

EXERCICI COMPUTACIÓ QUÀNTICA

QUANTITZACIÓ

En l'exemple del pou quadrat infinit, d'amplada L , i centrat a l'origen, hem vist que les **funcions d'ona** que obtenim al resoldre l'equació de Schroedinger són

$$\psi_i(x, t) = \varphi_i(x) e^{-i \frac{E_i}{\hbar} t}, \quad (1)$$

on les parts que depenen de x s'anomenen **estats propis de l'energia**

$$\varphi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{\pi}{L} x\right)$$

$$\varphi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(2 \frac{\pi}{L} x\right)$$

$$\varphi_3(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(3 \frac{\pi}{L} x\right)$$

...

Les transicions entre aquests estats d'energia donada són les que es detecten en experiments d'espectroscòpia. Doneu l'expressió de la freqüència del fotó que s'emet quan el sistema passa del primer estat excitat (ψ_2) a l'estat fonamental (ψ_1)

Resposta 1

PROBABILITAT

Escriviu la densitat de **probabilitat** ($p_i(x) = \psi_i \cdot \psi_i^*$) per l'estat ψ_4

Resposta 2

Si la funció d'ona que descriu la partícula és $\psi_4(x, t)$, quina és la probabilitat de que al mesurar la seva posició la trobem a l'origen?

Resposta 3

SUPERPOSICIÓ

Qualsevol **superposició** de funcions d'ona també serà solució

$$\psi(x, t) = a_1 \cdot \psi_1 + a_2 \cdot \psi_2 + \dots$$

i, per tant, també és un estat possible de la partícula. Els $\{a_i\}$ són nombres complexos qualsevol amb la condició que es compleixi

$$\int \psi^* \cdot \psi dx = 1. \quad (2)$$

Insertant l'expressió 1

$$\psi(x, t) = a_1 \cdot e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} \varphi_1(x) + a_2 \cdot e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t} \varphi_2(x) + \dots$$

que es pot simplificar englobant totes les constants numeriques en els coeficients $\{c_i(t)\}$

$$\psi(x, t) = c_1(t) \cdot \varphi_1(x) + c_2(t) \cdot \varphi_2(x) + \dots \quad (3)$$

BASE

Aquesta expressió ens indica que les funcions φ_i constitueixen una mena de *base* de les funcions. Compleixen además les següents condicions d'*ortonormalitat*

$$\int \varphi_i \varphi_j^* dx = 0$$

$$\int \varphi_i \varphi_i^* dx = 1$$

comproveu que el valor de la següent integral és 0

$$\int_{-L/2}^{L/2} \varphi_1(x) \varphi_2(x) dx = \frac{2}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \cos\left(\frac{\pi}{L}x\right) \sin\left(2\frac{\pi}{L}x\right) dx = \dots$$

Resposta 4

tingueu en compte que es compleix per la integral indefinida

$$\int \sin(ax) \cos(bx) dx = -\frac{\cos(a-b)x}{2(a-b)} - \frac{\cos(a+b)x}{2(a+b)}$$

PROBABILITATS D'OCUPACIÓ

Aquestes propietats ens permeten interpretar els coeficients $\{c_i\}$. Si apliquem la condició de normalització 2, la majoria de termes són nuls i resulta

$$1 = \int \psi^* \cdot \psi dx = c_1^* \cdot c_1 + c_2^* \cdot c_2 + \dots \quad (4)$$

per tant podem interpretar $c_i^* \cdot c_i$ com la probabilitat de que al fer una mesura trobem que el sistema es trobi en l'estat descrit per φ_i .

Donada la següent superposició, quina és la probabilitat de cada un dels estats?

$$\psi = \frac{\sqrt{6}}{\pi} \left\{ \varphi_1(x) + \frac{1}{2} \cdot \varphi_2(x) + \frac{1}{3} \cdot \varphi_3(x) + \dots \right\}$$

Resposta 5

Donat el següent estat, quin valor de N fa que estigui normalitzat correctament?

$$\psi = \frac{1}{N} \{ 5 \cdot \varphi_1(x) + 8 \cdot \varphi_2(x) \}$$

Resposta 6

KETs i BRAs

En lloc d'aquesta notació tant feixuga, adoptem la notació de Dirac en termes de símbols anomenats *kets*: utilitzem $|0\rangle$ en lloc de $\varphi_1(x)$, etc. Així, en lloc d'utilitzar (3), diem que el sistema es troba en un cert estat $|a\rangle$ que es pot expressar com

$$|a\rangle = c_1 |0\rangle + c_2 |1\rangle + \dots \quad (5)$$

En termes d'aquesta notació, les integrals s'expressen com

$$\int \phi^*(x) \cdot \varphi(x) dx \equiv \langle \phi | \varphi \rangle \quad (6)$$

Una forma alternativa de pensar en aquesta mena d'integrals consisteix en definir per cada *ket* un altre vector anomenat *bra* i representat $\langle a |$, de forma que la integral es pot entendre com el *producte escalar (braket)* d'aquestes dos vectors

$$\langle \phi | \varphi \rangle = (\langle \phi |) \cdot (| \varphi \rangle) \quad (7)$$

QUBIT

Per les aplicacions de Computació i Criptografia Quàntica en tenim prou amb dos estats, per exemple amb els dos estats de menor energia del pou infinit (altres sistemes directament sols tenen dos estats, com per exemple l'spin de l'electró). Per tant sols ens ocuparem d'aquells estats que es poden expressar com combinació lineal d'aquests dos

$$|a\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle, \quad (8)$$

on els coeficients han de satisfer

$$\alpha^* \cdot \alpha + \beta^* \cdot \beta = 1. \quad (9)$$

Es pot deduir que la forma més general per un qubit involucra dos parametres (θ, ϕ)

$$|a\rangle = \cos(\theta/2) |0\rangle + e^{i\phi} \sin(\theta/2) |1\rangle \quad (10)$$

Escriviu quatre estats possibles *diferents* d'un qubit pels quals la probabilitat de trobar-lo en cada estat sigui la mateixa

Resposta 7

representeu-los gràficament sobre l'esfera de Bloch

Resposta 8

SISTEMES AMB MÉS D'UN QUBIT

Si tenim més d'un qubit, escrivim l'estat del sistema com un producte. Així si el primer qubit es troba en l'estat $|0\rangle$ i el segon en l'estat $|1\rangle$, llavors tindrem l'estat

$$|0\rangle|1\rangle \equiv |01\rangle \equiv |1\rangle_2 \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (11)$$

que com veieu es pot expressar en un cert nombre de notacions.

Donat el següent estat de dos qubits

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

expresseu-lo en les diferents notacions.

Resposta 9

Idem per l'estat d'un sistema de 3 qubits que s'expressi com el producte

$$\frac{1}{\sqrt{5}}(|0\rangle + 2|1\rangle) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \cdot |1\rangle$$

Resposta 10

ENTANGLEMENT

Els dos exercicis anteriors tracten amb estats que resulten del producte d'estats ben definits per cada qubit, però aquest no és el cas general. Hi ha estats (*entangled*) pels quals no podem dir que cada qubit individual estigui caracteritzat per un estat deslligat dels altres qubits.

Més en detall, un estat qualsevol de dos qubits es pot escriure

$$|\phi\rangle = \alpha |00\rangle + \beta |01\rangle + \gamma |10\rangle + \delta |11\rangle \quad (12)$$

on els coeficients sols han de satisfer la condició de normalització (2).

En contraposició un estat factoritzable s'escriu

$$|\phi\rangle = (a|0\rangle + b|1\rangle) \cdot (c|0\rangle + d|1\rangle) = ac|00\rangle + ad|01\rangle + bc|10\rangle + bd|11\rangle \quad (13)$$

de forma que, com veiem, els coeficients satisfan la condició addicional

$$\alpha\delta = \beta\gamma \quad (14)$$

Digueu si $|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$ és entangled

Resposta 11

Si definim una nova base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ per un qubit individual com

$$|0\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$$

$$|1\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle)$$

com s'expressa l'estat $|\phi\rangle$ en aquesta base?

Resposta 12