$E_0$  и  $E_1$  энергии верхнего и нижнего уровней в атоме.

Матричные элементы  $V_{01} = -\mathbf{d}_{01} \cdot \mathbf{E}$ ,  $V_{10} = V_{01}^*$ ,  $d_{01} = e \int \varphi_0(\mathbf{r}) \mathbf{r} \varphi_1(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ , где  $\varphi_0$  и  $\varphi_1$  — собственные функции оператора  $H_0$ , функция  $\varphi_0(\mathbf{r}) = -\varphi_0(-\mathbf{r})$  — нечетная, функция  $\varphi_1(\mathbf{r}) = \varphi_1(-\mathbf{r})$  — четная. Диагональные элементы  $V_{00} = V_{11} = 0$ . Мы рассмотрим эволюцию системы двухуровневых атомов, взаимодействующих с электромагнитным полем при лазерной генерации (п. 8.3.1) и в нестационарных когерентных атомных процессах (п. 8.3.2).

## 8.2. Учет взаимодействия кубита с окружающей средой. Матрица плотности и декогеренция кубита

При наличии взаимодействия кубита с термостатом гамильтониан имеет вид

$$H = H_0 + V + W, \quad (8.14)$$

где  $W = W(\dots y_i \dots)$  — гамильтониан взаимодействия кубита с термостатом,  $y_i$  — переменные термостата, описываемые функцией распределения  $f(\dots y_i \dots)$ .

Теперь вместо уравнения (8.11) имеем

$$\frac{\partial \rho_{01}}{\partial t} + i\omega_{01} \rho_{01} = \frac{iV_{01}}{\hbar} D + \frac{iW_{01}(\dots y_i \dots)}{\hbar} D, \quad (8.15)$$

где  $W_{01}$  — матричный элемент гамильтониана взаимодействия кубита с термостатом. Билинейные комбинации  $\rho_{01} = \rho_{01}(\dots y_i \dots)$  и  $D = D(\dots y_i \dots)$  зависят от переменных термостата. Матрица плотности кубита  $\bar{\rho}_{01} = \int \rho_{01}(\dots y_i \dots) f(\dots y_i \dots) dy_i$ ,  $\bar{D} = \int D(\dots y_i \dots) f(\dots y_i \dots) dy_i$ , где интегрирование производится по всем переменным термостата. Будем в дальнейшем для простоты обозначать недиагональный  $\bar{\rho}_{01}$  и диагональный  $\bar{D} = \bar{\rho}_{00} - \bar{\rho}_{11}$  элементы матрицы плотности как  $\rho_{01}$  и  $D$ . Тогда из (8.15) получаем уравнение для недиагонального элемента матрицы плотности

$$\frac{\partial \rho_{01}}{\partial t} + i\omega_{01} \rho_{01} = \frac{iV_{01}}{\hbar} D + \frac{i}{\hbar} \overline{W_{01} D}. \quad (8.16)$$

В это уравнение входит коррелятор  $\overline{W_{01}D}$ . Надо получить уравнение для этого коррелятора, в которое будет входить коррелятор более высокого порядка и так далее. На определенном этапе эту цепочку уравнений для корреляторов расцепляют и получают замкнутое уравнение для  $\rho_{01}$ . Таким выводом уравнения для матрицы плотности занимается квантовая статистическая механика (см., например, [6]).

Можно, однако, проанализировать эту проблему качественно, пользуясь аналогией уравнения (8.16) с уравнением классического маятника.

**8.2.1. Колебательное уравнение пружинного маятника.** Рассмотрим систему, состоящую из пружины жесткостью  $k$ , на одном конце которой находится груз массой  $m$ , а второй закреплен (рис. 8.1). Груз может скользить по поверхности вдоль оси  $x$ . Уравнение колебаний имеет следующий вид

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x = 0, \quad (8.17)$$

где  $\omega_0^2 = \frac{k}{m}$ . Отсутствие трения — это идеализация. В реальности на грузик будет действовать сила трения. С учетом трения, уравнение колебаний (8.17) изменится на

$$\ddot{x} + 2\gamma\dot{x} + \omega_0^2 x = 0, \quad (8.18)$$

где  $\gamma > 0$  — коэффициент трения. Решения уравнений (8.17) и (8.18) описывают качественно различные типы поведения недиссипативной (без трения) и диссипативной (с трением) систем: незатухающие (рис. 8.2, а) и экспоненциально затухающие (рис. 8.2, б) колебания.

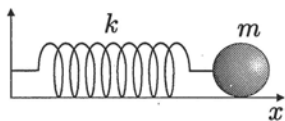


Рис. 8.1. Пружинный маятник

**8.2.2. Уравнения для матрицы плотности и декогеренция кубита.** Уравнение (8.16) — это колебательное уравнение первого порядка (частота колебаний  $\omega_{01}$ ). Если пренебречь в нем последним членом, то получим уравнение незатухающих колебаний (член с  $V_{01}D$  играет роль вынуждающей силы). Можно показать, что если положить в (8.16) правую часть равной нулю, то переменная  $P = 2\text{Re}\rho_{01} = \rho_{01} + \rho_{10}$  подчиняется уравнению незатухающих колебаний второго порядка

$$\ddot{P} + \omega_{01}^2 P = 0,$$

аналогичному уравнению колебаний маятника (8.17). По аналогии с уравнением маятника с затуханием (8.18) мы можем ожидать, что влияние термостата («трение»), описываемое последним членом в (8.16), сведется к замене его релаксационным членом. Тогда уравнение (8.16) приобретает вид

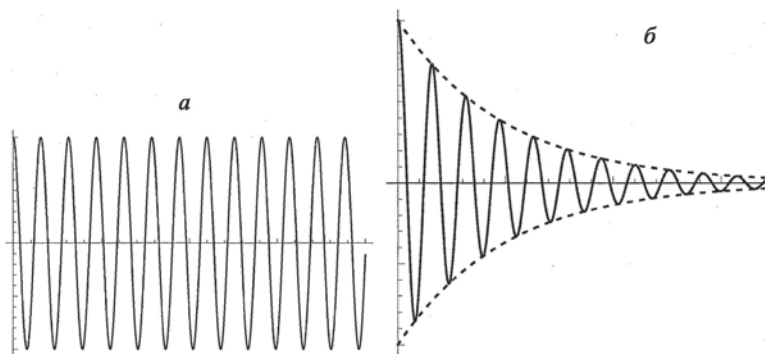


Рис. 8.2. а) Незатухающие колебания в системе без трения (качественное поведение решения уравнения (8.17)); б) затухающие колебания в системе с трением (качественное поведение решения уравнения (8.18)). Затухание происходит на характеристическом времени  $\gamma^{-1}$

$$\frac{\partial \rho_{01}}{\partial t} + i\omega_{01}\rho_{01} + \frac{1}{T_2}\rho_{01} = \frac{iV_{01}}{\hbar}D. \quad (8.19)$$

Характерное время затухания колебаний  $T_2$  называется временем поперечной релаксации. За это время кубит «забывает» начальное значение недиагонального элемента матрицы плотности, поскольку решение уравнения (8.19), если занулить вынуждающую силу, имеет вид

$$\rho_{01}(t) = \rho_{01}(0)e^{-i\omega_{01}t - t/T_2}.$$

В частности, поскольку  $\rho_{01}(0) = |\rho_{01}(0)|e^{i\varphi(0)}$ , на характерном времени  $T_2$  начальная фаза кубита  $\varphi(0)$  забывается.

Релаксация недиагональных элементов матрицы плотности  $\rho_{01}$  и  $\rho_{10}$  к нулю, вследствие взаимодействия кубита с окружением, приводит к исчезновению суперпозиционного состояния. Это видно из формулы (8.4). Если положить в ней  $\rho_{01} = \rho_{10} = 0$ , то оператор матрицы плотности кубита становится диагональным:  $\hat{\rho} = \rho_{00}|0\rangle\langle 0| + \rho_{11}|1\rangle\langle 1|$ ,  $\rho_{00} + \rho_{11} = 1$ , что соответствует нахождению кубита с вероятностями  $\rho_{00}$  и  $\rho_{11}$  в базисных состояниях  $|0\rangle$  и  $|1\rangle$ . Таким образом на временах  $T_2$  кубит превращается в классический бит. Такой процесс разрушения суперпозиционного состояния кубита называется *декогеренцией* (или декогерентизацией) кубита.

Аналогично, учет влияния окружения (термостата) в уравнении (8.10) приводит к уравнению для разности населенностей  $D = \bar{\rho}_{00} - \bar{\rho}_{11}$ :

$$\frac{\partial D}{\partial t} + \frac{1}{T_1}(D - D^0) = \frac{2i}{\hbar}(V_{10}\rho_{01} - V_{01}\rho_{10}). \quad (8.20)$$

Характеристическое время релаксации разности населенностей  $T_1$  называется временем продольной релаксации. Всегда  $T_2 \leq T_1$  (как пра-

вило  $T_2 \ll T_1$ ).  $D^0$  — равновесная разность населенностей: в системе, предоставленной самой себе ( $V_{10} = V_{01} = 0$ ), за время  $T_1$  происходит переход из начального состояния  $D = D(0)$  в равновесное состояние  $D = D^0$ . Если  $\hbar\omega_{01} \gg k_B T$ , то  $D^0 \approx -1$ .

Процесс декогеренции («деградации») кубита можно наглядно изобразить, используя представление кубита на Bloch-сфере.

Перейдем к медленно меняющейся переменной  $\tilde{\rho}_{01} = \rho_{01}e^{i\omega_{01}t}$ ,  $\tilde{V}_{01} = V_{01}e^{i\omega t}$  и рассмотрим случай точного резонанса  $\omega = \omega_{01}$ . Тогда из (8.19) и (8.20), для чистого состояния, в пренебрежении релаксацией ( $T_1 = T_2 = \infty$ ), получим систему уравнений

$$\frac{\partial \tilde{\rho}_{01}}{\partial t} = \frac{i\tilde{V}_{01}}{\hbar} D, \quad (8.21a)$$

$$\frac{\partial D}{\partial t} = \frac{2i}{\hbar} (\tilde{V}_{10}\tilde{\rho}_{01} - \tilde{V}_{01}\tilde{\rho}_{10}), \quad (8.21b)$$

отсюда

$$\frac{\partial}{\partial t} (\tilde{\rho}_{10}\tilde{\rho}_{01}) = \frac{i}{\hbar} (\tilde{V}_{01}\tilde{\rho}_{10} - \tilde{V}_{10}\tilde{\rho}_{01}) D,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} D^2 = -\frac{4i}{\hbar} (\tilde{V}_{01}\tilde{\rho}_{10} - \tilde{V}_{10}\tilde{\rho}_{01}) D.$$

Таким образом

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

т.е. имеет место закон сохранения

$$D^2(t) + 4\tilde{\rho}_{01}(t)\tilde{\rho}_{10}(t) = \text{const} = 1. \quad (8.22a)$$

Для Bloch-вектора с компонентами  $\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z$  (см. 7.3) имеют место соотношения:

$$\lambda_z = \rho_{00} - \rho_{11} = D \quad (8.22b)$$

и

$$\lambda_x^2 + \lambda_y^2 = 4\tilde{\rho}_{01}\tilde{\rho}_{10}. \quad (8.22c)$$

Таким образом, закон сохранения в форме (8.22a) — это закон сохранения длины Bloch-вектора кубита, находящегося в чистом состоянии. Поскольку в смешанном состоянии происходит декогеренция кубита ( $\tilde{\rho}_{10}(t) = \tilde{\rho}_{10}(0)e^{-t/T_2}$ ,  $\tilde{\rho}_{01}(t) = \tilde{\rho}_{01}(0)e^{-t/T_2}$ ), то со временем, благодаря декогеренции, Bloch-сфера превращается в эллипсоид (рис. 8.3) и на временах  $t \sim T_2$  кубит превращается в классический бит. Затем на временах  $t \sim T_1$  ( $T_1 \gg T_2$ ) происходит релаксация бита из состояния  $|0\rangle$  в основное состояние  $|1\rangle$  (рис. 8.3)

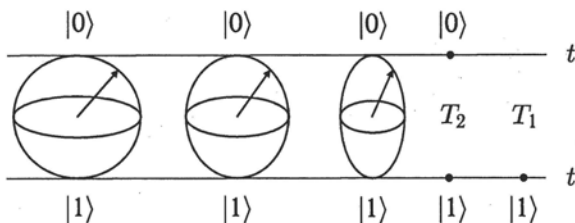


Рис. 8.3. Деградация кубита в классический бит на времени декогеренции  $T_2$  ( $T_2 \ll T_1$ ) и релаксация бита из состояния  $|0\rangle$  в состояние  $|1\rangle$  на времени  $T_1$

Для квантового компьютера такое поведение кубита деструктивно. Декогеренция кубита представляет собой серьезную проблему для физической реализации квантового компьютера, поскольку все квантовые вычисления должны быть закончены на временах  $t < T_2$ , когда кубит сохраняет свою когерентность<sup>1)</sup>. Аналогичная проблема декогеренции возникает и в квантовой коммуникации — передаче информации с помощью кубитов (фотонов) по квантовому каналу связи (световоду) на большое расстояние. Эти вопросы рассматриваются в главе 11.

### 8.3. Лазерная генерация и нестационарные когерентные атомные процессы в системе двухуровневых атомов, взаимодействующих с электромагнитным полем

В настоящем разделе мы рассмотрим принцип работы лазера — квантового устройства, использующего двухуровневые атомы. При генерации когерентного электромагнитного излучения в лазере взаимодействие двухуровневых атомов с окружением играет конструктивную роль, более того, является необходимым условием генерации.

Помимо режима лазерной генерации, реализуемого на временах  $t > T_2$ , рассматриваются основные особенности нестационарных когерентных атомных процессов, происходящих в той же самой системе двухуровневых атомов, взаимодействующих с электромагнитным полем, но на временах  $t < T_2$ . Этот режим является режимом функционирования системы когерентных кубитов, реализуемых двухуровневыми атомами, при проведении квантовых вычислений на временах  $t < T_2$ .

**8.3.1. Лазер.** В лазере система  $N$  двухуровневых атомов (например, примесных центров в твердом теле) помещена в резонатор, образованный двумя параллельными зеркалами, сильно отражающими излучение, падающее на них (рис. 8.4). В рассматриваемой здесь демон-

<sup>1)</sup> Когерентность скоррелированного состояния  $n$  кубитов разрушается еще быстрее — на временах порядка  $T_2(n) = T_2/n$  (см. [14], с. 60), что налагает еще более жесткое требование на время вычислений:  $t < T_2(n)$ .

страционной схеме внешний поток энергии («накачка») инвертирует населенности рабочих уровней и поддерживает постоянной разность населенностей верхнего и нижнего уровней;  $D = \text{const} > 0$ . Переход атома в нижнее энергетическое состояние с энергией  $E_0$  сопровождается излучением фотона с частотой  $\omega_{01} = (E_0 - E_1)/\hbar$ . Атомные переходы могут совершаться спонтанно (без участия поля в резонаторе) и вынужденно (под действием поля в резонаторе). Сначала фотоны испускаются спонтанно во всех направлениях, но затем вынужденное излучение стимулирует преимущественное испускание фотонов в направлении, перпендикулярном зеркалам. Это обусловлено тем, что фотоны, испущенные в других направлениях, быстро, (со скоростью света) покидают рабочий объем лазера, в то время как фотоны, испущенные вдоль оси, отражаются от зеркал и многократно проходят рабочий объем вперед и назад. При вынужденном излучении фотон стимулирует порождение нового фотона, с той же поляризацией, частотой и тем же направлением распространения. Если скорость вынужденного излучения фотонов в рабочей среде превосходит скорость вывода фотонов из резонатора, то плотность энергии электромагнитного поля в резонаторе лавинообразно нарастает. Нелинейность системы двухуровневых атомов стабилизирует эту неустойчивость и в системе устанавливается стационарный режим лазерной генерации.

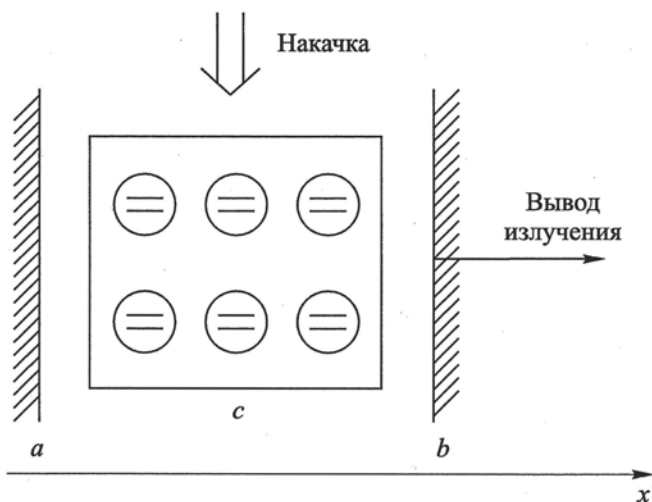


Рис. 8.4. Схема лазера.  $a$ ,  $b$  — отражающие зеркала резонатора,  $c$  — рабочая среда двухуровневых атомов. Внешний поток энергии (накачка) инвертирует атомы. Вывод излучения из резонатора осуществляется уменьшением коэффициента отражения одного из зеркал

Этот процесс описывается уравнениями для матрицы плотности двухуровневого атома (8.19) и (8.20) с учетом явного вида матричных элементов  $V_{01}$  и  $V_{10}$  для рассматриваемого случая взаимодействия двухуровневого атома с электромагнитным полем (разд. 8.1.2). Из (8.19) и (8.20) получаем уравнения

$$\frac{\partial \rho_{01}}{\partial t} + i\omega_{01}\rho_{01} + \frac{1}{T_2}\rho_{01} = -\frac{i\mathbf{d}_{01}\mathbf{E}}{\hbar}D, \quad (8.23)$$

$$\frac{\partial D}{\partial t} + \frac{1}{T_1}(D - D^0) = \frac{2i}{\hbar}(\mathbf{d}_{01}\rho_{10} - \mathbf{d}_{10}\rho_{01})\mathbf{E}. \quad (8.24)$$

Параметр  $D^0 > 0$  в уравнении (8.24) описывает внешнюю накачку. Это видно из стационарного решения этого уравнения при  $\mathbf{E} = 0$ . Тогда при  $\partial D/\partial t = 0$ , имеем  $D = D^0 > 0$ . В этом случае  $D^0$  — стационарная инверсная разность населенностей верхнего и нижнего уровней.

В (8.23) и (8.24)  $\mathbf{d}_{10}, \mathbf{d}_{01}$  — матричные элементы дипольного момента атома, обеспечивающие взаимодействие атома с электромагнитным полем с вектором напряженности  $\mathbf{E}$ . Такое описание атомной подсистемы с помощью матрицы плотности, а электромагнитного поля — классическим образом, с помощью вектора напряженности поля  $\mathbf{E}$ , называется полуклассическим приближением. Оно применимо, когда напряженность электромагнитного поля достаточно велика, так что можно пренебречь квантовыми флуктуациями поля, которые происходят благодаря дискретной природе квантов электромагнитного поля — фотонов (см. [7]). В лазерах и в нестационарных когерентных атомных процессах (см. п. 8.3.2) условие применимости полуклассического приближения выполняется.

Положим

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0(t)e^{-i(\omega_0 t - kx)} + \text{к.с.}, \quad (8.25)$$

где  $k = \omega_0/c$ ,  $c$  — скорость света в рабочей среде лазера<sup>1)</sup>,  $\mathbf{E}_0(t)$  — медленно меняющаяся векторная амплитуда поля в резонаторе, зависящая от времени (при  $t = 0$ ,  $E_0(0) = 0$ ). Предполагается, что  $\mathbf{E}_0 \parallel \mathbf{d}_{01}$ . Недиagonalный элемент матрицы плотности

$$\rho_{01}(t) = \tilde{\rho}_{01}(t)e^{-i(\omega_0 t - kx)} + \text{к.с.} \quad (8.26)$$

Изменение амплитуд  $\mathbf{E}_0(t)$  и  $\tilde{\rho}_{01}(t)$  — медленное по сравнению с периодом осцилляций  $2\pi/\omega_{01}$  и происходит на характерном времени вывода излучения из резонатора  $\gamma^{-1}$  (см. (8.29) и (8.30)). При условии  $T_2 \ll \gamma^{-1}$ , после подстановки (8.25) и (8.26) в (8.23), получаем

<sup>1)</sup> Отметим, что задание поля в виде бегущей волны требует более сложной (трехзеркальной) конструкции резонатора. Для простоты мы игнорируем это обстоятельство.

$$\tilde{\rho}_{01} = -\frac{i d_{01} \mathbf{E}_0}{\hbar T_2^{-1}} D. \quad (8.27)$$

Введем вектор поляризации среды как дипольный момент единицы объема среды

$$\mathbf{P} = n(\mathbf{d}_{10}\rho_{01} + \mathbf{d}_{01}\rho_{10}), \quad (8.28)$$

где  $n$  — концентрация атомов в рабочей среде.

Поле в резонаторе подчиняется уравнению Максвелла

$$\frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - c^2 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial x^2} = -4\pi \frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2}, \quad (8.29)$$

где  $\gamma$  — константа, учитывающая затухание поля благодаря выходу излучения из резонатора.

Подставляя (8.25) и (8.26) в (8.29) и пренебрегая малыми вторыми производными от медленных амплитуд  $E_0(t)$ ,  $\tilde{\rho}_{01}(t)$  и членом  $\tilde{\rho}_{10}(t) \sim \tilde{\rho}_{01}(t)(\omega_{01} T_2)^{-1} \ll \tilde{\rho}_{01}$ , получаем, с учетом (8.27), так называемое укороченное уравнение для медленной амплитуды поля в резонаторе<sup>1)</sup>

$$\left(\frac{d}{dt} + \frac{\gamma}{2}\right) E_0 = \frac{2\pi\omega_{01}|d_{01}|^2 n}{\hbar T_2^{-1}} E_0 D. \quad (8.30)$$

Пусть внешняя накачка поддерживает постоянство инвертированной разности населенностей:  $D = \text{const} > 0$  (величина  $D$  меньше  $D^0$  благодаря действию поля лазерной генерации — это так называемый эффект насыщения разности населенностей. Эффект насыщения следует из стационарного решения уравнения (8.24), но мы не будем в явном виде его рассматривать). Правая часть (8.30) задает скорость вынужденного излучения, а член с  $\gamma$  в левой части описывает скорость выхода излучения из резонатора. Приравнивание их друг другу определяет пороговое значение инверсии:

$$D_{\text{th}} = \frac{\hbar T_2^{-1} \gamma}{4\pi |d_{01}|^2 n \omega_{01}}. \quad (8.31)$$

Начальная амплитуда  $E_0(t=0)$  (начальное условие для уравнения (8.30)) может рассматриваться как амплитуда поля, флуктуационно возникшего в резонаторе благодаря спонтанному излучению. Если  $D < D_{\text{th}}$ , то флуктуация затухает со временем. Если же  $D > D_{\text{th}}$ , то флуктуация нарастает. Ее рост ограничивается нелинейностью двух-

<sup>1)</sup> Для получения уравнения (8.30) следует приравнивать мнимые члены в левой и правой частях (8.29), приравнивание действительных членов дает дисперсионное уравнение, которое связывает частоту поля и волновое число:  $k = \omega_{01}/c$  и определяет скорость света  $c$  в рабочей среде лазера.

уровневой системы (эффектом насыщения разности населенностей), в результате чего устанавливается стационарный режим генерации поля с постоянной амплитудой  $E_0 = \text{const}$ .

Таким образом, для того чтобы лазерная генерация имела место необходимо, чтобы инверсия превосходила пороговое значение  $D_{\text{th}}$  (8.31).

Конструктивную роль взаимодействия с термостатом (диссипации) в лазере раскрывает формула (8.27). Если диссипация достаточно велика ( $T_2 \ll \gamma^{-1}$ ), то недиагональный элемент матрицы плотности быстро подстраивается (т.е. имеет ту же фазу) под электромагнитное поле ( $\tilde{\rho}_{01} \sim E_0$ ), поэтому в уравнении Максвелла (8.29) источник излучения — поляризация  $\mathbf{P} \sim \mathbf{E}_0$ . Благодаря этому имеет место вынужденное излучение и в резонаторе развивается фотонная лавина.

Режим, задаваемый условием  $T_2 \ll \gamma^{-1}$ , в котором система двухуровневых атомов вынужденно излучает на временах  $t \gg T_2$ , можно назвать режимом декогеренции атомов (или просто декогерентным режимом). В этом режиме, атомные диполи (излучатели) «забывают» свои начальные фазы и подстраиваются под одну, коллективную фазу электромагнитного поля в резонаторе. Как мы увидим из дальнейшего, в квантовых компьютерах, напротив, реализуется когерентный режим функционирования двухуровневых систем: квантовые вычисления происходят на временах  $t < T_2$ .

Необходимо отдавать себе отчет в двойственности употребления термина «когерентность» как характеристики состояния системы «двухуровневые атомы плюс электромагнитное поле». Действительно, в лазере, диполи с изначально случайными фазами приобретают одну и ту же фазу электромагнитного поля. Это приводит к вынужденной генерации когерентного (с заданной фазой) излучения. Таким образом, здесь термин когерентность является характеристикой электромагнитного поля. Термин же «декогеренция» относится к атомной системе и характеризует процесс перехода атомной подсистемы из когерентного ( $t < T_2$ ) в некогерентное ( $t > T_2$ ) состояние.

Рассмотренный в настоящем разделе пример дает представление лишь об основных принципах работы лазера. Более детально с физикой лазеров можно ознакомиться в книге [7].

**8.3.2. Нестационарные когерентные процессы в системе двухуровневых атомов, взаимодействующих с электромагнитным полем.** Рассмотрим ту же систему двухуровневых атомов, которые взаимодействуют с электромагнитным полем в резонаторе, что и в случае лазера. Однако теперь длительность рассматриваемых процессов взаимодействия атомов с полем будет ограничена условием  $t < T_2$ , прямо противоположным условию, определяющему режим лазерной генерации ( $t > T_2$ ). Для простоты рассмотрим резонансный случай  $\omega = \omega_{01}$ .

При этих условиях, атомная подсистема описывается уравнениями (8.21a) и (8.21b), где  $\tilde{V}_{01} = V_{01} e^{i\omega t} = -\mathbf{d}_{01} \mathbf{E}_0$ .  $\mathbf{E}_0$  — медленно меняю-

щаяся векторная амплитуда поля, определенная соотношением (8.25). Уравнение для  $\mathbf{E}_0$  следует из уравнения Максвелла (8.29). Три уравнения (8.21a), (8.21b) и (8.29) составляют систему уравнений, описывающую нестационарные когерентные процессы в ансамбле двухуровневых атомов.

Чтобы получить представление об их характерных особенностях, рассмотрим относительно простой случай эволюции системы двухуровневых атомов в заданном резонансом электромагнитном поле:  $\mathbf{E}_0 = \text{const}$ , описываемой уравнениями (8.21a) и (8.21b). Для того, чтобы учесть влияние процессов декогеренции, восстановим в (8.21a) член с  $T_2$ . Тогда из (8.21a) и (8.21b) имеем систему уравнений:

$$\frac{\partial \tilde{\rho}_{01}}{\partial t} + \frac{\tilde{\rho}_{01}}{T_2} = -\frac{i \mathbf{d}_{01} \mathbf{E}_0}{\hbar} D, \quad (8.32)$$

$$\frac{\partial D}{\partial t} = \frac{2i}{\hbar} (\mathbf{d}_{01} \tilde{\rho}_{10} - \mathbf{d}_{10} \tilde{\rho}_{01}) \mathbf{E}_0. \quad (8.33)$$

Из (8.32) следует вспомогательное соотношение

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{T_2} \right) (\mathbf{d}_{01} \tilde{\rho}_{10} - \mathbf{d}_{10} \tilde{\rho}_{01}) = \frac{i 2 |\mathbf{d}_{01}|^2 \mathbf{E}_0}{\hbar} D. \quad (8.34)$$

Применяя оператор  $(\partial/\partial t + T_2^{-1})$  к обеим частям уравнения (8.33) и используя (8.34), получаем замкнутое уравнение для разности населенностей атомных уровней

$$\frac{\partial^2 D}{\partial t^2} + \frac{1}{T_2} D + \Omega^2 D = 0, \quad (8.35)$$

где  $\Omega = 2|\mathbf{d}_{01}\mathbf{E}_0|/\hbar$  — так называемая *частота Раби*. Мы получили уравнение гармонического осциллятора с затуханием. Качественный вид его решения показан на рис. 8.2. Рассмотрим сначала бездиссипативный режим ( $T_2^{-1} = 0$ ), который реализуется на малых временах  $t < T_2$  (рис. 8.2, а).

Пусть в начальный момент  $t = 0$  атомы находились в нижнем (основном) состоянии:  $D(0) = -1$ . Тогда решение уравнения (8.35), при  $T_2^{-1} = 0$ , имеет вид  $D(t) = -\cos \Omega t$ . Таким образом, в резонансном электромагнитном поле, на временах  $t < T_2$ , разность населенностей атомных уровней осциллирует с частотой  $\Omega$  (осцилляции Раби). На больших временах  $t > T_2$  осцилляции затухают (рис. 8.2, б).

Эти осцилляции вызваны периодическим вынужденным испусканием и поглощением излучения атомной системой: когда  $D > 0$ , атом излучает, а когда  $D < 0$ , атом поглощает. Осцилляции Раби имеют место и в случае одного атома, но тогда полуклассическое приближение не применимо и задача решается с помощью методов квантовой электродинамики.

Используя эффект осцилляций Раби, можно, с помощью лазерных импульсов различной длительности, управлять состоянием двухуров-

невого атома. Пусть в начальный момент  $t = 0$  атом находился в нижнем состоянии. В момент  $t = 0$  включается поле  $\mathbf{E}_0$  и существует в течение времени  $\tau_\pi = \pi/\Omega$  (лазерный  $\pi$ -импульс). Действием  $\pi$ -импульса атом переводится из основного ( $D(t=0) = -1$ ) в возбужденное ( $D(t = \pi/\Omega) = +1$ ) состояние. Лазерный  $\pi/2$ -импульс длительностью  $\tau_{\pi/2} = \pi/2\Omega$  переводит атом из основного состояния ( $D(0) = -1$ ) в суперпозиционное состояние ( $D(t = \pi/2\Omega) = 0$ ). Такие лазерные импульсы используются для физической реализации однокубитовых квантовых операторов, используемых в квантовых вычислениях (квантовые операторы см. в гл. 9).

Отметим, что осцилляции Раби происходят при условии сохранения длины блоховского вектора (формула (8.22)). При этом проекция блоховского вектора на ось  $z$  (см. (7.4)):  $\lambda_z = D(t) = \cos\theta(t)$ . Для рассмотренного выше случая  $D(t=0) = -1$  имеем  $\theta(t) = \pi + \Omega t$ . Таким образом, блоховский вектор двухуровневого атома в резонансном электромагнитном поле совершает вращение с угловой частотой  $\Omega = 2|\mathbf{d}_{01}\mathbf{E}_0|/\hbar$ , сохраняя информацию о начальной фазе  $\theta(0) = \pi$ . Аналогичное вращение совершает блоховский вектор спина в скрещенных постоянном и переменном магнитных полях (формула (7.37)). Частота Раби для спина из формулы (7.15) равна  $\omega_1 = 2B_1\mu_B/\hbar$  (Раби, 1937 г.).

Рассмотренный пример осцилляций Раби иллюстрирует характерные особенности когерентных (с сохранением фазы) атомных процессов: они происходят в среде двухуровневых атомов, индуцируются резонансными импульсами когерентного электромагнитного излучения, носят нестационарный характер, происходят на временах  $t < T_2$ , и сопровождаются обратимым обменом энергией между атомной и полевой подсистемами. К этому же классу индуцированных нестационарных когерентных атомных процессов относятся самоиндуцированная прозрачность: распространение в атомной среде коротких ( $\tau_p < T_2$ ) лазерных импульсов без уменьшения их амплитуды, затухание свободной индукции, фотонное эхо и другие. Индуцированные нестационарные когерентные атомные процессы рассмотрены в книге [10].

Сравним нестационарные когерентные атомные процессы с процессом лазерной генерации. Ключевая разница между этими двумя классами процессов в атомно-полевой системе может быть понята на основе анализа уравнения (8.32). В лазерном режиме ( $t > T_2$ ), мы пренебрегаем производной по времени в (8.32) и адиабатически исключаем недиагональный элемент матрицы плотности:  $\tilde{\rho}_{01} = -i\mathbf{d}_{01}\mathbf{E}_0 D/\hbar T_2^{-1}$  (см. также формулу (8.27) и далее). При этом атомные диполи забывают свои начальные фазы, поляризация среды «подстраивается» под поле и перестает быть динамической переменной системы. Адиабатическое исключение поляризации приводит к релаксационному уравнению первого порядка для амплитуды поля в резонаторе (8.30). Оно описывает необратимое поведение системы: амплитуда поля либо экспоненциально затухает во времени в случае  $D < D_{th}$ , либо экспоненциально нарастает в случае  $D > D_{th}$ .

В отличие от этого, в нестационарном когерентном атомном процессе ( $t < T_2$ ) недиагональный элемент матрицы плотности является динамической переменной системы и подчиняется уравнению  $\partial \tilde{\rho}_{01} / \partial t = -i d_{01} \mathbf{E}_0 D / \hbar$ . Это приводит к осцилляторному уравнению второго порядка для динамической переменной  $D$ , описывающему обратимую осцилляторную эволюцию системы с сохранением памяти о начальной фазе.

Отметим в заключение, что имеется еще один класс когерентных нестационарных атомных процессов, к которому относится так называемое сверхизлучение Дике. Для получения сверхизлучения, в беззеркальный рабочий объем, имеющий форму вытянутого цилиндра с длиной, много большей длины волны излучения, помещается макроскопически большое число  $N$  двухуровневых атомов с частотой перехода  $\omega_{01}$ . В начальный момент  $t = 0$  система атомов инвертируется, т.е. все атомы переводятся в верхнее энергетическое состояние 0 и в атомной подсистеме запасена энергия  $\hbar \omega_{01} N$ . Первоначально атомы, переходя в основное состояние 1, излучают спонтанно и некогерентно (со случайными фазами). Благодаря обмену виртуальными фотонами, между дипольными моментами атомов возникают корреляции и, спустя некоторое время, система  $N$  атомов начинает излучать когерентно, как единый диполь. Система выдает импульс излучения, направленный вдоль оси цилиндра, длительностью  $\tau_p \sim N^{-1}$  и интенсивностью  $I = \hbar \omega_{01} N / \tau_p \sim N^2$ . Благодаря такой, квадратичной, зависимости пиковой интенсивности излучения от числа атомов в системе  $N$ , данный кооперативный режим получил название *сверхизлучения Дике* (интенсивность спонтанного излучения пропорциональна числу атомов  $N$ ). Сверхизлучение Дике представляет собой беззеркальный метод получения когерентного импульсного излучения, альтернативный лазерному. Сверхизлучение Дике, а также другие кооперативные процессы в оптике рассмотрены в книге [11].

## 8.4. Квантовые измерения

Возвратимся к теме когерентной эволюции кубита, осуществляемой поворотами вектора Блоха на блоховской сфере (гл. 7).

В результате такой эволюции, вектор состояния  $|\psi\rangle$  оказывается в какой-то точке на сфере Блоха, т.е. представляет собой некую когерентную суперпозицию базисных состояний. Чтобы получить информацию об этом состоянии кубита, необходимо произвести измерение его характеристик.

Сама процедура измерения и его результаты определяются теорией квантовых измерений, которая строится на основе двух постулатов, дополнительных к постулатам квантовой механики. Можно сказать поэтому, что квантовая механика состоит из двух отдельных частей — теории эволюции квантовых состояний, описываемых волновой функцией (либо матрицей плотности), и теории измерений.

Рассмотрим экспериментальную установку по измерению проекции спина на какую-либо ось. На рис. 8.5 изображена установка Штерна–Герлаха для двух случаев: магнитное поле направлено вдоль оси  $z$  (а), и вдоль оси  $x$  (б). Гамильтониан для случая (а) имеет вид:  $H = -\mu_z B(z)$ . Оператором измеряемой величины является  $H = -\mu_z B(z)$ . Измерительным базисом являются собственные векторы  $|0\rangle$  и  $|1\rangle$  оператора измеряемой величины. Чтобы предсказать результаты измерения следует разложить вектор состояния кубита по базисным векторам:  $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ . Результаты измерения предсказываются с использованием двух постулатов измерения фон Неймана<sup>1)</sup>, сформулируем их.

- **Первый постулат квантовых измерений.** В результате измерения состояния кубита  $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$  с вероятностью  $|a|^2$  будет получено состояние  $|0\rangle$  и с вероятностью  $|b|^2$  — состояние  $|1\rangle$ .
- **Второй постулат квантовых измерений.** Если в результате измерения кубит оказался в каком-либо состоянии, то он остается в этом состоянии до нового измерения.

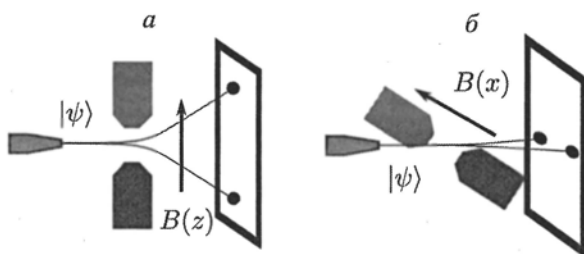


Рис. 8.5. Схема эксперимента по измерению спина. Неоднородное магнитное поле ориентировано вдоль оси  $z$  (а). Неоднородное магнитное поле ориентировано вдоль оси  $x$  (б)

Таким образом, измерение  $z$ -компоненты спина происходит следующим образом. Кубит находится в суперпозиционном состоянии

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle, \quad \text{где } |a|^2 + |b|^2 = 1. \quad (8.36)$$

При измерении состояния кубита мы получим одно из двух базисных состояний:

<sup>1)</sup> Джон фон Нейман — венгро-американский математик, сделавший важный вклад в квантовую физику, квантовую логику, функциональный анализ, теорию множеств, информатику, экономику и другие отрасли науки. Наиболее известен как праотец современной архитектуры компьютеров (так называемая архитектура фон Неймана), применением теории операторов к квантовой механике (алгебра фон Неймана).

$$\begin{aligned} |0\rangle, \quad S_z = +\frac{1}{2} & \quad \text{с вероятностью} \quad |a|^2, \\ |1\rangle, \quad S_z = -\frac{1}{2} & \quad \text{с вероятностью} \quad |b|^2, \end{aligned}$$

причем после измерения кубит остается в полученном при измерении состоянии. Происходит так называемый коллапс суперпозиционного состояния  $|\psi\rangle$  в одно из базисных состояний  $|0\rangle$  или  $|1\rangle$ , при этом происходит потеря информации. Таким образом, измерение представляет собой *необратимый* процесс декогеренции, который происходит благодаря взаимодействию кубита с макроскопически большим измерительным прибором во время измерения. Поэтому операция измерения является не унитарной.

Коллапс вектора состояния (волновой функции) представляет собой серьезную проблему для квантовых алгоритмов. В квантовом регистре, состоящем из  $n$  кубитов может содержаться большое количество информации. Но при измерении этого состояния регистра (т.е. при измерении состояния каждого из  $n$  кубитов), каждый кубит коллапсирует в одно из базисных состояний и мы извлекаем из каждого кубита лишь один бит информации. Кажется, что квантовые компьютеры не дают никаких преимуществ по сравнению с классическим компьютером, вследствие ограничения, налагаемого постулатом измерения. Но разработанные квантовые алгоритмы, обходят это ограничение (см. главу 11).

**8.4.1. Последовательные измерения кубита в ортогональных магнитных полях.** Рассмотрим теперь последовательную комбинацию установок Штерна–Герлаха с ортогональными магнитными полями (рис. 8.6). Блокируем один из выходов первой установки, оставив пучок частиц с одним значением проекции спина на ось  $z$ , например,  $S_z = 1/2$ . Направим этот пучок на вход второй установки с вектором магнитного поля, направленным вдоль оси  $x$  (рис. 8.6). Согласно классическим представлениям следует ожидать, что пучок атомов пройдет через вторую установку без отклонения, однако эксперимент показывает, что пучок снова расщепляется на два пучка одинаковой интенсивности.

Как квантовая механика объясняет этот результат?

При измерении  $S_x$  следует разложить измеряемый вектор состояния  $|\psi\rangle = |0\rangle$  по собственным векторам оператора измеряемой величины  $S_x$  и применить далее постулаты измерения. Собственными векторами оператора  $S_x = \text{NOT}$  являются векторы:

$$|+\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad S_x = +1/2,$$

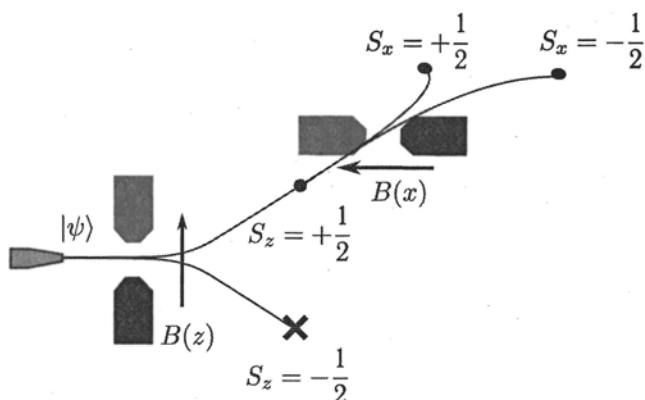


Рис. 8.6. Каскадные измерения на двух установках Штерна–Герлаха

$$|-\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad S_x = -1/2.$$

Разложение измеряемого вектора состояния по измерительному базису имеет вид

$$|0\rangle = \frac{|+\rangle + |-\rangle}{\sqrt{2}}.$$

В соответствии с постулатом измерения, при измерении получается состояние  $|+\rangle$ ,  $S_x = +\frac{1}{2}$  с вероятностью  $1/2$ , либо состояние  $|-\rangle$ ,  $S_x = -\frac{1}{2}$  с вероятностью  $1/2$ . Этот результат квантовой механики полностью подтверждается экспериментом. Рассмотренный пример показывает, насколько предсказания квантовой механики противоречат физической интуиции, выработанной классической физикой.

Квантовая механика — набор постулатов — рецептов предсказания результатов экспериментов. Эти рецепты прекрасно работают, но почему, никто не знает. Поэтому и говорят, что квантовую механику никто не понимает<sup>1)</sup>. Понимание квантовой механики — это привыкание к ней.

#### 8.4.2. Инициализация спинового кубита.

Как мы увидим из дальнейшего (см. главу 10), квантовые вычисления с помощью кубитов начинаются с перевода кубитов в заданное состояние  $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ , где  $a$  и  $b$  известны (инициализация кубитов). Теория квантовых измерений дает указание, как это можно сделать.

<sup>1)</sup> «Квантовую механику никто не понимает. Я не понимаю квантовую механику, мои студенты не понимают квантовую механику» (Ричард Фейнман).

«Квантовая механика — вычислительная черная магия» (Альберт Эйнштейн).

Находим точку на сфере Блоха, соответствующую вектору  $|\psi\rangle$ :

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

где  $\operatorname{tg} \frac{\theta}{2} = \left| \frac{b}{a} \right|$ ,  $e^{i\varphi} = \frac{b/|b|}{a/|a|}$ .

Определяемые отсюда значения  $\theta$  и  $\varphi$ , задают единичный вектор

$$\hat{n} = \sin \theta \cos \varphi \hat{x} + \sin \theta \sin \varphi \hat{y} + \cos \theta \hat{z}, \quad (8.37)$$

где  $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$  — единичные вектора,  $|\hat{x}| = |\hat{y}| = |\hat{z}| = 1$ .

Направим вектор магнитного поля  $\mathbf{B}$  в установке Штерна-Герлаха (рис. 8.5) параллельно вектору  $\hat{n}$ . Оператором измеряемой величины будет

$$S_{\hat{n}} = \hat{n} \mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} (\sin \theta \cos \varphi \hat{X} + \sin \theta \sin \varphi \hat{Y} + \cos \theta \hat{Z}). \quad (8.38)$$

Используя выражения для операторов  $\hat{X}$ ,  $\hat{Y}$  и  $\hat{Z}$ , получаем, что  $S_{\hat{n}}$  задается матрицей

$$S_{\hat{n}} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix}. \quad (8.39)$$

Собственными векторами этой матрицы являются вектор

$$|+\rangle_{\hat{n}} = \cos \frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2}|1\rangle \quad (8.40)$$

с собственным значением  $s_n = +\hbar/2$  и вектор

$$|-\rangle_{\hat{n}} = -e^{-i\varphi} \sin \frac{\theta}{2}|0\rangle + \cos \frac{\theta}{2}|1\rangle \quad (8.41)$$

с собственным значением  $s_n = -\hbar/2$ .

Вектор  $|+\rangle_{\hat{n}}$  является искомым состоянием кубита. Таким образом, чтобы получить кубиты в состоянии  $|\psi\rangle = |+\rangle_{\hat{n}}$ , нужно подать на вход установки пучок кубитов в состоянии  $|\psi_{\text{вх}}\rangle = a|0\rangle_n + b|1\rangle_n$ , где  $|a|^2 + |b|^2 = 1$ , и заблокировать на выходе пучок, отклонившийся вниз ( $s_n = -\hbar/2$ ). Кубиты в прошедшем пучке с  $s_n = +\hbar/2$  будут находиться в требуемом состоянии  $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$  (инициализация кубитов). Пусть  $a = b = 1/\sqrt{2}$ , тогда нужно приготовить кубиты в состоянии  $|\psi\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ . В этом случае

$$\begin{aligned} \varphi &= 0, \quad \theta = \pi/2, \quad \hat{n} = \hat{x}, \\ S_{\hat{x}} &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \hat{X}, \\ |+\rangle_{\hat{x}} &= (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}. \end{aligned}$$

Именно в это суперпозиционное состояние переводятся кубиты в регистре квантового компьютера в начале квантовых вычислений (см. гл. 10).

**8.4.3. Измерение двухкубитовых систем.** Рассмотрим теперь систему, состоящую из двух кубитов. В качестве базиса удобно выбрать четыре четырехкомпонентных составляющих тензорного произведения<sup>1)</sup> (тензорное произведение обозначается символом  $\otimes$ ) базисных состояний отдельных кубитов:

$$|0\rangle|0\rangle = |00\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$|01\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |10\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |11\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Вектор состояния двухкубитовой системы в общем виде записывается так:

$$|\psi\rangle = a|00\rangle + b|10\rangle + c|01\rangle + d|11\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix}, \quad (8.42)$$

где коэффициенты  $a, b, c$  и  $d$  подчиняются условию нормировки:

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

В общем случае, когда  $ad \neq bc$  двухкубитовое состояние (8.42) нельзя представить в виде тензорного произведения независимых векторов состояний отдельных кубитов:

$$|\psi_{AB}\rangle \neq (a_A|0_A\rangle + b_A|1_A\rangle) \otimes (a_B|0_B\rangle + b_B|1_B\rangle). \quad (8.43)$$

Такое состояние называется *несепарабельным* или *перепутанным*, а состояние которое можно представить в виде тензорного произведения называется *сепарабельным*.

<sup>1)</sup> Тензорное произведение двух векторов — (матричное) умножение вектора-столбца на вектор-строку:

$$\mathbf{a} \otimes \mathbf{b} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{bmatrix} \otimes [b_1 \ b_2 \ b_3] = \begin{bmatrix} a_1 b_1 & a_1 b_2 & a_1 b_3 \\ a_2 b_1 & a_2 b_2 & a_2 b_3 \\ a_3 b_1 & a_3 b_2 & a_3 b_3 \\ a_4 b_1 & a_4 b_2 & a_4 b_3 \end{bmatrix},$$

тензорное произведение двух векторов-столбцов есть вектор-столбец:

$$\mathbf{a} \otimes \mathbf{b} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 b_1 \\ a_1 b_2 \\ a_2 b_1 \\ a_2 b_2 \end{bmatrix}.$$

Важным частным случаем перепутанных состояний являются состояния Белла (ЭПР-пара), одним из которых является

$$\frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (8.44)$$

Состояния Белла обладают очень важным свойством, которое можно проиллюстрировать на примере состояния (8.44). При измерении первого кубита возможны два результата:  $|0\rangle$  с вероятностью  $1/2$  и конечным состоянием  $\psi' = |00\rangle$  и  $|1\rangle$  с вероятностью  $1/2$  и конечным состоянием  $\psi' = |11\rangle$ . Если получено состояние  $|00\rangle$ , то измерение второго кубита с вероятностью 1 дает результат  $|0\rangle$ . Таким образом, случайный исход измерения первого кубита предопределяет исход измерения второго кубита, даже если эти кубиты пространственно разделены. Между кубитами в перепутанном состоянии имеется специфическая квантовая корреляция, которая сохраняется при пространственном разделении этих кубитов (квантовое дальнее действие). Два разнесенных кубита, находящихся в перепутанном состоянии, составляют единую систему.

Аналогично, в случае, когда измерение первого кубита дает 1 мы получаем состояние  $|11\rangle$  и измерение второго кубита с достоверностью дает 1.

Рассмотрим теперь, что произойдет при измерении только одного кубита при передаче сообщения, закодированного двухкубитовым вектором состояния (8.42). Предположим, что злоумышленник перехватил посланное сообщение и произвел измерение первого кубита. Что при этом произойдет? Применим постулаты измерений. Заметим, что исходный вектор состояния  $|\psi\rangle$  представим в виде:

$$\begin{aligned} |\psi_{\text{до измерения}}\rangle = & \sqrt{|a|^2 + |c|^2} \cdot |0\rangle \otimes \frac{a|0\rangle + c|1\rangle}{\sqrt{|a|^2 + |c|^2}} + \\ & + \sqrt{|b|^2 + |d|^2} \cdot |1\rangle \otimes \frac{b|0\rangle + d|1\rangle}{\sqrt{|b|^2 + |d|^2}}. \end{aligned} \quad (8.45)$$

Формула (8.45) означает, что при измерении первого кубита с вероятностью  $|a|^2 + |c|^2$  получится состояние  $|0\rangle$ , а с вероятностью  $|b|^2 + |d|^2$  — состояние  $|1\rangle$ . Если при измерении первого кубита злоумышленник получит, например, состояние  $|0\rangle$ , то после измерения система (сообщение) перейдет в состояние

$$|\psi_{\text{после измерения}}\rangle = \frac{a|00\rangle + c|01\rangle}{\sqrt{|a|^2 + |c|^2}}, \quad (8.46)$$

и будет находиться в нем до следующего измерения, согласно второму постулату измерения. Таким образом, в результате измерения первого

кубита злоумышленник необратимо изменил вектор состояния  $|\psi\rangle$ . Это всегда может быть обнаружено корреспондентом, получающим информацию по квантовому каналу связи и закодированную вектором состояния  $|\psi\rangle$ . Эта отличительная особенность квантовой информации, заключающееся в том, что нельзя произвести измерение не изменив состояние системы, лежит в основе создания квантовых каналов связи, передающих классическую информацию без риска ее неконтролируемого перехвата.

## Глава 9

# КВАНТОВЫЕ ЛОГИЧЕСКИЕ ОПЕРАТОРЫ И КВАНТОВЫЕ СХЕМЫ. КВАНТОВЫЙ ПАРАЛЛЕЛИЗМ. ПЕРЕПУТАННЫЕ СОСТОЯНИЯ

В главах 7 и 8 мы познакомились с базовыми понятиями кубита, вопросами управления вектором состояния кубита и извлечения информации из него (измерении кубита). В настоящей главе и последующих заключительных двух главах эти базовые понятия будут использованы при рассмотрении двух основных тем второй части этой книги: квантового компьютера (квантовых вычислений) и квантовой дистанционной коммуникации.

Квантовые вычисления и протоколы квантовой коммуникации состоят в последовательном применении квантовых логических операторов (вентилей), изменяющих состояния кубитов в регистре квантового устройства. Последовательность квантовых операций — это *квантовый алгоритм*. Квантовая схема — это квантовый алгоритм, выраженный графически последовательностью квантовых вентиляей, соединенных квантовыми «проводами». Квантовый провод на схеме — это линия, показывающая в какой последовательности выполняются квантовые логические операции. Рассмотрим основные квантовые вентили.

Введем сначала элементарные квантовые однокубитовые вентили и один двухкубитовый вентиль CNOT (контролируемое нет). Набора всех однокубитовых вентиляей и CNOT достаточно для реализации любого квантового процессора и квантовых алгоритмов.

Затем мы рассмотрим (как «черный ящик») основной квантовый процессор в квантовой схеме, осуществляющий одновременно вычисления экспоненциально большого числа значений булевой функции, и познакомимся на его примере с квантовым параллелизмом — одним из основных ресурсов квантового компьютера, дающим экспоненциально большой выигрыш по числу операций по сравнению с классическим компьютером. Конкретизация операций, выполняемых этим процессором в терминах операций CNOT и однокубитовых операций будет произведена в главе 11 при рассмотрении конкретных квантовых алгоритмов.

В заключение этой главы будет рассмотрен простой пример квантового параллельного вычисления, генерирующего двухкубитовые перепутанные состояния, используемые в квантовой коммуникации.

## 9.1. Квантовые логические операторы (вентили) и квантовые схемы

**9.1.1. Однокубитовые вентили.** Однокубитовые вентили представляются матрицами  $2 \times 2$ . Единственное ограничение на эти матрицы состоит в том, что они должны быть унитарны, т.е.  $U^\dagger U = I$ , где  $U^\dagger$  — сопряженная матрица, получаемая транспонированием и последующим комплексным сопряжением  $U$ .

Простейший однокубитовый вентиль представляется оператором идентичности  $\hat{I}$ . Его можно представить как диагональную матрицу  $2 \times 2$  или в виде проекционного оператора:

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|. \quad (9.1)$$

**9.1.2. Оператор NOT.** Оператор NOT (матрица Паули  $\sigma_x$ ). Оператор NOT переводит состояние  $|0\rangle$  в состояние  $|1\rangle$ , и наоборот. На квантовой схеме этот оператор обозначается как  $X$

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \equiv |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|. \quad (9.2)$$

Действие квантового вентиля NOT на состояние  $a|0\rangle + b|1\rangle$  дает  $a|1\rangle + b|0\rangle$ , т.е.

$$X \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix}. \quad (9.3)$$

**9.1.3. Операторы  $Z$  и  $Y$ .** Два других важных квантовых вентиля:

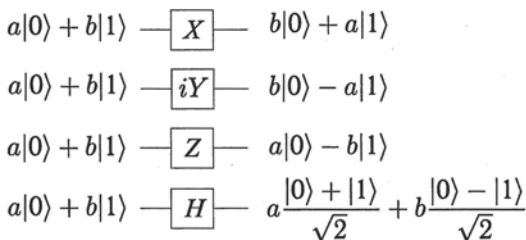
вентиль  $Z$  (матрица Паули  $\sigma_z$ ), оставляет  $|0\rangle$  без изменений и переводит  $|1\rangle$  в  $-|1\rangle$ :

$$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \equiv |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|; \quad (9.4)$$

вентиль  $Y$  (матрица Паули  $\sigma_y$ ):

$$Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \equiv -i|0\rangle\langle 1| + i|1\rangle\langle 0|. \quad (9.5)$$

На практике часто используется вентиль  $iY$ . Поскольку  $i\sigma_y = \sigma_z\sigma_x$ , имеем  $iY = ZX$ . Изображение квантовых вентилях  $X, iY, Z$  на квантовой схеме приведено на рис. 9.1. Горизонтальной линией обозначается «квантовый провод», несущий один кубит. Линия, обозначающая квантовый провод на квантовой схеме, показывает временную последовательность квантовых операций, совершаемых над кубитом слева направо.

Рис. 9.1. Изображение квантовых элементов  $X$ ,  $iY$ ,  $Z$ ,  $H$  на квантовой схеме

**9.1.4. Оператор Адамара.** Действие оператора Адамара определяется следующим образом:

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \langle 0| + \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \langle 1|. \quad (9.6)$$

Схема квантового вентиля  $H$  приведена на рис. 9.1. Оператор Адамара переводит базисные состояния в суперпозиционные:

$$H|0\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (9.7)$$

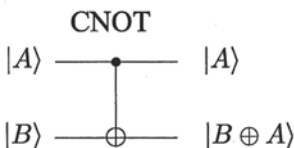
$$H|1\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (9.8)$$

**9.1.5. Оператор измерения кубита.** В конце вычислений измеряется состояние каждого кубита в регистре. В результате измерения получается либо  $|0\rangle$ , либо  $|1\rangle$ . В отличие от обратимых операторов поворота вектора Блоха, оператор измерения — необратимый (не унитарный). На квантовой схеме оператор измерения изображается так:



Рис. 9.2. Оператор измерения кубита

**9.1.6. Двухкубитовые вентили.** Оператор CNOT — контролируемый NOT — двухкубитовый оператор, принцип действия которого аналогичен классическому оператору CNOT. Квантовая схема оператора CNOT приведена на рис. 9.3.



Кубит  $|A\rangle$  (рис. 9.3) называется *контрольным*, а кубит  $|B\rangle$  — *целевым*. Знак  $\oplus$  обозначает операцию сложения по модулю 2.

Запишем оператор CNOT в форме проекционного оператора:

Рис. 9.3. Оператор CNOT

$$\text{CNOT} = |1\rangle \langle 1| \otimes \text{NOT} + |0\rangle \langle 0| \otimes \hat{I}, \quad (9.9)$$

где  $\hat{I}$  — оператор идентичности.

Рис. 9.3 демонстрирует действие оператора CNOT:

- контрольный кубит переносится на выход верхней линии без изменений;
- на выходе нижней линии получается значение  $|B \oplus A\rangle$  — сумма по модулю 2 значений целевого и контрольного кубитов:

$$\begin{aligned} |0\rangle \oplus |A\rangle &= |A\rangle, \\ |1\rangle \oplus |A\rangle &= |1 - A\rangle. \end{aligned}$$

Это правило действия для квантового CNOT аналогично классическому CNOT: если контрольный бит равен нулю, значение целевого бита сохраняется, иначе (контрольный бит равен единице) — инвертируется.

## 9.2. Квантовый параллелизм

Мы рассмотрели основные, наиболее часто используемые операторы, при помощи которых можно строить квантовые схемы и реализовывать квантовые алгоритмы. Следует отметить, что рассмотренный оператор CNOT не единственный двухкубитовый оператор, однако *теорема универсальности* гласит: *любой многокубитовый вентиль может быть составлен из элемента CNOT и однокубитовых элементов.*

Основываясь на теореме универсальности, введем двухкубитовый оператор  $U_f$ , который позволяет производить вычисление булевой функции  $f(x) = 0, 1$ , где аргумент  $x$  также принимает два значения:  $x = 0, 1$ . Действие этого оператора поясняется на рис. 9.4.

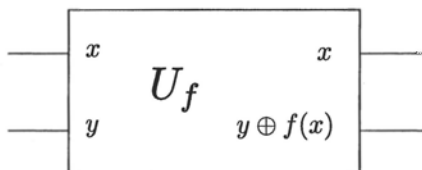


Рис. 9.4. Двухкубитовый оператор  $U_f$ , совершающий преобразование

$$|x, y\rangle \xrightarrow{U_f} |x, y \oplus f(x)\rangle$$

Верхний кубит  $|x\rangle$  составляет регистр данных. В него записываются значения аргументов функции. В общем случае регистр данных состоит из  $n$  кубитов. Нижний кубит — регистр, в который записываются значения функции  $f(x)$ . Он называется целевым регистром. Целевой регистр — всегда однокубитовый. Входное значение верхнего кубита  $|x\rangle$  переносится на выход. Выходное значение нижнего кубита  $y \oplus f(x)$ :  $|0\rangle \oplus |A\rangle = |A\rangle$ ,  $|1\rangle \oplus |A\rangle = |1 - A\rangle$ .

Подадим на вход рассмотренной схемы состояния  $|x\rangle = |0\rangle$  и  $|y\rangle = |0\rangle$  (рис. 9.5). Имеем

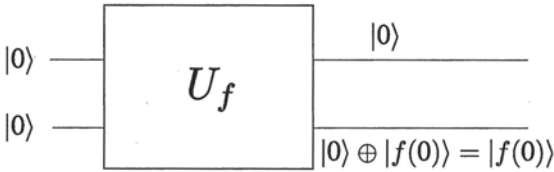


Рис. 9.5. Вычисление функции  $f(0)$

Таким образом, схема, изображенная на рис. 9.5 совершает преобразование двухкубитового состояния

$$|00\rangle \xrightarrow{U_f} |0, f(0)\rangle, \quad (9.10)$$

т.е. вычисляет значение  $f(0)$ .

Аналогично, при  $|x\rangle = |1\rangle$ , имеем

$$|10\rangle \xrightarrow{U_f} |1, f(1)\rangle. \quad (9.11)$$

При этом в целевом регистре на выходе записывается значение  $|f(1)\rangle$ . В этом режиме квантовая схема работает как классический процессор, вычисляя одно значение функции за одну операцию. Однако, квантовый вентиль  $U_f$  позволяет также произвести вычисление обоих значений  $f(0)$  и  $f(1)$  за одну операцию, если подать на его вход (в регистре данных) суперпозиционное состояние  $(|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ . Для этого вводим в схему оператор Адамара (рис. 9.6): Линейный оператор  $U_f$

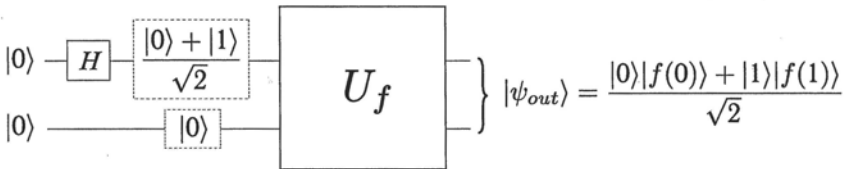


Рис. 9.6. Квантовый параллелизм: один процессор параллельно вычисляет два значения функции  $f(0)$  и  $f(1)$

работает одновременно (параллельно) с каждым членом суперпозиции, как определено формулами (9.10) и (9.11), а результаты складывает. В результате, схема, изображенная на рис. 9.6, совершает преобразование

$$|\psi_{in}\rangle = |00\rangle \rightarrow |\psi_{out}\rangle = \frac{|0\rangle|f(0)\rangle + |1\rangle|f(1)\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (9.12)$$

Вектор выходного состояния  $|\psi_{out}\rangle$  содержит оба значения булевой функции  $f(0)$  и  $f(1)$ . Таким образом, квантовый параллелизм дает возможность вычислять на одном двухкубитовом квантовом процессоре одновременно два значения булевой функции, которые выдаются в суперпозиционном виде.

Отметим, что в классическом компьютере под параллелизмом (параллельным вычислением) понимается одновременное действие двух (или более) процессоров, вычисляющих два (или более) значений функции (рис. 9.7)

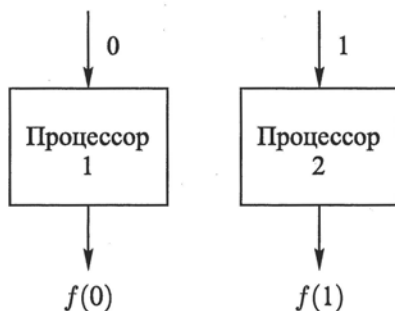


Рис. 9.7. Классический параллелизм: два процессора параллельно вычисляют два значения функции  $f(0)$  и  $f(1)$ .

Обобщим теперь схему, использующую квантовый параллелизм на случай  $n$ -кубитового регистра данных. В этом случае схема квантового компьютера, вычисляющего одновременно (параллельно)  $2^n$  значений функции выглядит так:

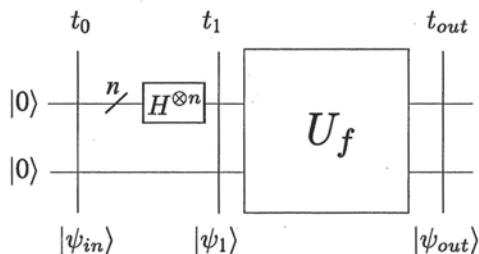


Рис. 9.8. Схема квантового компьютера, вычисляющего за одно действие  $2^n$  значений функции  $f(x)$ .  $|\psi_{in}\rangle$  — входное состояние,  $|\psi_1\rangle$  и  $|\psi_{out}\rangle$  — промежуточное и выходное состояния, соответственно.

На схеме знак  $/$  с индексом  $n$  означает, что регистр данных состоит из  $n$  кубитов. Входное  $(n + 1)$ -кубитовое состояние задается

вектором

$$|\psi_{in}\rangle = \underbrace{(|0\rangle \otimes |0\rangle \otimes \dots \otimes |0\rangle)}_{n \text{ кубитов}} \otimes |0\rangle \equiv |0\rangle^{\otimes n} \otimes |0\rangle. \quad (9.13)$$

Символ  $H^{\otimes n}$  означает применение оператора Адамара к каждому из  $n$  кубитов регистра данных:

$$\begin{aligned} \underbrace{H \otimes H \otimes \dots \otimes H}_{n \text{ операторов}} \underbrace{(|0\rangle \otimes |0\rangle \otimes \dots \otimes |0\rangle)}_{n \text{ кубитов}} &= \\ &= \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \dots \otimes \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \left( |00\dots 0\rangle + |00\dots 1\rangle + \dots + |11\dots 1\rangle \right) = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle \end{aligned} \quad (9.14)$$

Здесь введено обозначение  $|x\rangle = |x_0, x_1, \dots, x_{n-1}\rangle$ , где  $x_i = 0, 1$ . Число  $x$  в двоичном коде записывается как  $x = \sum_{i=0}^{n-1} x_i 2^i$ , поэтому каждый член в сумме (9.14) задает одно число  $x$  из набора  $2^n$  чисел:  $0 \leq x \leq 2^n - 1$ .

Таким образом, в регистре данных квантового компьютера, состоящем из  $n$  кубитов, записано в суперпозиционном виде  $2^n$   $n$ -разрядных чисел! В классическом регистре из  $n$  битов записано только одно такое число. Квантовый принцип суперпозиции позволяет получить экспоненциально большой выигрыш в памяти квантового компьютера по сравнению с классическим компьютером.

Состояние компьютера после действий операторов Адамара (см. рис. 9.8) записывается в виде

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle \otimes |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x0\rangle. \quad (9.15)$$

Выходное состояние  $\psi_{out}$  получается после одного лишь действия оператора  $U_f$ :

$$|\psi_{out}\rangle = U_f |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x, 0 \otimes f(x)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x, f(x)\rangle. \quad (9.16)$$

В результате одной операции, в которой оператор  $U_f$  действует параллельно на все  $2^n$  двухкубитовые состояния  $|x0\rangle$  в суперпозиции (9.15), вычислены все  $2^n$  значений функции  $f(x)$  при различных  $2^n$  значениях ее аргумента  $x$ .

Квантовый параллелизм, таким образом, позволяет получить экспоненциально большой выигрыш также и по числу операций по сравнению с классическим компьютером.

В выходном состоянии (9.16) в суперпозиционном виде хранятся все  $2^n$  значений функции  $f(x)$ . Чтобы извлечь эту информацию нужно провести измерение состояний кубитов. Рассмотрим, для простоты, двухкубитовый ( $n = 1$ ) случай. Тогда из (9.16) имеем

$$|\psi_{out}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0, f(0)\rangle + |1, f(1)\rangle) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle \otimes |f(0)\rangle + |1\rangle \otimes |f(1)\rangle). \quad (9.17)$$

Измеряем первый кубит в базисе  $|0\rangle, |1\rangle$  с вероятностью  $1/2$  получаем  $|0\rangle$  и состояние после измерения  $|0, f(0)\rangle$ , и с вероятностью  $1/2$  получаем  $|1\rangle$  и состояние после измерения  $|1, f(1)\rangle$ . Таким образом, измерение суперпозиционного состояния (9.17) дает только одно из двух вычисленных значений функции. Аналогично, при измерении состояния (9.16) мы получим лишь одно из  $2^n$  вычисленных значений функции  $f(x)$ , остальная информация необратимо теряется вследствие коллапса суперпозиционного состояния в процессе измерения.

Кажется, что постулат измерения перечеркивает сразу оба экспоненциально больших выигрыша, которые дает квантовый компьютер — в объеме памяти и по числу операций. Искусство квантового программирования состоит в том, чтобы находить такие практически важные задачи, и так строить квантовые алгоритмы, чтобы обходить эту принципиальную трудность измерения выходного суперпозиционного квантового состояния.

Начиная с 1995 г., когда был предложен первый практически важный квантовый алгоритм, число таких алгоритмов постоянно увеличивается (см. главу 11).

### 9.3. Перепутанные состояния двух кубитов. Базис Белла

Квантовый процессор  $U_f$  (рис. 9.5), рассмотренный в предыдущем разделе, будет использован в главе 11 при построении алгоритма Дойча. Там же будет произведена конкретизация операций, выполняемых процессором  $U_f$ , в терминах операций CNOT и однокубитовых операций. Здесь же мы рассмотрим один конкретный пример логического оператора  $U_f$ , позволяющего генерировать перепутанные состояния двух кубитов, называемые также состояниями Белла<sup>1)</sup> или ЭПР парами (Эйнштейн, Подольский, Розен, 1930 г.).

Состояния Белла или ЭПР-пары играют важную роль в теории квантовой информации. В частности, они используются для плотного квантового кодирования информации и телепортации (см. главу 10). Квантовая схема, генерирующая двухкубитовые перепутанные состояния, изображена на рис. 9.9. Она получается из схемы, изображенной

<sup>1)</sup> Джон Белл — американский физик, сформулировавший известные неравенства, получившие название *неравенства Белла* (см. п. 10.4)

на рис. 9.6, заменой двухкубитового вентиля  $U_f$  на вентиль CNOT. На вход этой схемы подаются два кубита в базисных состояниях  $|x\rangle, |y\rangle$ .

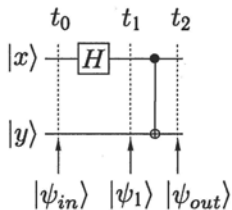


Рис. 9.9. Квантовая схема для получения состояний Белла

Рассмотрим три временных сечения, момент  $t_0$  — соответствующий начальному состоянию системы, момент  $t_1$  — соответствующий состоянию после применения к первому кубиту оператора Адамара и момент  $t_2$  — соответствующий конечному состоянию после применения оператора CNOT. Пусть в момент времени  $t_0$  на вход подаются два кубита, в состояниях  $|0\rangle, |0\rangle$ , соответствующий вектор состояния обозначим как  $|\psi_{in}\rangle = |00\rangle$ . В момент времени  $t_1$  к верхнему кубиту применяется оператор Адамара, который переводит этот кубит в суперпозиционное состояние  $\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}$ . Двухкубитовый вектор состояния в этом случае выглядит как

$$|\psi_1\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes |0\rangle = \frac{|00\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}}.$$

Отметим, что двухкубитовый вектор  $|\psi_1\rangle$  факторизуется в произведение однокубитовых векторов состояния. Затем двухкубитовый оператор CNOT формирует выходной вектор состояния:

$$|\psi_{out}\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}.$$

Данная схема преобразует четыре начальных состояния вычислительного базиса  $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$  в следующие выходные состояния:

$$|\psi_{in}\rangle = |00\rangle \longrightarrow |\psi_{out}\rangle = |\psi^+\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (9.18)$$

$$|\psi_{in}\rangle = |01\rangle \longrightarrow |\psi_{out}\rangle = |\phi^+\rangle = \frac{|01\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (9.19)$$

$$|\psi_{in}\rangle = |10\rangle \longrightarrow |\psi_{out}\rangle = |\psi^-\rangle = \frac{|00\rangle - |11\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (9.20)$$

$$|\psi_{in}\rangle = |11\rangle \longrightarrow |\psi_{out}\rangle = |\phi^-\rangle = \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (9.21)$$

Эти четыре состояния (9.18)–(9.21) и составляют базис Белла. Отметим, что в то время, как промежуточные состояния  $|\psi_1\rangle$  факторизуются, согласно критерию (8.43), выходные состояния  $\psi_{out}$  факторизовать невозможно. Таким образом, состояния Белла являются *перепутанными* состояниями. Экспериментальные схемы, генерирующие состояния Белла реализованы на таких физических объектах как спины, фотоны и двухуровневые атомы.

## Глава 10

# СВЕРХПЛОТНОЕ КВАНТОВОЕ КОДИРОВАНИЕ. КВАНТОВАЯ ТЕЛЕПОРТАЦИЯ. НЕРАВЕНСТВО БЕЛЛА

В этой главе рассматриваются два примера коммуникации на расстояние, производимой с помощью кубитов и квантовых схем. В разделе 10.1 рассматривается плотное кодирование информации. Классическая информация трансформируется в квантовую информацию посредством квантового кодирования и передается на расстояние по квантовому каналу связи. При этом перепутанность квантовых состояний кубитов дает возможность получить выигрыш в плотности кодирования информации. Кроме этого, невозможность копирования кубита (раздел 10.2) и необратимое изменение квантового состояния при измерении исключают возможность неконтролируемого перехвата информации в квантовом канале связи. В разделе 10.3 рассмотрен принципиально другой тип квантовой коммуникации — телепортация — передача на расстояние неизвестного квантового состояния кубита без передачи самого кубита. Телепортация так же использует перепутанные состояния кубитов. Развитие квантовой информации выдвигает на передний план вопросы интерпретации суперпозиционных и перепутанных квантовых состояний. Эти вопросы кратко обсуждаются в разделе 10.4.

### 10.1. Сверхплотное квантовое кодирование информации

Предположим, что надо передать по каналу связи одно из четырех чисел: 0, 1, 2 и 3. Закодируем их, используя классические биты. В закодированном виде эти числа будут представлены четырьмя парами битов: 00, 01, 10, 11. Значит, чтобы передать одно из четырех чисел, надо передать по классическому каналу связи 2 бита информации. Введем *энтропию* этого сообщения  $S$  — меру меру неопределенности сообщения — как логарифм числа исходов. До получения сообщения энтропия равна  $S_0 = \log_2 4$ , после получения сообщения  $S_1 = \log_2 1 = 0$ . Назовем *информацией*  $I$  разность исходной энтропии и конечной энтропии:

$$I = S_1 - S_0 = \log_2 4 - \log_2 1 = 2. \quad (10.1)$$

Единицей информации определенной таким образом является бит. В рассмотренном примере передано 2 бита информации. Итак, чтобы передать по классическому каналу связи два бита информации, требуется переслать 2 классических бита.

Покажем теперь, что по квантовому каналу связи 2 бита классической информации можно передать, пересылая всего один кубит. Пусть есть два корреспондента: Алиса (А) и Боб (В), они соединены между собой квантовым каналом связи по которому могут передаваться кубиты, например световод, по которому передаются фотоны (фотоны как кубиты кратко рассмотрены в п. 11.7.3). Имеется также квантовое устройство, которое генерирует перепутанное состояние Белла, например

$$|\psi_0\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}.$$

Первый кубит из перепутанной пары пересылается Алисе, а второй Бобу. Отметим, что эта операция не связана с передачей какой-либо информации и относится к подготовительной фазе операции. Алиса совершает над полученным ею кубитом одно из четырех унитарных преобразований:  $\hat{I}, \hat{X}, \hat{Z}, i\hat{Y} = \hat{Z}\hat{X}$ . В результате, она переводит исходное состояние  $|\psi_0\rangle$  в одно из четырех состояний

$$\begin{aligned} |\psi_0\rangle &= \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}, \\ |\psi_1\rangle &= \frac{|10\rangle + |01\rangle}{\sqrt{2}}, \\ |\psi_2\rangle &= \frac{|00\rangle - |11\rangle}{\sqrt{2}}, \\ |\psi_3\rangle &= \frac{|10\rangle - |01\rangle}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (10.2)$$



Рис. 10.1. Схема иллюстрирующая работу протокола «сверхплотного кодирования», использующего начальное состояние  $|\psi_0\rangle$

Четырьмя двухкубитовыми перепутанными состояниями базиса Белла  $|\psi_0\rangle, |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle$  Алиса кодирует четыре числа 0, 1, 2, 3. Отметим, что при этом меняется и состояние кубита, который находится у Боба (квантовое дальнеедействие). Алиса пересылает свой кубит Бобу по квантовому каналу связи. Получая этот кубит, Боб не знает какое из четырех чисел передается Алисой и совершает над парой перепутанных кубитов, которые теперь имеются в его распоряжении, операцию декодирования, состоящую из двух операций. Сначала он применяет вентиль CNOT, в котором первый кубит играет роль контрольного кубита:

$$\begin{aligned} |\psi_0\rangle &= \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} \rightarrow \frac{|00\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes |0\rangle, \\ |\psi_1\rangle &= \frac{|10\rangle + |01\rangle}{\sqrt{2}} \rightarrow \frac{|11\rangle + |01\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|1\rangle + |0\rangle}{\sqrt{2}} \otimes |1\rangle, \\ |\psi_2\rangle &= \frac{|00\rangle - |11\rangle}{\sqrt{2}} \rightarrow \frac{|00\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes |0\rangle, \\ |\psi_3\rangle &= \frac{|10\rangle - |01\rangle}{\sqrt{2}} \rightarrow \frac{|11\rangle - |01\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|1\rangle - |0\rangle}{\sqrt{2}} \otimes |1\rangle. \end{aligned}$$

Затем Боб применяет оператор Адамара к первому кубиту, используя

$$\hat{H} \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} = |0\rangle, \quad \hat{H} \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} = |1\rangle. \quad (10.3)$$

В результате декодирования Боб получает одно из следующих четырех двухкубитовых состояний:

$$|00\rangle, \quad |01\rangle, \quad |10\rangle, \quad |11\rangle, \quad (10.4)$$

которые соответствуют в двоичном коде закодированному Алисой с помощью базиса Белла одному из четырех чисел 0, 1, 2, 3. Таким образом, пересылкой лишь одного кубита можно передать два бита классической информации. Такое квантовое кодирование с использованием перепутанных двухкубитовых состояний называется сверхплотным кодированием (Ч. Беннет, Г. Визнер, 1992 г.).

Сверхплотное кодирование осуществляется при помощи квантовой схемы изображенной на рис. 10.2.

Отметим, что передаваемый по квантовому каналу кубит сам по себе не несет информации, которая закодирована в корреляции двух кубитов. При перехвате этого кубита злоумышленником, эта корреляция необратимо исчезает. Например, в случае  $|\psi_0\rangle = (|00\rangle + |11\rangle)/\sqrt{2}$  перехват (измерение) первого кубита дает либо  $|0\rangle$  и тогда  $|\psi_0\rangle \rightarrow |00\rangle$ , либо  $|1\rangle$  и тогда  $|\psi_0\rangle \rightarrow |11\rangle$ . В любом из этих случаев, получатель первого кубита (Боб) может установить сам факт перехвата. Однако,

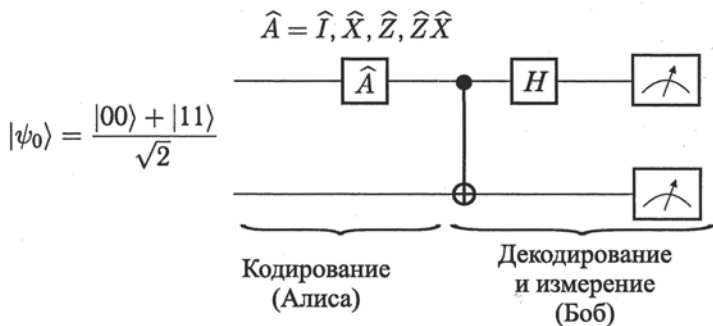


Рис. 10.2. Квантовая схема, осуществляющая протокол сверхплотного кодирования

при перехвате первого кубита, передаваемая информация необратимо теряется, поскольку в результате его измерения скоррелированное (перепутанное) состояние двух кубитов переходит в одно из базисных состояний.

## 10.2. Кубит невозможно копировать

Как известно, в классическом случае при помощи элемента CNOT можно копировать классический бит. Пусть на один вход элемента CNOT (см. рис. 10.3, а) подается копируемый бит в состоянии  $x$  (в общем случае это состояние неизвестно), на второй вход — бит в состоянии 0. В результате действия оператора CNOT на выходе мы будем иметь два бита в одинаковых состояниях  $x$ .

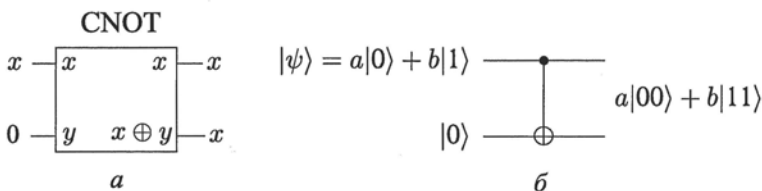


Рис. 10.3. Классическая схема копирования неизвестного бита (а), квантовая схема копирования неизвестного кубита (б)

Возникает вопрос, можно ли совершить аналогичную операцию копирования кубита. Ответ на него отрицательный. Рассмотрим соответствующий квантовый оператор CNOT (рис. 10.3, б). Пусть на первый вход копирующего устройства подается копируемый кубит в состоянии  $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ , где  $a$  и  $b$  неизвестны, на второй вход — кубит в состоянии  $|0\rangle$ .

Входное состояние двух кубитов

$$|\psi_{in}\rangle = [a|0\rangle + b|1\rangle] \otimes |0\rangle = a|00\rangle + b|10\rangle.$$

Тогда выходное состояние

$$|\psi_{out}\rangle = a|00\rangle + b|11\rangle. \quad (10.5)$$

Если копирование было бы проведено, то выходным состоянием должен быть вектор

$$|\psi_{out}\rangle = (a|0\rangle + b|1\rangle) \otimes (a|0\rangle + b|1\rangle) = a^2|00\rangle + ab|01\rangle + ba|10\rangle + b^2|11\rangle. \quad (10.6)$$

Сравнивая (10.5) с (10.6) приходим к выводу, что копирование кубита возможно лишь в том случае, когда он находится в одном из базисных состояний  $|0\rangle$  ( $b = 0, a = 1$ ) или  $|1\rangle$  ( $a = 0, b = 1$ ). Классическая информация копируется точно, что используется, в частности, в классических компьютерах. С другой стороны, если бы мы могли создать точную копию неизвестного квантового состояния, то мы могли бы произвести измерение этой копии не возмущая состояния оригинала. То обстоятельство, что этот неизвестный кубит невозможно скопировать, лежит в основе передачи информации по квантовому каналу без риска ее неконтролируемого перехвата. Таким образом, невозможно создать копию кубита, находящегося в неизвестном суперпозиционном состоянии. Это утверждение (иногда называемое теоремой о невозможности клонирования кубита) выражает принципиальное различие между классической и квантовой информацией.

### 10.3. Квантовая телепортация

Квантовая телепортация — передача неизвестного квантового состояния на расстояние при помощи разделенной в пространстве и поделенной между двумя корреспондентами ЭПР-пары и классического канала связи. Квантовая телепортация, в отличие от плотного кодирования, происходит при отсутствии квантового канала связи, т.е. без передачи кубитов.

Задача квантовой телепортации состоит в следующем. У Алисы есть кубит, находящийся в произвольном квантовом состоянии  $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ , где коэффициенты  $a$  и  $b$  неизвестны, но выполнено условие ( $|a|^2 + |b|^2 = 1$ ). Она хочет передать Бобу это квантовое состояние, то есть сделать так, чтобы у Боба оказался в распоряжении кубит в том же самом состоянии  $|\psi\rangle$ . Боб находится от Алисы на расстоянии, ограниченном лишь возможностью установления между ними классического канала связи (телефона, интернета и др.). Алиса не знает, в каком состоянии  $|\psi\rangle$  находится кубит и может посылать Бобу только классическую информацию.

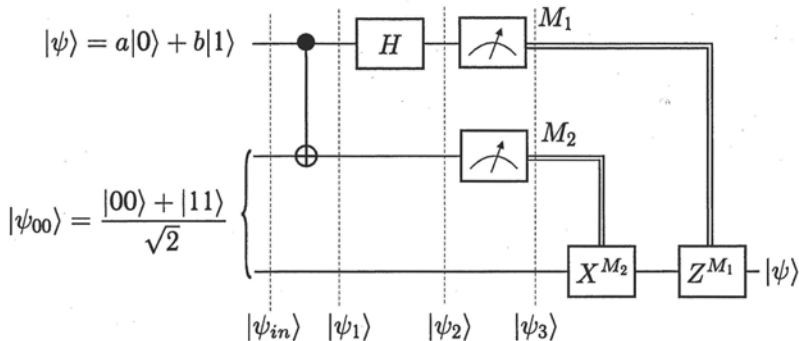


Рис. 10.4. Квантовая схема телепортации неизвестного состояния  $|\psi\rangle$  кубита. Оператор  $A^{M_i} = A$  при  $M_i = 1$  и  $A^{M_i} = I$  при  $M_i = 0$  ( $A = X$  или  $Z$ ). Двойные линии обозначают классический канал связи (например, телефон)

Рассмотрим схему, осуществляющую квантовую телепортацию кубита (рис. 10.4). Предполагается, что генератор перепутанных состояний создал перепутанное двухкубитовое состояние  $|\psi_{00}\rangle = (|00\rangle + |11\rangle)/\sqrt{2}$  и передал первый кубит Алисе а второй кубит Бобу. Две верхние линии описывают два кубита принадлежащих Алисе, а нижняя линия описывает кубит принадлежащий Бобу. Состояние трехкубитовой системы в начальный момент имеет вид:

$$|\psi_{in}\rangle = |\psi\rangle \otimes |\psi_{00}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(a|0\rangle + b|1\rangle) \otimes (|00\rangle + |11\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(a|0\rangle \otimes (|00\rangle + |11\rangle) + b|1\rangle \otimes (|00\rangle + |11\rangle)). \quad (10.7)$$

Алиса действует на свои два кубита оператором CNOT, используя первый кубит как контрольный, переводя трехкубитовую систему в состояние  $|\psi_1\rangle$ :

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(a|0\rangle \otimes (|00\rangle + |11\rangle) + b|1\rangle \otimes (|10\rangle + |01\rangle)). \quad (10.8)$$

После этого она применяет к первому кубиту оператор Адамара, в результате чего система переходит в состояние  $|\psi_2\rangle$ :

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{2}[a(|0\rangle + |1\rangle) \otimes (|00\rangle + |11\rangle) + b(|0\rangle - |1\rangle) \otimes (|10\rangle + |01\rangle)]. \quad (10.9)$$

Чтобы проанализировать получившееся состояние, раскрываем произведения и перегруппировываем слагаемые следующим образом:

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{2} [|00\rangle \otimes (a|0\rangle + b|1\rangle) + |01\rangle \otimes (a|1\rangle + b|0\rangle) + |10\rangle \otimes (a|0\rangle - b|1\rangle) + |11\rangle \otimes (a|1\rangle - b|0\rangle)]. \quad (10.10)$$

Рассмотрим первое слагаемое: два кубита Алисы находятся в состоянии  $|00\rangle$ , а кубит Боба находится в состоянии  $a|0\rangle + b|1\rangle$ , которое есть не что иное как состояние  $|\psi\rangle$ , которое требуется телепортировать Бобу.

Алиса производит измерения состояний первого и второго кубитов. С вероятностью  $1/4$  она получает одно из следующих состояний  $|M_1M_2\rangle = |00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$  (рис. 10.4).

После измерений первого и второго кубитов, проведенных Алисой, третий кубит Боба находится в одном из следующих состояний: если Алиса получает  $|00\rangle$ , то это состояние  $a|0\rangle + b|1\rangle$ ;  $|01\rangle \rightarrow a|1\rangle + b|0\rangle$ ;  $|10\rangle \rightarrow a|0\rangle - b|1\rangle$ ;  $|11\rangle \rightarrow a|1\rangle - b|0\rangle$ . Далее Алиса сообщает Бобу по классическому каналу связи (например, по телефону) результат своего измерения  $|M_1M_2\rangle$ . Это сообщение определяет дальнейшие действия Боба. Если это  $|00\rangle$ , то Бобу ничего не надо делать: его кубит уже находится в нужном состоянии. Если Алиса сообщает о получении  $|01\rangle$ , то Боб применяет к своему кубиту оператор  $X = \text{NOT}$ , в случае  $|10\rangle$  к кубиту Боба применяется оператор  $Z$  и, наконец, в случае  $|11\rangle$ , Боб сначала применяет оператор  $X$ , а затем  $Z$ . В любом из этих случаев кубит Боба оказывается в требуемом состоянии  $a|0\rangle + b|1\rangle$ .

Телепортация представляет собой идеальный способ передачи секретной информации. Квантовый канал связи здесь отсутствует, ЭПР-пара никакой информации не несет, по каналу связи передается только классическая информация, недостаточная для воспроизведения передаваемого сообщения.

Квантовая телепортация не дает возможности передавать информацию быстрее скорости света, как может показаться на первый взгляд, поскольку неотъемлемой частью протокола телепортации является передача информации по классическому каналу связи, а классический канал ограничен скоростью света.

## 10.4. Неравенство Белла

Как плотное кодирование, так и квантовая телепортация существенно используют перепутанные состояния кубитов. Отличительной особенностью перепутанных состояний двух пространственно разделенных кубитов является то, что изменение состояния одного кубита при его измерении изменяет состояние другого. Это действие на расстоянии («квантовая нелокальность») является следствием постулатов квантовой механики и теории измерений и, пока, не получило в квантовой механике какого-либо объяснения на более глубоком уровне. Впервые на этот эффект дальнего действия в квантовой механике обратили внимание Эйнштейн, Подольский и Розен (ЭПР) в 1935 году.

Другая трудность интерпретации квантовой механики связана с суперпозиционным состоянием. Если кубит находится в базисном состоянии, его физические свойства точно определены с той полнотой, которая допускается квантовой механикой. Если же кубит находится

в суперпозиционном состоянии, то до измерения ему нельзя приписать определенные физические свойства. Эти свойства появляются только в результате измерения. В этом заключается одно из основных положений копенгагенской интерпретации квантовой механики. Ее оппоненты же утверждают, что такие свойства объективно существуют, однако, их нельзя определить с достоверностью из-за наличия скрытых параметров. Потому результаты измерений физических величин являются случайными, подобно исходам подбрасывания монеты. В 1964 г. американский физик Белл сформулировал неравенства (называемые неравенствами Белла), которые позволяют экспериментально проверить, существуют ли свойства объекта до измерения и мы просто их не знаем, либо этих свойств действительно до измерения не существует.

**Неравенство Белла.** Рассмотрим следующий эксперимент, сначала с позиций классической физики. Пусть у нас есть каким-либо образом приготовленное начальное состояние двух частиц (в данном случае способ приготовления не важен), и это состояние точно воспроизводимо сколь угодно большое число раз. После создания такого состояния, одна частица передается Алисе, а другая Бобу (рис. 10.5)

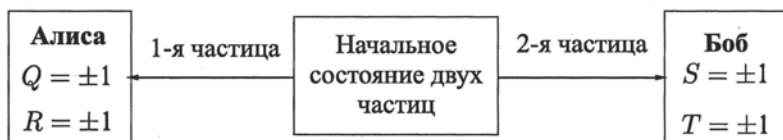


Рис. 10.5. Схема эксперимента для проверки неравенства Белла

Пусть у Алисы есть два различных прибора и она может выполнить какое-либо из двух возможных измерений величин  $Q$  и  $R$ , случайным образом производя выбор прибора (например подбрасывая монетку). Каждое из двух измерений имеет два возможных результата:  $+1$  и  $-1$ . Аналогично, Боб может определить значения величин  $S$  и  $T$ , каждая из которых может принимать значение либо  $+1$ , либо  $-1$ .

Образует случайную величину  $QS + RS + RT - QT = (Q + R)S + (R - Q)T$ . Видно, что либо  $Q + R = 0$ , либо  $R - Q = 0$ . В любом случае получаем, что введенная случайная величина принимает два значения:  $QS + RS + RT - QT = \pm 2$ . Если задана функция распределения случайных величин  $w(Q, R, S, T)$ , то с ее помощью можно вычислить средние значения случайных величин  $QS, RS, QT$  и  $RT$ , которые будут обозначаться чертой сверху.

Алиса и Боб могут также определять эти средние значения  $\overline{QS}, \overline{RS}, \overline{QT}, \overline{RT}$  экспериментально просто повторяя измерения многократно. Результат должен удовлетворить неравенству:

$$\overline{QS} + \overline{RS} + \overline{RT} - \overline{QT} \leq 2. \quad (10.11)$$

Это неравенство называется неравенством Белла.

Рассмотрим теперь тот же эксперимент, но с позиций квантовой механики. Пусть начальным состоянием является одно из двухкубитовых перепутанных состояний Белла:

$$\frac{|01\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (10.12)$$

Алиса и Боб получают по одному кубиту, и выполняют измерения операторов следующих физических величин, имеющих собственные значения  $\pm 1$ :

$$\begin{aligned} Q &= Z_1, & S &= \frac{-Z_2 - X_2}{\sqrt{2}}, \\ R &= X_1, & T &= \frac{Z_2 - X_2}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (10.13)$$

Собственные значения операторов  $\hat{Z}$  и  $\hat{X}$  равны  $\pm 1$  (измерять их надо в разных базисах). Ниже мы покажем, что и операторы  $\hat{S}$  и  $\hat{T}$  также обладают собственными значениями  $\pm 1$ .

Используя (10.12), получаем, что квантовомеханические средние значения наблюдаемых  $\langle QS \rangle, \langle RS \rangle, \langle QT \rangle, \langle RT \rangle$  есть

$$\langle QS \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \langle RS \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \langle QT \rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \langle RT \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (10.14)$$

т.е. в квантовом случае

$$\langle QS \rangle + \langle RS \rangle + \langle RT \rangle - \langle QT \rangle = 2\sqrt{2} > 2, \quad (10.15)$$

что противоречит неравенству Белла (10.11). Такого рода эксперименты были действительно проведены. Результаты экспериментов подтвердили предсказания квантовой механики и показали, что неравенство Белла (10.11) не выполняется.

Покажем, что оператор  $\hat{S} = \frac{-Z_2 - X_2}{\sqrt{2}}$  действительно обладает собственными значениями  $\pm 1$  и найдем его измерительный базис.

Рассмотрим сначала оператор Адамара

$$\hat{H} = (\hat{X} + \hat{Z})/\sqrt{2} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} / \sqrt{2}.$$

Для него из п. 8.4.2 (8.37)–(8.41) находим  $\theta = \pi/4, \varphi = 0, \hat{n} = (\hat{x} + \hat{z})/\sqrt{2}$ . Собственные векторы оператора  $\hat{H}$ :

$$|+\rangle = \cos \frac{\pi}{8} |0\rangle + \sin \frac{\pi}{8} |1\rangle$$

с собственным значением  $n_+ = +1$  и

$$|-\rangle = -\sin \frac{\pi}{8} |0\rangle + \cos \frac{\pi}{8} |1\rangle$$

с собственным значением  $n_- = -1$ .

Соответственно, для оператора  $\hat{S} = -\hat{H}$  из (8.37)–(8.41) имеем  $\theta = 5\pi/4$ ,  $\varphi = 0$ . Единичный вектор, вдоль которого направлен вектор  $B$  в установке Штерна–Герлаха равен  $\hat{n} = -(\hat{x} + \hat{z})$  и собственные векторы:

$$|+\rangle = \sin \frac{\pi}{8} |0\rangle - \cos \frac{\pi}{8} |1\rangle$$

с собственным значением  $s = +1$  и

$$|-\rangle = -\cos \frac{\pi}{8} |0\rangle - \sin \frac{\pi}{8} |1\rangle$$

с собственным значением  $s = -1$ .

Аналогично доказывается, что оператор  $\hat{T} = (\hat{Z} - \hat{X})/\sqrt{2}$  имеет собственные значения  $\pm 1$  и находится его измерительный базис.

## Глава 11

# КВАНТОВЫЕ АЛГОРИТМЫ. ПРОБЛЕМА ФИЗИЧЕСКОЙ РЕАЛИЗАЦИИ КВАНТОВОГО КОМПЬЮТЕРА

В настоящей главе, на основе модели квантовых схем, рассматриваются принципы работы и вопросы экспериментальной реализации квантового компьютера. Хотя имеются и другие модели квантовых вычислений, квантовые схемы являются широко используемой и интуитивно наиболее легко воспринимаемой моделью. Это объясняется, прежде всего, тем, что, формально, квантовая схема является квантовым аналогом классической схемы. Соответственно, этапы вычислений на квантовом компьютере формально аналогичны этапам вычисления на классическом компьютере. В классическом компьютере, использующем биты, вычисления состоят из трех основных этапов:

1. приготовление входного состояния  $n$ -битового регистра;
2. совершение задаваемой алгоритмом последовательности логических операций над битами регистра;
3. считывание значений битов в конечном состоянии регистра.

В квантовом компьютере, использующем кубиты, вычисления состоят также из трех этапов, формально аналогичных классическим:

1. приготовление в вычислительном базисе начального состояния  $n$ -кубитового регистра;
2. применение, в соответствии с квантовой схемой, квантовых логических операторов к кубитам регистра;
3. Считывание информации о состоянии кубитов в конечном состоянии.

При этом, квантовый характер регистра и логических операторов позволяют использовать принципиально квантовые эффекты (суперпозиционные и перепутанные состояния кубитов, квантовый параллелизм и интерференцию конечных состояний), дающие экспоненциально большой выигрыш в ресурсах квантовых вычислений по сравнению с классическими вычислениями. Имеется еще одно существенное отличие квантового компьютера от классического. Классический компьютер, архитектура элементов которого является фиксированной, может быть запрограммирован, так что последовательность логических операций при решении конкретной задачи определяется программой. При переходе к другой задаче меняется лишь программа. В отличие от

этого, в квантовом компьютере конкретная квантовая схема является и алгоритмом решения этой конкретной задачи.

Первый демонстрационный квантовый алгоритм Дойча, а также практически интересные алгоритмы Шора и Гровера были открыты с использованием квантовых схем. Квантовые схемы используются и при решении задач моделирования квантовых систем. Большинство предложений по реализации квантового компьютера также используют модель квантовых схем.

В разделах 11.1–11.5 мы подробно рассмотрим квантовый алгоритм Дойча, в простой форме демонстрирующий принципы работы квантового компьютера. Обзор практически интересных квантовых алгоритмов дан в п. 11.6. Проблемы экспериментальной реализации квантового компьютера рассмотрены в п. 11.7, в п. 11.8 дан краткий обзор некоторых дополнительных практических приложений квантовой информации.

## 11.1. Квантовый алгоритм Дойча

В этой главе рассматривается исторически первый квантовый алгоритм Дойча, который послужил прототипом практически важного алгоритма Шора факторизации больших чисел. На примере относительно простого алгоритма Дойча можно уяснить, как работают три основных принципа, на которых основана работа квантового компьютера, дающего экспоненциально большой выигрыш в ресурсах, по сравнению с классическим компьютером: 1) принцип суперпозиции (экспоненциальный выигрыш в памяти), 2) квантовый параллелизм (экспоненциальный выигрыш в числе операций) и 3) квантовая интерференция (решение проблемы коллапса конечного суперпозиционного квантового состояния при его измерении).

## 11.2. Задача Дойча

Алгоритм Дойча для квантового компьютера дает решение задачи Дойча, которая состоит в следующем. Пусть есть два корреспондента — Алиса и Боб. У Алисы имеются  $2^n$  различных  $n$ -разрядных чисел  $x$ :  $0 \leq x \leq 2^n - 1$ . Она выбирает одно из этих чисел  $x_1$  и пересылает его Бобу. Боб выбирает тип Булевой функции  $f(x)$  от аргумента  $x$  из двух вариантов:

1. функция  $f(x)$  постоянна, т.е. либо  $f(x) = 0$  для всех  $x$ , либо  $f(x) = 1$  для всех  $x$
2. функция  $f(x)$  сбалансирована:  $f(x) = 0$  на половине значений  $x$  и  $f(x) = 1$  на другой половине значений  $x$ .

Затем Боб вычисляет значение функции выбранного типа  $f(x_1)$  и отправляет результат вычисления обратно Алисе. Алиса выбирает второе значение аргумента  $x_2$ , отдает его Бобу, который возвращает

ей вычисленное значение  $f(x_2)$  и т.д. (при этом функция уже не меняется). Задача состоит в том, чтобы Алиса за наименьшее число корреспонденций (т. е. за наименьшее число операций вычисления) определила тип функции  $f(x)$ , выбранной Бобом.

На классическом компьютере задача Дойча решается за  $\frac{2^n}{2} + 1$  операций вычисления  $f(x)$ , т.е. эта задача экспоненциальной сложности.

Рассмотрим, как эта задача решается на квантовом компьютере за линейное по  $n$  число операций.

### 11.3. Алгоритм Дойча для $n = 1$

Рассмотрим сначала простой случай  $n = 1$ . Для этого случая задача Дойча решается на двухкубитовом компьютере, схема которого показана на рис. 11.1.

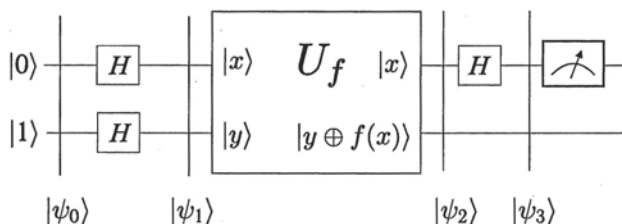


Рис. 11.1. Квантовый алгоритм Дойча для  $n = 1$

В зависимости от выбранного типа функции  $f(x)$  двухкубитовый оператор  $U_f$  принимает различный вид. Если функция  $f(x)$  постоянная; то возможны два случая:

1.  $f_1(0) = 0, f_1(1) = 0;$

$$U_{f_1} = \hat{I} \otimes \hat{I}, \quad (11.1)$$

где  $\hat{I}$  — единичный оператор.

2.  $f_2(0) = 1, f_2(1) = 1;$

$$U_{f_2} = \hat{I} \otimes \text{NOT}. \quad (11.2)$$

Если функция  $f(x)$  сбалансированная, то также возможны два случая:

1.  $f_3(x) = x;$

$$U_{f_3} = \text{CNOT}, \quad (11.3)$$

2.  $f_4(x) = \text{NOT } x;$

$$U_{f_4} = \text{CNOT} \cdot (\hat{I} \otimes \text{NOT}). \quad (11.4)$$

Рассмотрим, как работает квантовая схема рис. 11.1, решающая задачу Дойча. Начальный вектор состояния  $|\psi_0\rangle = |01\rangle$ . После лей-

ствия операторов Адамара на первый и второй кубиты получаем вектор состояния

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

Можно показать, что действие оператора  $U_f$ , определяемого формулами (11.1)–(11.4), на состояние  $|x\rangle \otimes \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$  дает (см. вывод формулы (11.10))

$$U_f \left[ |x\rangle \otimes \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right] = (-1)^{f(x)} |x\rangle \otimes \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (11.5)$$

Используя правило (11.5), запишем результат действия  $U_f$  на состояние  $|\psi_1\rangle$

$$\begin{aligned} U_f |\psi_1\rangle &= U_f \left( \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right) = \\ &= (-1)^{f(0)} \frac{|0\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} + (-1)^{f(1)} \frac{|1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}. \end{aligned}$$

Если  $f(x)$  — постоянная, например,  $f(0) = f(1) = 0$ , то

$$U_f |\psi_1\rangle = |\psi_2\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (11.6)$$

Если  $f(x)$  — сбалансированная, например,  $f(0) = 0, f(1) = 1$ , то

$$U_f |\psi_1\rangle = |\psi_2\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (11.7)$$

После действия оператора Адамара на первый кубит получаем состояние

$$|\psi_3\rangle = \begin{cases} |0\rangle \otimes \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}, & \text{если } f(x) \text{ — постоянная,} \\ |1\rangle \otimes \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}, & \text{если } f(x) \text{ — сбалансированная.} \end{cases}$$

В конце вычисления производится измерение первого кубита. Если при этом получено состояние  $|0\rangle$ , то  $f(x)$  — постоянная, если  $|1\rangle$ , то  $f(x)$  — сбалансированная. Этим завершается решение задачи Дойча при  $n = 1$  на двухкубитовом квантовом компьютере, рис. 11.1. При вычислении на классическом компьютере для ее решения потребуется  $2^n/2 + 1 = 2$  операций вычисления значения  $f(x)$ . На квантовом компьютере задача решается за одно параллельное вычисление значения  $f(x)$  на квантовом процессоре  $U_f$ . Однако, при этом требуется провести еще дополнительно три операции Адамара и одну операцию измерения, поэтому преимущества квантового компьютера в случае  $n = 1$  никакого нет. Отметим, что, если за элементарную операцию

принимать поворот вектора Блоха, то процессор  $U_f$  в случае  $n = 1$ , (11.1)–(11.4), вычисляющий суперпозицию двух значений однобитовой функции  $f(x) = 0, 1$ ,  $x = 0, 1$ , делает это за четыре операции (см. п. 11.4). Число элементарных операций, выполняемых квантовым процессором  $U_f$  при одном параллельном вычислении  $2^n$  значений однобитовой функции  $f(x)$ , растет линейно с ростом числа разрядов (битов)  $n$  в ее аргументах. Благодаря такой линейной зависимости, в квантовом компьютере достигается экспоненциально большой выигрыш в числе операций (см. п. 11.5), который особенно велик при  $n \gg 1$ .

### 11.4. Физическая реализация оператора CNOT для случая спинов. Пример квантового параллельного вычисления

Как следует из раздела 11.2, логический двухкубитовый оператор (процессор)  $U_f$ , вычисляющий значения булевой функции  $f(x)$ , реализуется с помощью двухкубитового оператора CNOT и однокубитовых операций. С реализацией однокубитовых операций с помощью операторов поворотов вектора Блоха на сфере единичного радиуса мы познакомились в главе 7. Теперь рассмотрим вопрос о том, как с помощью этих однокубитовых операторов поворота и одного двухкубитового оператора можно реализовать операцию CNOT.

Гамильтониан взаимодействия двух спинов  $c$  и  $t$  ( $c$  — контрольный кубит,  $t$  — целевой кубит), ответственный за действие двухкубитового оператора:  $\hat{H}_{ct} = J_{ct} \hat{Z}_c \hat{Z}_t$ , где  $J_{ct}$  — константа так называемого обменного взаимодействия, зависящая от расстояния между спинами  $c$  и  $t$ . В нашем распоряжении имеются также однокубитовые операторы поворота вокруг осей  $y$  и  $z$  на угол  $\alpha$ :  $R_y(\alpha)$ ,  $R_z(\alpha)$ . Отметим, что гамильтониан двухкубитового взаимодействия можно представить в виде, аналогичном (7.16):  $H_{ct} = \frac{\hbar \omega_{ct}}{2} Z_t$ , где обозначено  $\omega_{ct} = 2J_{ct}Z_c/\hbar$ . При фиксированном значении проекции контрольного спина  $c$  на ось  $z$ , этот гамильтониан вращает проекцию целевого спина  $t$  на плоскость  $z = 0$  вокруг оси  $z$  либо по часовой стрелке (контрольный кубит в состоянии  $|0\rangle$ ), либо против часовой стрелке (контрольный кубит в состоянии  $|1\rangle$ ) (см. Главу 7). Последовательность операций над целевым кубитом  $t$ , которая реализует оператор CNOT, в случае, когда контрольный кубит  $c$  находится в базисном состоянии ( $|0\rangle$  или  $|1\rangle$ ), схематически показана на рис. 11.2.

Состояние спина  $c$  в этой последовательности не меняется. Пусть  $c$  находится в состоянии  $|0\rangle$  (спин вверх) (рис. 11.2, а) Действуем оператором поворота  $R_y(\pi/2)$  на спин  $t$ , находящийся в состоянии  $|0\rangle$ . Затем под действием оператора  $R_{zct}(\pi/2)$  происходит поворот спина  $t$  вокруг оси  $z$  по часовой стрелке на угол  $\pi/2$ . Затем действуют

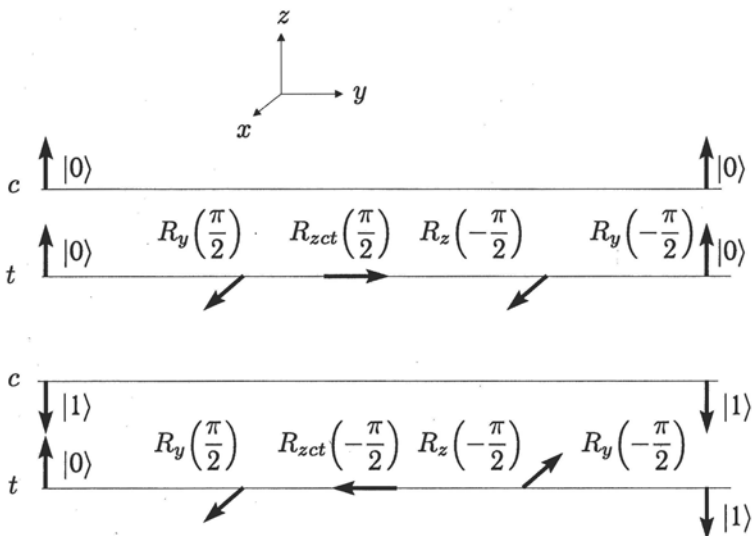


Рис. 11.2. Реализация оператора CNOT с помощью однокубитовых операторов поворота  $R_y(\alpha)$  и  $R_z(\alpha)$  и двухкубитового оператора  $R_{zct}(\alpha)$ . а) контрольный кубит  $c$  исходно находится в состоянии  $|0\rangle$ ; б) контрольный кубит  $c$  исходно в состоянии  $|1\rangle$

последовательно операторы  $R_z(-\pi/2)$  и  $R_y(-\pi/2)$ . В результате спин  $t$  оказывается в конечном состоянии  $|0\rangle$ .

Если контрольный кубит  $c$  изначально находится в состоянии  $|1\rangle$  (спин вниз) (рис. 11.2, б), то последовательность операций такая же, как и в случае а, но поворот спина  $t$  в результате действия оператора  $R_{zct}(-\pi/2)$  происходит вокруг оси  $z$  против часовой стрелки на угол  $\pi/2$ . В результате целевой кубит  $t$  оказывается в состоянии  $|1\rangle$  со спином вниз. Таким образом, схема рис. 11.2 действительно реализует операцию CNOT, когда контрольный кубит находится в базисном состоянии  $|0\rangle$  (верхняя последовательность операций на Рис. 11.3) или  $|1\rangle$  (нижняя последовательность операций). Конечное двухкубитовое состояние при этом оказывается сепарабельным (не перепутанным):  $|00\rangle$  в первом случае и  $|11\rangle$  во втором. Видно, что эти две последовательности, если судить по действиям вычислителя, являются одной и той же:

$$R_y\left(\frac{\pi}{2}\right)R_{zct}\left(\pm\frac{\pi}{2}\right)R_z\left(-\frac{\pi}{2}\right)R_y\left(-\frac{\pi}{2}\right), \quad (11.8)$$

поскольку операция  $R_{zct}\left(+\frac{\pi}{2}\right)$  или  $R_{zct}\left(-\frac{\pi}{2}\right)$  выполняется автоматически без его участия.

Если же контрольный кубит  $c$  находится в суперпозиционном состоянии  $(|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ , то над целевым кубитом  $t$  выполняется та же последовательность операций (11.8). При этом одновременно и незави-

симо (параллельно) выполняются верхняя и нижняя последовательности операций, изображенные на рис. 11.2. В частности, двухкубитовые операции  $R_{zct}(\pm \frac{\pi}{2})$  выполняются одновременно. Целевой спин  $t$  при этом виртуально совершает два вращения вокруг оси  $z$  одновременно по часовой и против часовой стрелки. Результаты этих двух параллельных виртуальных вычислений складываются и на выходе получается перепутанное двухкубитовое состояние  $(|00\rangle + |11\rangle)/\sqrt{2}$ . Эта операция дает конкретный пример квантового параллельного вычисления.

## 11.5. Алгоритм Дойча при произвольном $n$

Обобщим квантовую схему рис. 11.1 на случай произвольного числа кубитов  $n$  в регистре данных, рис. 11.3. Этот квантовый компьютер работает так. Начальное состояние

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

После совершения  $n$  операций Адамара в регистре данных и одной операции Адамара в нижнем регистре получается вектор состояния

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle \otimes \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (11.9)$$

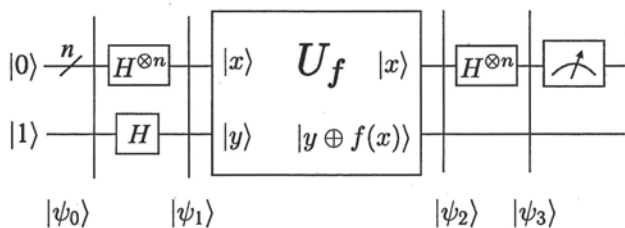


Рис. 11.3. Квантовый алгоритм Дойча для произвольного  $n$

В состоянии  $|\psi_1\rangle$  в регистре данных в суперпозиционном виде записано  $2^n$   $n$ -разрядных чисел — аргументов функции  $f(x)$ . В соответствии с алгоритмом (рис. 11.3) применяем оператор  $U_f$  к состоянию  $|\psi_1\rangle$ . Для этого сначала действуем оператором  $U_f$  на каждый член в сумме (11.9). Имеем для произвольного  $x$  из (11.9):

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{2^n}} |x\rangle \otimes \left[ \frac{(|0\rangle \oplus f(x)) - (|1\rangle \oplus f(x))}{\sqrt{2}} \right] = \\ & = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2^n}} |x\rangle \otimes \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}, & \text{если } f(x) = 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2^n}} |x\rangle \otimes \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}, & \text{если } f(x) = 1 \end{cases} = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\sqrt{2^n}} |x\rangle \otimes (-1)^{f(x)} \left[ \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right] = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2^n}} (-1)^{f(x)} |x\rangle \otimes \left[ \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right]. \quad (11.10)
\end{aligned}$$

Затем суммируем результаты и получаем

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

В результате, за одну операцию квантового параллельного вычисления получена информация о  $2^n$  значениях функции  $f(x)$ .

Далее следует применить оператор Адамара  $H^{\otimes n}$  к  $n$ -кубитовому регистру данных, находящемуся в суперпозиционном состоянии. Базисными векторами в суперпозиции являются  $|x\rangle = |x_0, x_1, \dots, x_{n-1}\rangle$ .

Рассмотрим действие одного оператора Адамара на один из кубитов в базисном векторе

$$H|x_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{z_i=0,1} (-1)^{x_i z_i} |z_i\rangle. \quad (11.11)$$

Тогда находим

$$\begin{aligned}
H^{\otimes n}|x\rangle &= H^{\otimes n}|x_0, \dots, x_{n-1}\rangle = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{z_0, \dots, z_{n-1}=0,1} (-1)^{x_0 z_0 + \dots + x_{n-1} z_{n-1}} |z_0, \dots, z_{n-1}\rangle. \quad (11.12)
\end{aligned}$$

С учетом (11.12) имеем

$$\begin{aligned}
|\psi_3\rangle &= H^{\otimes n}|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} H^{\otimes n} (-1)^{f(x)} |x\rangle \otimes \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} = \\
&= \frac{1}{2^n} \sum_{x, z_0, \dots, z_{n-1}} (-1)^{f(x) + z_0 x_0 + \dots + z_{n-1} x_{n-1}} |z_0, \dots, z_{n-1}\rangle \otimes \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} = \\
&= |\psi_{out}\rangle \otimes \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (11.13)
\end{aligned}$$

Регистр данных в конечном состоянии  $|\psi_3\rangle$ , находится в суперпозиционном состоянии  $|\psi_{out}\rangle$ . Выделим в этой суперпозиции состояние  $|0 \dots 0\rangle$ , которое получается, если все  $z_i = 0$ :

$$|\psi_{out}\rangle = A_{0 \dots 0} |0 \dots 0\rangle + \sum' A_{z'_0, z'_1, \dots, z'_{n-1}} |z'_0, z'_1, \dots, z'_{n-1}\rangle, \quad (11.14)$$

где хотя бы одно из значений  $z'_0, z'_1, \dots, z'_{n-1}$  равно 1.

Амплитуда состояния  $|0 \dots 0\rangle$

$$A_{0\dots 0} = \frac{1}{2^n} \sum_x (-1)^{f(x)}. \quad (11.15)$$

Если  $f(x)$  постоянна (либо 0, либо 1), то  $A_{0\dots 0} = \pm 1$ . Если  $f(x)$  сбалансированная, то на половине значений суммируются  $+1$ , а на другой половине суммируются  $-1$ , в результате  $A_{0\dots 0} = 0$ .

Учтем теперь, что вектор  $|\psi_{out}\rangle$  нормирован на единицу, т.е.  $\langle \psi_{out} | \psi_{out} \rangle = 1$ , и, кроме этого, состояние  $|0 \dots 0\rangle$  ортогонально любому из состояний  $|z'_0, z'_1, \dots, z'_{n-1}\rangle$  в (11.14) и  $\langle 0 \dots 0 | 0 \dots 0 \rangle = 1$ . Значит, если  $A_{0\dots 0} = \pm 1$ , то в (11.14)  $\sum' = 0$ , то есть происходит взаимная компенсация (деструктивная интерференция) членов в сумме  $\sum'$ . Поэтому, если при измерении состояния регистра данных  $|\psi_{out}\rangle$  на всех  $n$  кубитах получается  $|0\rangle$ , то  $f(x)$  — постоянна. Если же при таком измерении получается хотя бы одно состояние  $|1\rangle$ , то  $f(x)$  — сбалансированная функция. Таким образом, благодаря выбору задачи и построению адекватного квантового алгоритма, можно получить такое выходное состояние, что за одно измерение состояния регистра данных можно получить решение задачи. Из схемы на рис. 11.3 видно, что задача Дойча при произвольном  $n$  решается на квантовом компьютере за линейное по  $n$  число операций, то есть получается экспоненциальный выигрыш по сравнению с  $2^n/2 + 1$  операциями, требуемыми для решения этой задачи на классическом компьютере.

## 11.6. Квантовые алгоритмы

Рассмотрение квантового алгоритма Дойча в п.11.5 показывает, что при измерении конечного суперпозиционного состояния происходит его коллапс к одной из компонент суперпозиции, состоящей из последовательности нулей и единиц. Вся остальная информация, содержащаяся в суперпозиционном состоянии, необратимо теряется. Эта трудность является общей для всех квантовых алгоритмов и налагает серьезные ограничения на их возможные классы, требуя от алгоритма создания в конце вычислений такой «умной» суперпозиции, которая при единственном измерении давала бы решение поставленной задачи. В алгоритме Дойча конечное состояние состоит либо из одного базисного состояния с нулями на всех кубитах, либо представляет собой такую суперпозицию состояний кубитов, в котором каждое содержит хотя бы одну единицу. Одно измерение такого конечного состояния дает решение задачи Дойча по распознаванию типа функции.

Алгоритм Дойча демонстрирует то, что квантовые компьютеры могут решать некоторые вычислительные задачи более эффективно, чем классические компьютеры. Однако, задача Дойча является демонстрационной и не представляет практического интереса. В этом разделе

кратко рассматриваются квантовые алгоритмы, интересные с точки зрения практических приложений.

На настоящий момент имеются три основных класса квантовых алгоритмов и целый ряд дополнительных квантовых алгоритмов. Первый класс основан на квантовой версии преобразования Фурье. Алгоритм Дойча и алгоритм Шора — факторизации больших чисел, принадлежат к этому классу. Эти два алгоритма и остальные «экспоненциально быстрые» алгоритмы являются частными случаями общего для этого класса алгоритма Китаева.

Второй класс алгоритмов — это алгоритмы поиска в неупорядоченной базе данных, в частности, алгоритм Гровера. Наконец, третий широкий класс квантовых алгоритмов — это алгоритмы аналогового моделирования на квантовых компьютерах различных квантовых систем и процессов (атомов, молекул, твердых тел, химических реакций и т.д.). В последнее время предложены также эффективные квантовые алгоритмы решения систем дифференциальных уравнений.

**11.6.1. Алгоритм факторизации больших чисел.** Целый ряд современных схем кодирования, включая широко используемый RSA код (названный так по именам его создателей: Rivest, Shamir и Adelman), основаны на использовании произведения двух достаточно больших простых чисел. Это произведение используется в качестве открытого кода для передачи сообщения, а два простых числа, составляющих это произведение, используется в качестве секретного ключа для расшифровки сообщения. Нахождение этих сомножителей необходимо для расшифровки перехваченного кодированного сообщения. Наилучший из классических алгоритмов факторизации большого числа требует времени, которое растет сверхполиномиально с увеличением числа цифр в нем, и поэтому не может быть реализован на классическом компьютере при больших числах (содержащих многие сотни цифр). Квантовый алгоритм Шора факторизации больших чисел  $N$  (1994 г.) факторизует заданное число за время, которое растет лишь как  $(\log N)^3$  и может расшифровать сообщение достаточно быстро. Этот алгоритм вычисляет все значения определенной функции, используя квантовый параллелизм и перепутанность, и затем применяет квантовое преобразование Фурье. Измерение полученного состояния затем дает значение, из которого можно извлечь период этой функции и использовать его для факторизации заданного числа.

Квантовый алгоритм Шора для небольшого числа кубитов был реализован с использованием квантовых процессоров на основе ядерных спинов и ионов в ловушках (см. разд. 11.7). Наибольшее число, которое было факторизовано с помощью этого алгоритма на квантовом компьютере — это 15. Для того чтобы расшифровать обычные 1024-битные RSA коды, алгоритм Шора должен быть применен к 1024-битному числу, что требует создания квантового компьютера со многими сотнями кубитов.

**11.6.2. Алгоритм поиска.** Вторым классом алгоритмов являются квантовые алгоритмы поиска. Наиболее известный — алгоритм Гровера (1996 г.), решает следующую задачу. В базе неупорядоченных данных, содержащей  $n$  элементов, требуется найти элемент с заданными свойствами. Классический алгоритм решения этой задачи требует совершения  $n$  операций. Квантовый алгоритм Гровера требует всего  $\sqrt{n}$  операций.

**11.6.3. Моделирование квантовых систем.** Реальным практическим применением квантового компьютера уже в настоящее время является моделирование многочастичных квантовых систем, к которым можно отнести химические реакции, большие молекулы, твердые тела и биологические объекты. Сами многокубитовые квантовые системы могут быть использованы для изучения существенно квантовых эффектов, таких как суперпозиция, запутанность состояний, особенности квантовой динамики. Перспективным является также решение задач нанoeлектроники, ядерной физики, энергетики, материаловедения и нанотехнологий с помощью квантового моделирования. Число комплексных чисел требуемых для описания квантовой системы растет экспоненциально быстро с ростом размера системы. Например, для моделирования системы  $n$  двухуровневых атомов требуется  $2^n$  комплексных чисел. В общем случае, надо задать  $c^n$  комплексных чисел, где  $c$  — константа, зависящая от рассматриваемой системы. Такую квантовую систему можно моделировать на квантовом компьютере, содержащем  $kn$  кубитов, где  $k$  — константа, зависящая от особенностей рассматриваемой системы. Принципиальной трудностью такого моделирования является извлечение информации из конечного вектора состояния системы  $kn$  кубитов. В результате коллапса выходного суперпозиционного вектора состояния получается лишь одна из его компонент, содержащая лишь  $kn$  битов информации, остальные биты из числа  $c^n$  бит «скрытой» информации необратимо теряются. Как постановка задачи, так и алгоритм квантового моделирования должны учитывать это обстоятельство. В последнее время предложен ряд алгоритмов для решения задач квантовой химии (энергетические спектры молекул, скорости и динамика химических реакций) и часть из них была реализована с использованием спиновых и фотонных квантовых компьютеров, а также компьютеров на ионах в ловушках с регистрами, состоящими из нескольких кубитов. Большой импульс всей области моделирования квантовых систем и построению квантовых алгоритмов придает создание 128-ми кубитового аналогового квантового компьютера на сверхпроводниках (см. п. 11.7.5)

**11.6.4. Квантовые алгоритмы решения систем линейных дифференциальных уравнений.** Моделирование квантовых систем сводится к решению системы однородных линейных дифференциальных уравнений. В последнее время квантовые алгоритмы моделирования

были обобщены на общий случай системы  $n$  неоднородных линейных дифференциальных уравнений вида

$$dx/dt = A(t)x(t) + b(t), \quad (11.16)$$

где  $x$  и  $b$  являются  $n$ -компонентными векторами,  $A$  — матрица  $n \times n$ . Число операций, требуемых для решения этой системы на классическом компьютере, растет линейно с  $n$ . Квантовый алгоритм требует полиномиального от  $\log n$  времени.

Эволюция квантовых систем в матричном представлении описывается уравнениями типа (11.16), но с  $b(t) = 0$ . В классической физике системы обыкновенных дифференциальных уравнений типа (11.16) с очень большим значением  $n$  получаются при дискретизации линейных дифференциальных уравнений с частными производными, таких как уравнения диффузии частиц и теплопроводности, уравнения Максвелла и другие уравнения. Квантовый компьютер может быть эффективно использован для получения глобальных характеристик решений этих уравнений.

## 11.7. Экспериментальная реализация квантового компьютера

При конкретной физической реализации квантового компьютера необходимо в комплексе решить следующие основные проблемы:

- выбрать физическую систему, которая обеспечит возможность иметь в квантовом компьютере достаточное число управляемых кубитов для решения конкретной задачи,
- определить физический механизм, позволяющий обеспечить взаимодействие между кубитами,
- определить способ селективного управления состояниями отдельных кубитов,
- определить способ измерения состояния кубитов на выходе квантового компьютера.

При этом кубиты в регистрах квантового компьютера должны иметь большое время декогеренции, достаточное для выполнения всех логических операций, предписанных алгоритмом решения поставленной задачи. В настоящее время разрабатываются сразу несколько направлений реализации квантового компьютера с использованием различных микрообъектов в качестве кубитов.

**11.7.1. Ядерные спины в молекулах.** Спиновый квантовый компьютер использует в качестве кубитов ядерные спины больших молекул. Это исторически первый прототип квантового компьютера. Управление кубитами осуществляется с помощью магнитных полей. Ядра различных атомов в молекуле имеют различные значения спинового гироманнитного отношения и поэтому, будучи помещены в постоянное магнитное поле, дают отклики на скрещенное с ним переменное

(радиочастотное) магнитное поле на различных частотах (см. п. 7.4). Это дает возможность избирательно управлять ориентацией спинов путем выбора частоты, амплитуды и длительности радиочастотных импульсов. Оператор CNOT реализуется с использованием обменного спин-спинового взаимодействия (см. п. 11.4). Несмотря на то, что создание полномасштабного квантового компьютера с регистром, содержащим сотни и тысячи кубитов, на этом пути вряд ли возможно (по оценкам, компьютер на ядерных спинах сможет оперировать не более чем с 20 кубитами), такие «малые» квантовые компьютеры, способны решать задачи, которые не решаются на классическом компьютере. Однако пока созданы лишь простейшие прототипы жидкостных ЯМР квантовых компьютеров на органических молекулах с числом ядерных спинов-кубитов  $n \sim 7$ , молекулы в которых представляют собой большой ансамбль независимо работающих компьютеров. На них были экспериментально продемонстрированы некоторые квантовые алгоритмы решения трудно разрешимых на классических компьютерах задач (алгоритмы Гровера, Дойча–Джозса, Шора, аналоговое моделирование стационарных состояний молекул и кинетики химических реакций). С их помощью продемонстрированы также уникальные свойства квантовых систем связи, таких как телепортация, новые возможности в криптографии, опробованы эффективные методы коррекции квантовых ошибок. Однако создание на этом пути полномасштабного ЯМР квантового компьютера представляется невозможным из-за быстро уменьшающегося с числом кубитов выходного сигнала ЯМР.

**11.7.2. Ионы и атомы в электромагнитных ловушках.** В квантовых компьютерах на ионах в электромагнитных ловушках используются два энергетических уровня иона, излучательный переход между которыми запрещен. Каждый ион в цепочке ионов, захваченных в электромагнитные ловушки, соответствует одному кубиту, Управление кубитом осуществляется с помощью лазерных импульсов, а взаимодействие между кубитами, необходимое для осуществления двухкубитовой операции CNOT, осуществляется через коллективную колебательную моду цепочки ионов. К настоящему времени созданы прототипы квантового компьютера на ионах в ловушках, содержащие 8 кубитов (2005 г.) и 14 кубитов (2011 г.) в регистре. Относительно небольшое увеличение числа кубитов в регистре квантового компьютера приводит, благодаря суперпозиции состояний кубитов, к огромному росту объема памяти. В первом случае регистр может одновременно находиться в  $2^8 = 256$  состояниях, а во втором  $2^{14} = 16384$  состояниях! С помощью таких квантовых компьютеров реализован ряд квантовых алгоритмов и телепортация. Перспективным направлением, позволяющим создать полномасштабный квантовый компьютер, является использование, вместо лазерного, микроволнового излучения для осуществления управления ионами, помещенными в волновод.

Наряду с ионами, захваченными в электростатических ловушках, роль кубитов могут выполнять также и нейтральные атомы, захваченные в оптические ловушки, создаваемые интерференцией лазерных пучков. Контроль квантовых состояний атомов осуществляется с помощью жестко сфокусированных лазерных пучков и микроволнового излучения.

**11.7.3. Единичные фотоны как кубиты.** Распространяющийся со скоростью света фотон имеет два состояния вектора поляризации ( $H$ ) и ( $V$ ), ортогональных друг другу и ортогональных направлению распространения фотона. Горизонтально поляризованный фотон ( $H$ ) представляет базисное состояние кубита  $|0\rangle$ , а вертикально поляризованный ( $V$ ) — базисное состояние  $|1\rangle$ :  $|0\rangle = |H\rangle$ ,  $|1\rangle = |V\rangle$ . Произвольное суперпозиционное состояние фотона  $|\psi\rangle = a|H\rangle + b|V\rangle$ , где  $a$  и  $b$  — произвольные комплексные числа, удовлетворяющие условию нормировки  $|a|^2 + |b|^2 = 1$ , может быть представлено, как и в случае спина, на Bloch sphere (рис. 7.1) и однокубитовые операции представляют собой вращение вектора Блоха. Экспериментально, такие операции выполняются с помощью двулучепреломляющей волновой пластины, которая задерживает фазу одной поляризации на определенную долю длины волны по отношению к ортогональной к ней поляризации, вызывая вращение вектора Блоха на Bloch sphere. Для более полного ознакомления с этим направлением в квантовой информации можно рекомендовать курс [22].

В настоящее время теоретически показано, что полномасштабный квантовый компьютер (с универсальным набором квантовых операторов и, считыванием результата) может быть создан на основе источников единичных фотонов, детекторов и линейных оптических элементов без использования каких-либо элементов нелинейной оптики. К настоящему времени созданы простейшие фотонные компьютеры (с несколькими фотонами), которые были использованы для демонстрационной реализации простейших квантовых алгоритмов.

**11.7.4. Компьютер на квантовых точках.** Квантовой точкой может служить достаточно маленький (с размером порядка 10 нм и меньше) кристалл полупроводника с захваченным электроном (п. 4.4). Электрон в таком микрокристалле ведет себя как в трёхмерной потенциальной яме: он имеет дискретные уровни энергии. Характерная частота перехода между энергетическими уровнями порядка  $\pi^2 \hbar^2 / 2m_e^* a^2$ , где  $m_e^*$  — эффективная масса электрона,  $a$  — характерный размер квантовой точки (порядка нанометра). Квантовые точки называют еще искусственными атомами. При этом, в отличие от атомов, частотами переходов можно управлять, меняя размер квантовой точки  $a$ .

Для реализации кубита используются два энергетических уровня электрона: основной  $|0\rangle$  и первый возбужденный  $|1\rangle$ . Операция NOT выполняется с помощью лазерных импульсов, переключающих кубит между этими двумя состояниями. Более сложные логические операции

осуществляются с помощью квантовых точек, объединенных в пары. Если длительность лазерного импульса равна половине той, которая требуется для осуществления операции NOT, то кубит переводится в суперпозиционное состояние  $|\psi\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$  (см. п. 8.3.2).

**11.7.5. Квантовый компьютер на сверхпроводниках. Макроскопическая квантовая физика.** В 2011 году канадской фирмой D-wave создан и продан за 10 млн. долларов первый коммерческий квантовый компьютер D-Wave-1 (DW-1) на 128 кубитах. Покупатель — крупнейшая корпорация военно-промышленного комплекса США Lockheed Martin. Назначение, принцип действия и архитектура DW-1 отличаются от рассмотренных выше квантовых компьютеров, основанных на квантовых схемах. Необычными являются также и макроскопически большие кубиты в регистре этого квантового компьютера, основанные на использовании сверхпроводящих (джозефсоновских) контактов. Чтобы представить себе, как работают сверхпроводящие кубиты и использующий их квантовый аналоговый компьютер, надо сначала рассмотреть физический механизм явления сверхпроводимости и принципы функционирования джозефсоновского контакта.

При сверхнизких температурах в один или несколько кельвин электроны (фермионы) в сверхпроводящем металле, благодаря электрон-фононному взаимодействию, спариваются и образуют так называемые куперовские пары — бозоны с нулевым спином, нулевым импульсом и зарядом  $-2e$ . Благодаря взаимодействию бозонов друг с другом (также обусловленным электрон-фононным взаимодействием) между ними возникают корреляции, и, при определенной критической температуре, происходит фазовый переход в состояние сверхпроводимости, при котором в электронном энергетическом спектре появляется щель — запрещенная зона шириной  $\Delta$ . Выше щели расположены одноэлектронные энергетические уровни. Бозоны, не подчиняющиеся принципу Паули, переходят в одно и то же (основное) квантовое состояние с энергией, лежащей ниже дна щели. Такое скоррелированное состояние газа бозонов, находящихся в одном квантовом состоянии, называется бозе-конденсатом. Бозе-конденсат во всем сверхпроводнике, как целое, описывается одной комплексной волновой функцией  $\psi = A \exp(i\varphi)$  с фиксированной для всего конденсата фазой  $\varphi$  (макроскопическая волновая функция Ландау–Гинзбурга), т.е. ведет себя как одна квантовая частица. Образование такого когерентного состояния ансамбля многих частиц в протяженном образце макроскопических размеров представляет собой пример явления макроскопической квантовой физики. В наиболее часто используемых сверхпроводниках — ниобии и алюминии, критическая температура сверхпроводящего перехода  $T_c$  равна, соответственно, 9.3 К и 1.2 К.

Возбуждение куперовской пары из бозе-конденсата в одноэлектронные состояния, лежащие над щелью, приводит к ее распаду на два независимых электрона. При достаточно большом числе возбужденных

и распавшихся куперовских пар когерентное состояние бозе-конденсата разрушается и сверхпроводимость исчезает.

Если в когерентной системе заряженных бозонов ( $T < T_c$ ) создать электрический ток  $J$  (направленное движение носителей заряда  $-2e$  со скоростью  $v$ ), то он будет протекать по сверхпроводнику без сопротивления, если скорость  $v < v_c$  — критической скорости (т.е., если ток  $J < J_c$  — критического тока). Отсутствие электрического сопротивления объясняется тем, что куперовские пары в бозе-конденсате движутся без рассеяния. Упругое рассеяние невозможно, поскольку имеется только одно состояние бозе-конденсата, а для неупругого рассеяния куперовской пары надо перевести два электрона в состояние, находящееся над щелью, т.е. затратить энергию  $2\Delta$ . Если скорость направленного движения куперовской пары  $v < v_c \sim \Delta$ , то ее кинетической энергии недостаточно для преодоления этого энергетического барьера и пара движется без рассеяния (сверхпроводящий ток).

Если теперь такой сверхпроводник разделить на две части тонким слоем изолятора, то получается так называемый контакт Джозефсона (рис. 11.4). При этом состояние конденсата слева от контакта описывается волновой функцией  $\psi_1 = A \exp(i\varphi_1)$ , а справа от контакта — волновой функцией  $\psi_2 = A \exp(i\varphi_2)$  с другой фазой.

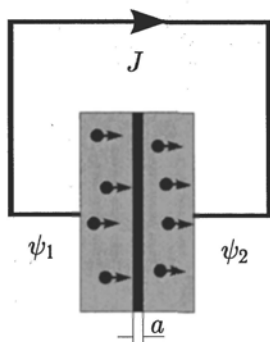


Рис. 11.4. Контакт Джозефсона. Сверхпроводник разделен тонким слоем диэлектрика толщины  $a$  (темная полоса). Левая часть сверхпроводника находится в когерентном состоянии с волновой функцией  $\psi_1 = A \exp(i\varphi_1)$ , а правая — в состоянии с волновой функцией  $\psi_2 = A \exp(i\varphi_2)$ . Через контакт протекает ток  $J$ , переносимый куперовскими парами, туннелирующими через потенциальный барьер, создаваемый диэлектриком

Если толщина слоя мала ( $a \sim 1$  нм), то происходит синхронизация фаз и волновая функция  $\psi_2 = A \exp(i\varphi_1 + \delta)$ , где разность фаз  $\delta$  — мала. При этом через контакт протекает постоянный электрический ток с плотностью, пропорциональной разности фаз

$$j \approx \delta \left( 2e \frac{\hbar}{m_e^* a} |A|^2 \right). \quad (11.17)$$

Выражение в скобках в (11.17) по структуре аналогично формуле для классической плотности тока, переносимого частицами с зарядом  $q$ :  $j \approx qvn$ , где  $v$  — скорость частиц,  $n$  — объемная плотность числа частиц (роль  $n$  в (11.17) играет  $|A|^2$ ).

Формула (11.17) следует из формулы (2.43), если в последней положить  $\psi = \psi_1$  и  $\frac{\partial \psi}{\partial x} \approx (\psi_2 - \psi_1)/a \approx \psi_1 i \delta/a$ . Принципиально то, что квантовый электрический ток (11.17) протекает стационарно без наличия какой-либо разности потенциалов на контакте. Направление тока определяется знаком  $\delta$ . Поскольку разность фаз  $\delta$  устанавливается случайно, то и направление тока в контуре (по часовой стрелке или против ее) выбирается случайным образом.

Поместим теперь замкнутый контур с контактом Джозефсона в постоянное магнитное поле, создающее внешний магнитный поток, пронизывающий контур. К этому внешнему потоку прибавляется внутренний магнитный поток, создаваемый круговым сверхпроводящим током в контуре, так что полный магнитный поток в контуре становится равным некоторому значению  $\Phi$ . Из теории сверхпроводимости и эксперимента известно, что магнитный поток  $\Phi$ , пронизывающий контур с сверхпроводящим током, квантуется и может принимать только дискретные значения  $\Phi = \Phi_0 N$ , где квант потока  $\Phi_0 = 2\pi\hbar/q$  ( $q = 2e$ ), а квантовое число  $N=0,1,2,\dots$ . Потенциальная энергия контура  $V(\Phi)$  при этом является периодической функцией потока  $\Phi$  (рис. 11.5). Если внешний магнитный поток отличается от этих квантованных значений, то в контуре возникает круговой ток, который своим магнитным полем доводит значение суммарного потока  $\Phi$  до ближайшего минимума.

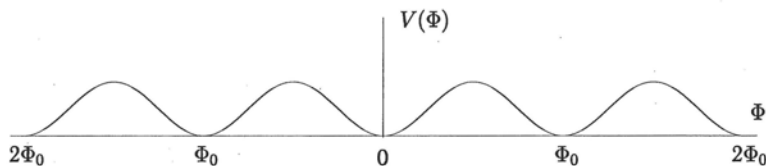


Рис. 11.5. Потенциальная энергия замкнутого контура с контактом Джозефсона как функция магнитного потока  $\Phi$ , пронизывающего этот контур. Квантовые состояния с  $\Phi = 0$  ( $N = 0$ ) и  $\Phi = \Phi_0$  ( $N = 1$ ) можно использовать для реализации магнитного кубита

Пусть внешний поток равен  $\Phi_0/2$  (см. рис. 11.5). Тогда с равной вероятностью в контуре возбуждаются круговые сверхпроводящие токи, текущие в противоположных направлениях («по часовой стрелке» или «против часовой стрелки»), переводящие контур либо в минимум с  $N = 0$  ( $\Phi = 0$ ), либо в соседний минимум с  $N = 1$  ( $\Phi = \Phi_0$ ). Но каждый из этих круговых токов создает магнитный момент, направленный «вверх» или «вниз». Таким образом, мы получили аналог спина —

квантовую систему с двумя состояниями: состояние с магнитным моментом «вверх» —  $|\uparrow\rangle$  и состояние с магнитным моментом «вниз» —  $|\downarrow\rangle$ . Волновые функции этих состояний  $|\uparrow\rangle$  и  $|\downarrow\rangle$  — гауссово-подобные функции, центрированные в левом ( $\Phi = 0$ ) и правом ( $\Phi = \Phi_0$ ) минимумах (рис. 11.5). Система вырождена по энергии — квазиспиновые состояния  $|\uparrow\rangle$  ( $N = 0$ ) и  $|\downarrow\rangle$  ( $N = 1$ ) имеют одну и ту же энергию. Такое представление квантового состояния джозефсоновского контура можно назвать спиновым (или токовым) представлением.

Однако, при учете туннелирования фазы  $\delta$  из одного минимума в другой и обратно (эффект макроскопической квантовой физики, который мы не имеем возможности рассмотреть здесь, см. [8]), вырождение снимается, состояния  $|\downarrow\rangle$  и  $|\uparrow\rangle$  смешиваются, в результате чего происходит расщепление исходного вырожденного уровня энергии на два уровня с частотой перехода  $\omega_0$ , лежащей в радиочастотном диапазоне ( $\omega_0/2\pi \sim 10^9$  Гц). Верхнему уровню энергии соответствует антисимметричная комбинация спиновых состояний  $|e\rangle = (|\downarrow\rangle - |\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$ , а нижнему — симметричная комбинация спиновых состояний:  $|g\rangle = (|\downarrow\rangle + |\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$  (рис. 11.6). Такое представление квантового состояния джозефсоновского контура называется энергетическим представлением.

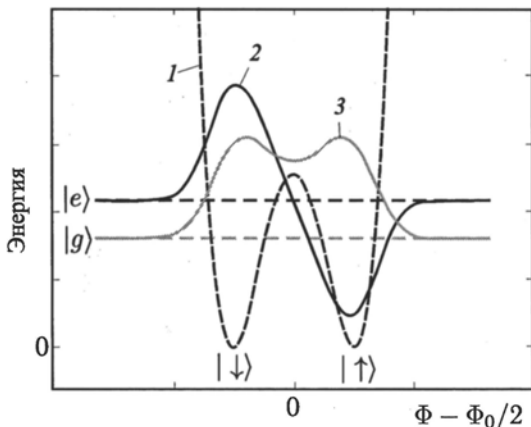


Рис. 11.6. Энергетические состояния и волновые функции контура с джозефсоновским контактом. Кривая 1 — двухминимумная потенциальная энергия контура как функция отклонения магнитного потока через контур от значения  $\Phi_0/2$  (ср. с рис. 11.5). Соответствующие волновые функции  $|\downarrow\rangle$  и  $|\uparrow\rangle$  — гауссово-подобные функции, центрированные в левом и правом минимумах на рисунке не показаны. Кривые 2 и 3 — волновые функции возбужденного  $|e\rangle$  и основного  $|g\rangle$  состояний

В результате, мы получаем макроскопический магнитный кубит, для которого в качестве вычислительного (логического) базиса  $|0\rangle$

и  $|1\rangle$  можно использовать, в зависимости от решаемой задачи, либо спиновое представление:  $|0\rangle = |\uparrow\rangle$  и  $|1\rangle = |\downarrow\rangle$ , либо энергетическое представление:  $|0\rangle = |e\rangle$  и  $|1\rangle = |g\rangle$  (двухуровневая система). Было экспериментально продемонстрировано, что макрокубит может находиться также в суперпозиционном состоянии. Произвольное суперпозиционное состояние  $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$  такого макроскопического кубита можно представлять на Bloch sphere и им можно избирательно управлять с помощью постоянного и переменного магнитных полей, по аналогии со спиновым кубитом (глава 7).

Джозефсоновский кубит в квантовом компьютере DW-1 представляет кольцо с характерным размером порядка микрона, сделанное из сверхпроводящего металла — ниобия с двумя тонкими диэлектрическими прослойками. Кольцо охлаждается до температуры в несколько милikelвин. Использование столь низких температур значительно снижает уровень шумов и, следовательно, увеличивает время декогеренции ( $T_2 \sim 4$  микросекунды).

Квантовый регистр компьютера DW-1, состоящий из  $n$  кубитов описывается гамильтонианом

$$H = \sum_{i=1}^n h_i \sigma_{zi} + \sum_{i=1}^n \Delta_i \sigma_{xi} + \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_{zi} \sigma_{zj}, \quad (11.18)$$

где  $h_i \sim (\Phi_i - \Phi_0/2)$  — сдвиг управляющего магнитного потока через контур  $i$ -го кубита от центрального значения (рис. 11.6),  $\Delta_i$  — энергия туннелирования, определяющая частоту перехода  $\omega_{0i}$  между основным и возбужденным уровнями  $i$ -го кубита (рис. 11.6):  $\omega_{0i} \sim \Delta_i$ . Константа взаимодействия  $i$ -го и  $j$ -го кубитов  $J_{ij}$  пропорциональна взаимной индуктивности этих кубитов (включается взаимодействие лишь ближайших соседей в узлах одномерной или двумерной сетки). Параметры гамильтониана (11.18) и моделирующего квантового компьютера, таким образом, можно контролировать и изменять избирательно направленным образом в соответствии с алгоритмом решения задачи.

Квантовый аналоговый компьютер DW-1 уже успешно применялся для решения ряда задач оптимизации и распознавания образов. Предполагается его расширенное использование для управления базами данных, анализа и прогнозирования финансовых рисков и в других задачах. Сама форма гамильтониана (11.18) предполагает также возможность решения широкого спектра задач в физике ферромагнетизма ( $J_{ij} < 0$ ) и антиферромагнетизма ( $J_{ij} > 0$ ), а также для описания других физических систем, гамильтониан которых можно эффективно привести к виду (11.18).

Джозефсоновский кубит — это экспериментально реализованный объект макроскопической квантовой физики: его размер примерно в 10000 раз больше размера атомного кубита! Обсуждение других

явлений макроскопической квантовой физики читатель может найти в книге [8].

## **11.8. Дополнительные приложения квантовой информации**

**11.8.1. Квантовая криптография и коммуникация.** Начиная с первых экспериментов в 90-х годах двадцатого века по безопасной квантовой передаче информации по оптическим световодам с помощью фотонов, длина линии связи неуклонно увеличивалась и достигла 122 км в 2004 г. Увеличивалась также надежность квантового канала, а скорость передачи информации по нему возросла до 1 мегабит за секунду на расстояние 50 км, что достаточно для проведения видеоконференций. Квантовые перепутанные состояния фотонов были переданы в свободном пространстве на расстояние 144 км (2007 г.), телепортация была осуществлена на расстоянии 16 км в открытом пространстве.

Другим важным вопросом в квантовой коммуникации является борьба с деградацией (декогеренцией) квантовых состояний при их передаче на большие расстояния по квантовому каналу связи. Для «обновления» перепутанных состояний фотонов на промежуточном пункте, перед пересылкой их дальше по световодной сети, требуются устройства, называемые «квантовыми повторителями». Принцип их действия основан на телепортации квантового состояния фотонов («летающих кубитов»).

**11.8.2. Квантовая метрология.** Другим приложением квантовой обработки информации является квантовая метрология: использование свойств квантовой перепутанности небольшого числа кубитов для проведения рекордно точных измерений. Охлажденные, захваченные в ловушки атомы уже долгое время используются в стандартах времени и частоты. В них перестраиваемые по частоте лазеры резонансно возбуждают осцилляционные переходы между двумя энергетическими уровнями атомов цезия с частотой перехода, лежащей в микроволновом диапазоне, что позволяет проводить измерения времени с точностью, большей чем 1 секунда за 30 миллионов лет. Тем не менее, использование перепутывания двух различных ионов в ионной ловушке позволяет провести еще более точные измерения. Было экспериментально показано, что квантовые логические часы точны с точностью 1 секунда за 3.7 миллиарда лет. Такие квантовые приборы могут быть использованы в спутниковых GPS-системах и для телекоммуникаций.

Поскольку квантовые перепутанные состояния ядерных и электронных спинов легко нарушаются при взаимодействии с окружением, они могут быть использованы как чувствительные сенсоры магнитных полей.

Интересны возможные приложения идей квантовой обработки информации также в биологии, в частности, в выяснении роли квантовых корреляций (перепутывания) в биологических системах. Эксперименты указывают на то, что перепутывание может играть роль в быстром переносе энергии в биомолекулярных системах в процессе фотосинтеза.

**11.8.3. Послесловие. Квантовая информация в историческом аспекте.** Сделаем несколько исторических замечаний. Историю развития квантовой информации можно условно разбить на три этапа. На начальном этапе (1950–1980 гг.) теоретически выяснялись фундаментальные ограничения на возможности передачи и обработки информации, обусловленные квантомеханической природой ее носителя (см. [17]). Второй этап (1980–2000 гг.) характеризуются (также в основном теоретическим) изучением возможностей создания квантовых компьютеров, квантовых алгоритмов, квантовой криптографии и квантовых коммуникационных протоколов. На втором этапе были выявлена роль интерференции и перепутанности квантовых состояний, а также квантового параллелизма как новых, чисто квантовых ресурсов вычислений и коммуникации. Можно сказать, что квантовая информация как самостоятельная область науки и технологии, сформировалась именно на этом этапе. Наконец, современный этап развития (2000–2012 гг.), можно назвать этапом квантовой информатики. Он характеризуется дальнейшим теоретическим прогрессом, но главной отличительной его особенностью является вхождение квантовой информации в период интенсивных экспериментальных исследований и технологических разработок устройств квантовой информации. Скепсис, который часто звучал на первых двух этапах по поводу возможности создания квантовых компьютеров, уступил место осторожному оптимизму, основанному на последних достижениях прикладной квантовой информации, таких как создание квантовых компьютеров с сотней (и даже с тремя сотнями, 2012 г) кубитов, расширение номенклатуры квантовых алгоритмов и разработка действующих систем квантовой коммуникации.

Отметим, в заключение, что помимо того, что квантовая информация дала новые инструменты и концептуальный язык для квантовой обработки информации, она оказала и продолжает оказывать сильное влияние на все другие прикладные области исследований квантового мира (атомная физика, спинтроника, квантовая оптика и квантовая электроника, сверхпроводимость, нанотехнологии и другие). Кроме того, развитие квантовой информации привело к более глубокому пониманию фундаментальных законов квантовой физики, стимулировало проведение решающих экспериментов в этой области и поставило целый ряд принципиальных вопросов и проблем, ждущих своего решения.

## Список литературы

### Квантовая механика

1. Бом Д. Квантовая теория. — М: Наука, 1965. 727 с.
2. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. — М: Наука, 1983. 664 с.
3. Ландау П.Д., Лившиц Е.М. Квантовая механика. — М: Наука, 2004. 800 с.
4. Соколов А.А., Лоскутов Ю.М., Тернов И.М. Квантовая механика. — М: Просвещение, 1965. 639 с.
5. Фадеев Л.Д., Якубовский О.А. Лекции по квантовой механике для студентов-математиков. — М.-Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2000. 255 с.
6. Климонтович Ю.Л. Кинетическая теория электромагнитных процессов. — М: Наука, 1980. 377 с.
7. Хакен Г. Лазерная светодинамика. — М: Мир, 1988. 350 с.
8. Гринштейн Дж., Зайонц Ф. Квантовый вызов. — М: Изд. дом Интеллект, 2008. 400 с.
9. Ю П., Кардона М. Основы физики полупроводников. — М: Физматлит, 2002. 560 с.
10. Аллен Л., Эберли Д. Оптический резонанс и двухуровневые атомы. — М: Мир, 1978. 224 с.
11. Андреев А.В., Емельянов В.И., Ильинский Ю.А. Кооперативные явления в оптике. — М: Наука, 1988. 288 с.

### Квантовая информация

12. Нильсен М., Чанг И. Квантовые вычисления и квантовая информация. — М: Мир, 2006. 824 с.
13. Кайе Ф., Лафлам Р., Моска М. Введение в квантовые вычисления. — М.-Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2009. 364 с.
14. Валиев К.А., Кокин А.А. Квантовые компьютеры: надежды и реальность. — М.-Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2004. 320 с.
15. Прескилл Дж. Квантовая информация и квантовые вычисления. Т.1. — М.-Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2008. 464 с.
16. Стин Э. Квантовые вычисления. — М.-Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2000. 111 с.
17. Холево А.С. Квантовые системы, каналы, информация. — М: Издательство МЦНМО. 2010. 327 с.
18. Стиб В.Х., Харди И. Задачи и их решения в квантовых вычислениях и квантовой теории информации. — М.-Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2007. 296 с.
19. Физика квантовой информации (Квантовая криптография, Квантовая Телепортация, Квант. вычисления). Сб. под редакцией Д.Боумейстера, А. Экерта, А.М. Цайлинера. — М: Постмаркет, 2002. 376 с.
20. Чивилихин С.А. Квантовая информатика. Учебное пособие, ИТМО. — С.-Петербург, 2009. 80 с.
21. Ожигов Ю.И. Квантовые вычисления. — М: Ф-т ВМиК МГУ, 2003. 104с.
22. Кулик С.П. Лекции по курсу «Физические основы квантовой информации». <http://qi.phys.msu.ru/kulik/QInfLectures1.pdf>
23. <http://www.quantiki.org>



## Список исправлений

С. 69. Подпись к Рис. 4.9. Вместо  $k_x = k_y = 0$  следует читать  $\cos k_x a = \cos k_y a = 0$ .

С. 84. 2 строка после подписи к Рис. 5.6. Перед предложением, начинающимся со слова «Следовательно, ...», следует вставить фразу: Хотя эти перенесенные заряды исчезают благодаря быстрой рекомбинации электронов и дырок, остаются нескомпенсированными заряды ионизованных примесных атомов — отрицательные в  $p$ -области и положительные в  $n$ -области.

С. 113. Формула (8.2). Следует читать

$$\langle \hat{Z} \rangle = \text{Sp} (\hat{\rho} \hat{Z}) = \langle 0 | \hat{\rho} | 0 \rangle \langle 0 | \hat{Z} | 0 \rangle + \langle 0 | \hat{\rho} | 1 \rangle \langle 1 | \hat{Z} | 0 \rangle + \\ + \langle 1 | \hat{\rho} | 0 \rangle \langle 0 | \hat{Z} | 1 \rangle + \langle 1 | \hat{\rho} | 1 \rangle \langle 1 | \hat{Z} | 1 \rangle = a^* a - b^* b.$$

С. 126. Формула (8.35). Вместо  $\frac{1}{T_2} D$  следует читать  $\frac{1}{T_2} \frac{\partial D}{\partial t}$ .

С. 129. 5 строка сверху. Следует читать: Оператором измеряемой величины является  $\hat{\mu}_z$ .

С. 130. Последний абзац. Следует читать: При измерении  $S_x$  следует разложить измеряемый вектор состояния  $|\psi\rangle = |0\rangle$  по собственным векторам оператора измеряемой величины  $\hat{S}_x$  и применить далее постулаты измерения. Собственными векторами оператора  $\hat{S}_x = (\hbar/2)\text{NOT}$  являются векторы. Далее по тексту.

С. 130 и 131. Везде вместо  $S_z = \pm 1/2$  следует читать  $S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$  и вместо  $S_x = \pm \frac{1}{2}$  следует читать  $S_x = \pm \frac{\hbar}{2}$ .

С. 143. 6 строка снизу. Следует читать 1935 г.

ООО Аргумент  
Квант физика Биты и кубиты

БС  
86

449<sup>00</sup>



ISBN 978-5-8279-0108-2



9 785827 901082