

Introduzione al Controllo Quantistico

Francesco Ticozzi

Anno Accademico 2001/2002

Indice

1	Introduzione	1
1.1	Controllo di Sistemi Quantistici	1
1.2	Il problema del linguaggio	2
1.3	Quantum Information Processing (QIP)	3
1.4	Struttura della Tesi	4
2	Meccanica Quantistica: concetti fondamentali e notazioni	6
2.1	Premesse	8
2.2	Richiami sugli Spazi di Hilbert	9
2.2.1	Spazi con prodotto interno	9
2.2.2	Spazi di Hilbert	10
2.2.3	Operatori	12
2.3	Spazi di stato, operatori, misura quantistica	14
2.3.1	Spazio di stato (“ket”)	14
2.3.2	Spazio “bra” e prodotto scalare	16
2.3.3	Operatori sullo spazio di stato	17
2.3.4	Basi di ket e rappresentazione matriciale degli operatori	19
2.3.5	Misura quantistica	21
2.3.6	Relazione di Indeterminazione	22
2.4	Dinamica quantistica	25
2.4.1	L’Equazione di Schroedinger	25
2.4.2	Autostati energetici	28
2.4.3	Dipendenza temporale dei valori attesi	28

2.5	Operatori di densità	30
2.5.1	Operatori di densità	30
2.5.2	Evoluzione temporale degli operatori di densità	33
2.5.3	La sfera di Bloch	34
2.6	Spazi di stato congiunti	35
2.6.1	Prodotto tensoriale	35
2.6.2	Stati legati (Entanglement)	36
2.6.3	Prodotto tensoriale di operatori	38
3	Controllo di Sistemi Quantistici	40
3.1	Il modello	40
3.1.1	L'Hamiltoniano del sistema	40
3.1.2	Controllabilità e raggiungibilità	41
3.2	Stabilità e Robustezza	43
3.2.1	Problematiche di interesse	43
3.2.2	Comportamento rispetto alle condizioni iniziali	45
3.2.3	Continuità rispetto agli ingressi	46
3.2.4	Robustezza per un sistema quantistico	48
4	Computazione Quantistica	49
4.1	In principio	49
4.2	Il Quantum Bit	50
4.2.1	Definizione di quantum bit	50
4.2.2	Sistemi a due qubit	52
4.3	Porte logiche	54
4.3.1	Premesse	54
4.3.2	Alcune porte logiche	55
4.3.3	Porte logiche universali	56
4.4	L'algoritmo di Deutsch	57
4.4.1	Il problema e la soluzione classica	57
4.4.2	La soluzione quantistica	57
4.4.3	L'algoritmo di fattorizzazione di Shor	60

4.5	Nuovi sviluppi e prospettive	62
4.5.1	La scelta del supporto fisico	62
4.5.2	Mantenere la coerenza dell'informazione quantistica . .	64
4.5.3	Gli algoritmi di correzione degli errori	65
5	Risonanza magnetica per sistemi a spin $\frac{1}{2}$	67
5.1	Sistemi di spin	67
5.2	Dinamica di sistemi di spin $\frac{1}{2}$ in presenza di campi elettromag-	
	netici	69
5.2.1	Campo elettromagnetico statico: precessione di spin . .	70
5.2.2	Risonanza magnetica	72
5.2.3	Rotating wave approximation	76
5.2.4	Equazioni di Bloch per l'ottica	77
5.3	Il teorema di passaggio adiabatico	80
5.3.1	Un approccio intuitivo	80
5.3.2	Le strategie utilizzate	84
A	Note sulla rappresentazione di rotazioni	87
A.1	Rotazioni nello spazio di stato	87
A.2	Il formalismo di Pauli	90
A.3	SU(2) ed SO(3)	91
A.4	Rotazioni di Eulero	92
	Bibliografia	94

Capitolo 1

Introduzione

1.1 Controllo di Sistemi Quantistici

L'evoluzione tecnologica, in campi diversi e sempre più numerosi, si sta orientando verso una forte miniaturizzazione: i componenti elettronici, la costruzione e manipolazione di composti chimici a livello atomico, le comunicazioni ottiche, applicazioni legate alla biotecnologia e molti altri settori di fervente ricerca stanno riducendo la scala degli oggetti di studio a un livello tale da far emergere la loro natura "quantistica". Ormai consolidata, la meccanica quantistica si propone, quindi, come modello dominante per la descrizione ed il comportamento dei sistemi considerati.

I problemi affrontati a livello microscopico spaziano, naturalmente, da questioni puramente teoriche a veri e propri problemi ingegneristici: appurata la possibilità teorica e strutturato un modello formale per un particolare fenomeno, il nodo centrale rimane l'attuabilità pratica di un certo tipo di manipolazione sul sistema, la valutazione dell'efficacia della strategia o, addirittura, del modello considerato.

È su problemi di questo tipo che, in gruppi di ricerca diversi in tutto il mondo, si iniziano ad applicare idee, "strumenti" e competenze sviluppate nel campo della teoria del controllo, tradizionalmente associata all'ingegneria dell'informazione. La descrizione matematica astratta di un sistema

quantistico e l'equazione differenziale che ne descrive l'evoluzione temporale, l'equazione di Schroedinger, si prestano naturalmente a metodi di analisi per sistemi descritti in forma di stato. Alcuni "distinguo" sono tuttavia necessari, legati in particolare alla peculiare descrizione matematica del processo di misura di un sistema quantistico.

Nelle riviste specializzate è sempre più frequente incontrare lavori sul tema¹, in particolare su tematiche relative alla raggiungibilità, controllabilità e modellizzazione di un sistema quantistico; si iniziano a trovare testi o lavori "panoramici" di riferimento. Ma si è ancora lontani da un approccio comune e l'avvicinamento a questo campo di ricerca presenta ancora diverse difficoltà.

1.2 Il problema del linguaggio

Come accade in molti campi della ricerca caratterizzati da una forte interdisciplinarietà, una vera e propria barriera all'ingresso per chi volesse accostarsi al controllo di sistemi quantistici è costituita dal bagaglio di competenze necessarie. I problemi concreti, che motivano l'applicazione di tecniche legate alla teoria del controllo, vengono posti in ambiti spesso molto diversi, specifici ed in continua evoluzione. Inoltre, non soltanto la meccanica quantistica non fa parte delle competenze tradizionalmente acquisite da chi opera nel campo dell'automatica, ma, per arrivare a formulare un problema di controllo, è necessario rapportarsi a ricercatori che lavorano in settori altamente specializzati della chimica atomica o della fisica. In tali settori è sovente impiegato un linguaggio che utilizza riferimenti continui a tecniche, ad aspetti teorici e sperimentali che risultano difficilmente comprensibili per chi non avesse già una buona conoscenza dei vari aspetti dell'ambito di ricerca.

Il primo passo verso l'integrazione di apparati teorici, nati e sviluppati in contesti diversi, quali la meccanica quantistica e la teoria del controllo, deve necessariamente essere la costruzione di un'"interfaccia" comune, che

¹Si vedano, ad esempio, i lavori di D.D'Alessandro o L.Viola riportati in bibliografia.

permetta comunicazione non ambigua e formulazioni consistenti dello stesso problema.

È necessaria flessibilità e disponibilità a rivedere nozioni e definizioni consolidate di entrambi i settori, ma il vantaggio è evidente: se si ottiene che una questione può essere posta in maniera da renderla strutturalmente analoga a problemi per cui si è già avuta una risposta in un altro settore, la “traduzione” è l’unico sforzo richiesto per arrivare ad una soluzione.

1.3 Quantum Information Processing (QIP)

La teoria dell’informazione, con tutto ciò che le gravita attorno, è un settore in cui la meccanica quantistica non solo ha posto dei nuovi quesiti, ma ha addirittura richiesto una nuova struttura teorica che tenesse conto di importanti conseguenze legate all’introduzione del nuovo modello; conseguenze che, per il momento solo da un punto di vista teorico, non si può non definire “rivoluzionarie”.

La possibilità di utilizzare sistemi quantistici come supporti fisici per l’informazione ha reso necessaria una revisione della concezione classica di “calcolatore” legata al lavoro di Turing, in cui il supporto fisico scelto non ne influenzava le possibilità. Il nuovo paradigma computazionale, nato dall’introduzione di un ipotetico calcolatore che utilizzi come supporti fisici per l’informazione sistemi quantistici permetterebbe, invece, di risolvere certi problemi in maniera più efficiente dell’analogo classico; il vantaggio intrinseco risiede sostanzialmente nella possibilità di preparare il sistema in una sovrapposizione di stati, permettendo, in qualche modo, di eseguire certe operazioni “in parallelo” su più valori degli ingressi.

Il vantaggio non è solo potenziale: sono stati sviluppati algoritmi “quantistici” efficienti che permetterebbero ad un calcolatore quantistico di ottenere prestazioni superiori all’analogo classico nella ricerca su database (algoritmo di Grover), nel calcolo delle trasformate di Fourier discrete (DFT) e del logaritmo discreto e, soprattutto, nella fattorizzazione di numeri interi (Shor, [26]). Quest’ultima applicazione permette di ottenere un metodo

per la decrittazione del metodo RSA in un tempo polinomiale rispetto alla dimensione dei numeri in gioco: in particolare grazie a questo risultato è cresciuto l'interesse per una possibile realizzazione concreta di una nuova generazione di calcolatori.

In quest'ottica si è iniziato a valutare diversi sistemi fisici per capire se fossero candidati adatti allo stoccaggio di informazione quantistica; i requisiti essenziali sono la possibilità di ottenere evoluzioni controllate dello stato del sistema, la capacità di mantenere l'informazione per un tempo abbastanza lungo da completare le computazioni desiderate e l'esistenza di tecniche di misura sul sistema che permettano di leggere l'informazione. La seconda caratteristica risulta essere la più problematica: ogni sistema quantistico reale interagisce con l'ambiente esterno, sviluppando delle dinamiche incontrollabili che rischiano di compromettere l'esito di qualunque operazione si voglia far compiere ad un calcolatore quantistico. Sono stati sviluppati degli algoritmi di codifica e correzione degli errori dedicati, ma rimane centrale la necessità di ottenere delle strategie di controllo per l'evoluzione del sistema che siano poco sensibili ad errori sulla condizione iniziale del sistema e sugli "ingressi".

1.4 Struttura della Tesi

Il presente lavoro si pone come obiettivo la definizione del concetto di robustezza nell'ambito del controllo quantistico. Vengono inoltre valutate caratteristiche di stabilità rispetto allo stato iniziale e rispetto agli ingressi, che non erano mai state esplicitamente trattate in letteratura.

A seguire questa breve introduzione alle tematiche di interesse, nel secondo capitolo si richiameranno sinteticamente alcune nozioni di analisi funzionale, premesse necessarie per passare, subito dopo, a illustrare i concetti di base della meccanica quantistica. Particolare attenzione sarà dedicata agli stati *entangled*, legati, in quanto sono uno degli elementi peculiari delle applicazioni QIP: tramite la creazione di coppie di particelle entangled è infatti possibile realizzare un sistema di codifica e trasmissione delle informazione

pressochè inattaccabile. Una sezione sarà dedicata all'introduzione degli *stati misti* e *degli operatori di densità* che, pur non essenziali nella trattazione successiva, sono alla base dei modelli che includono le interazioni del sistema con l'ambiente e, quindi, gli errori.

Nel terzo capitolo viene introdotto il modello di evoluzione temporale utilizzato nell'ambito del controllo quantistico. Successivamente si passano in rassegna le definizioni di *stabilità* e *robustezza in ambito di teoria del controllo*, valutandone l'applicabilità al modello presentato. Viene, inoltre, presentato un risultato originale sulla *continuità dello stato rispetto agli ingressi*.

Il quarto capitolo è dedicato alla presentazione della computazione quantistica: una panoramica introduttiva, senza pretese di completezza, dal *quantum bit* agli ultimi importanti sviluppi riguardo la *correzione degli errori*. Per poter illustrare appieno le potenzialità e i vantaggi del calcolatore quantistico, si è ritenuto opportuno approfondire l'*algoritmo di Deutsch*, un risultato semplice che sfrutta la sovrapposizione di stato per ottenere il risultato desiderato in un tempo inferiore al suo analogo classico.

Richiamando le proprietà fondamentali dei sistemi di spin $\frac{1}{2}$, nel quinto capitolo si passa a studiarne l'evoluzione in presenza di interazioni con impulsi laser: il fenomeno della *risonanza magnetica* è esaminato in dettaglio, in funzione del suo utilizzo come strategia di controllo. In una seconda fase viene presentato in maniera intuitiva il *teorema adiabatico*, con le strategie di controllo che suggerisce, applicato al modello di interazione precedente.

Sviluppati nei capitoli precedenti gli strumenti necessari ad applicarla a delle precise strategie di controllo, il sesto capitolo è centrato sulla definizione dei *gradi di robustezza*. Definito il problema, con analogie e differenze dall'analogo in ambito controllistico, si trova in tali gradi un modo adeguato di caratterizzare la robustezza del sistema, coerente alle osservazioni qualitative presenti in letteratura.

Si è ritenuto opportuno riportare in appendice alcune note sulla rappresentazione di rotazioni nello spazio Euclideo tridimensionale e nello spazio di Hilbert che viene associato ai sistemi di spin $\frac{1}{2}$.

Capitolo 2

Meccanica Quantistica: concetti fondamentali e notazioni

Quest'introduzione alla meccanica quantistica ha un duplice obiettivo:

- Provare a ricostruire dalla base, concettuale e formale, i modelli quantistici dei sistemi fisici di interesse nel controllo quantistico, in particolare sistemi finito-dimensionali, con dinamica descritta dall'equazione di Schrodinger;
- Riuscire ad essere sufficientemente rigorosa e completa, ma allo stesso tempo facilmente comprensibile dato un bagaglio culturale minimo relativo all'analisi matematica, all'algebra lineare e ai fondamenti di fisica, tipico dei primi anni di una qualunque facoltà scientifica.

Il tentativo (e la sfida, per un “non addetto ai lavori”) è stato quello di cercare di costruire una descrizione approfondita anche degli aspetti più tecnici del linguaggio in questione, senza limitarsi a seguire il filo generale dell'argomentazione. Questo sforzo è giustificato dall'aver riconosciuto, proprio nel formalismo utilizzato nella letteratura specifica sull'argomento, il più grosso ostacolo alla comprensione e all'inquadramento dei concetti in un

contesto più ampio. Detto questo, la presente esposizione non pretende di essere esaustiva, ma dovrebbe fornire le basi necessarie ad approfondimenti futuri.

2.1 Premesse

Prima di dare le premesse assiomatiche della meccanica quantistica, è bene descrivere, se non definire, gli “oggetti” fisici che verranno rappresentati con entità matematiche astratte nel modello in costruzione.

Chiameremo *sistema fisico* una porzione di universo isolata o ben identificabile, su cui sia possibile effettuare esperimenti con esiti quantitativi.

Chiameremo inoltre *osservazioni* tali esiti, che saranno quindi valori numerici accompagnati da un’indicazione di incertezza strettamente legata alla modalità dell’esperimento; l’insieme degli esiti possibili sarà detto *spettro*.

Le proprietà del sistema soggette alla misura saranno chiamate *osservabili*.

La struttura formale della meccanica quantistica descrive queste realtà fisiche, il processo di misura e la loro evoluzione temporale in maniera coerente alle osservazioni sperimentali, e dunque alle conclusioni da esse indotte, che hanno reso inadeguato il modello classico. Proprio dalla fenomenologia, ad esempio, risulta evidente che la teoria, di cui vogliamo rapidamente ricostruire alcune delle basi fondamentali, non può evitare in alcun modo una *descrizione probabilistica* delle osservazioni condotte su sistemi fisici.

Il dualismo onda-particella, formalizzato nell’ipotesi di De Broglie, porta a considerare inadeguata la descrizione classica delle particelle e passa a considerare pacchetti d’onda, tramite i quali è possibile descrivere la distribuzione statistica nello spazio di entità fisiche: a partire dall’idea di descrivere l’informazione sulla probabilità relativa agli elementi dello spettro di un’osservabile tramite un’opportuna funzione d’onda e utilizzando (qui solo implicitamente) la definizione rigorosa di probabilità data da Kolmogorov, affermiamo, senza argomentare ulteriormente, che risulta appropriato rappresentare l’intera informazione fisica sul sistema come un vettore in uno spazio di Hilbert astratto. Una trattazione approfondita del processo induttivo (si veda, ad esempio, [23]), esula dagli scopi di questa trattazione introduttiva.

va, in cui ci limiteremo a enunciare i postulati fondamentali della meccanica quantistica, dopo aver richiamato alcune proprietà fondamentali degli spazi di Hilbert.

2.2 Richiami sugli Spazi di Hilbert

Questa stringata esposizione di alcuni risultati di interesse concernenti la teoria degli spazi di Hilbert è mirata a richiamare soltanto alcuni concetti di base: una trattazione più generale e completa degli stessi si può trovare, ad esempio, in [19].

2.2.1 Spazi con prodotto interno

Uno spazio vettoriale \mathcal{H} , che considereremo a campo complesso \mathbb{C} , si chiama *spazio con prodotto interno* se è definita una mappa che associa ad ogni coppia ordinata di elementi di \mathcal{H} un numero complesso:

$$\mathcal{H} \times \mathcal{H} \longrightarrow \mathbb{C} \tag{2.1}$$

$$(\alpha, \beta) \longmapsto \langle \alpha, \beta \rangle \tag{2.2}$$

che gode delle seguenti proprietà¹:

$$\langle \beta, \alpha \rangle = \langle \alpha, \beta \rangle^* \tag{2.3}$$

$$\langle \alpha + \beta, \gamma \rangle = \langle \alpha, \gamma \rangle + \langle \beta, \gamma \rangle, \text{ con } \alpha, \beta, \gamma \in \mathcal{H} \tag{2.4}$$

$$\langle c\alpha, \beta \rangle = c\langle \alpha, \beta \rangle, \text{ con } c \in \mathbb{C}, \alpha, \beta \in \mathcal{H} \tag{2.5}$$

$$\langle \alpha, \alpha \rangle \geq 0 \quad \forall \alpha \in \mathcal{H} \tag{2.6}$$

$$\langle \alpha, \alpha \rangle = 0 \quad \text{solo se } \alpha = 0, \tag{2.7}$$

¹Se $c \in \mathbb{C}$, c^* indica il complesso coniugato di c .

e che chiameremo *prodotto interno o scalare*. Dalle precedenti proprietà risulta, inoltre, che per ogni $\beta \in \mathcal{H}$, l'applicazione $\alpha \mapsto \langle \alpha, \beta \rangle$ è un funzionale lineare² su \mathcal{H} .

2.2.2 Spazi di Hilbert

Le proprietà del prodotto interno ci permettono di definire una *norma* su \mathcal{H} , che associa ad ogni $\alpha \in \mathcal{H}$ un numero reale non negativo:

$$\alpha \mapsto \|\alpha\| = \langle \alpha, \alpha \rangle^{\frac{1}{2}} \in \mathbb{R}.$$

Per tale norma vale la disuguaglianza di Schwarz (per la dimostrazione si veda §2.3.6) :

$$|\langle \alpha, \beta \rangle| \leq \|\alpha\| \|\beta\|. \quad (2.8)$$

Grazie alla 2.8, si può dimostrare che vale disuguaglianza triangolare:

$$\|\alpha + \beta\| \leq \|\alpha\| + \|\beta\|,$$

da cui segue che:

$$\|\alpha - \beta\| \leq \|\alpha - \gamma\| + \|\gamma - \beta\|.$$

Sono quindi soddisfatti tutti gli assiomi che definiscono uno spazio metrico, considerando $\|\alpha - \beta\|$ come la *distanza* tra α e β .

Se, inoltre, \mathcal{H} è completo nella metrica indotta dalla norma del prodotto scalare, cioè le successioni di Cauchy convergono in \mathcal{H} , \mathcal{H} è detto *Spazio di Hilbert*.

Spazi di Hilbert di particolare interesse per i nostri scopi, sono, ad esempio, \mathbf{C}^n , $\forall n$, o L^2 , lo spazio delle funzioni complesse di variabile reale a quadrato integrabile, o, ancora, lo spazio ℓ^2 , delle successioni complesse a quadrato sommabile.

²Un funzionale lineare è un' applicazione lineare da uno spazio vettoriale al campo degli scalari, in questo caso \mathbb{C} .

Consideriamo ora un insieme di vettori $\mathcal{B} = \{\alpha_i\}$, $\alpha_i \in \mathcal{H}$ con i indice appartenente ad un insieme J : diremo che \mathcal{B} è *ortonormale* se soddisfa :

$$\langle \alpha_i, \alpha_j \rangle = \begin{cases} 0 & \text{se } i = j \\ 1 & \text{se } i \neq j \end{cases} \quad (2.9)$$

Un insieme ortonormale si dirà *massimale* quando non è possibile aggiungere a \mathcal{B} un vettore $\alpha \in \mathcal{H}$, senza far cadere la condizione di ortonormalità. Tali insiemi vengono chiamati anche *basi ortonormali*.

Se $\{\alpha_i\}$ è ortonormale, definiamo per ogni $\gamma \in \mathcal{H}$ la funzione complessa $x_\gamma(i)$ da $J \rightarrow \mathbb{C}$ che associa ad ogni $i \in J$ lo scalare $\langle \gamma, \alpha_i \rangle$.

Dalla disuguaglianza di Bessel, che richiamiamo senza dimostrare:

$$\sum_{i \in \mathcal{A}} |x_\gamma(i)|^2 \leq \|\gamma\|^2, \quad (2.10)$$

si può mostrare che l'insieme delle i tali che $x_\gamma(i) \neq 0$ è al più numerabile. Supponiamo che X e Y siano spazi metrici, che $E \subset X$, $p \in E$ e f sia una funzione che mappa E in Y . f si dice continua in p se per ogni $\varepsilon > 0$ esiste un $\delta < 0$ tale che:

$$d_Y(f(x), f(p)) < \varepsilon$$

per ogni $x \in E$ per il quale $d_X(x, p) < \delta$.

Si può facilmente dimostrare che:

Teorema 1. *Un funzionale $L : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ è continuo se e solo se è limitato, cioè se:*

$$\sup_{\gamma \neq 0} \frac{\|L\gamma\|_{\mathbb{C}}}{\|\gamma\|_{\mathcal{H}}} < \infty$$

Vale inoltre il seguente teorema di rappresentazione:

Teorema 2. (*Riesz*)

Sia \mathcal{H} uno spazio di Hilbert sul campo \mathbb{C} ed $L : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ un funzionale lineare e continuo. Allora $\exists! \alpha \in \mathcal{H}$ tale che:

$$L(\gamma) = \langle \alpha, \gamma \rangle, \quad \forall \gamma \in \mathcal{H}$$

Chiamiamo *isomorfismo* tra spazi di Hilbert un'applicazione lineare che conservi, oltre all'addizione e alla moltiplicazione per uno scalare, anche il prodotto interno (*isometria*), e dunque chiamiamo *isomorfi* due spazi per cui esista una siffatta applicazione. Il teorema precedente (Teo. 2) e le proprietà di continuità dei funzionali considerati, ci permettono di enunciare la seguente:

Osservazione 1. *Lo spazio \mathcal{L} dei funzionali lineari e continui $L : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ è isomorfo a \mathcal{H} . L'isomorfismo "naturale" tra gli spazi è la mappa:*

$$\begin{aligned} F : \mathcal{H} &\longrightarrow \mathcal{L} \\ \alpha &\longmapsto L \text{ tale che } L(\gamma) = \langle \alpha, \gamma \rangle, \quad \forall \gamma \in \mathcal{H} \end{aligned} \quad (2.11)$$

Se \mathcal{V} è uno spazio vettoriale, si dice *spazio duale* lo spazio vettoriale \mathcal{V}^\dagger dei funzionali lineari e continui (limitati) su \mathcal{V} . \mathcal{V}^\dagger risulta sempre uno spazio vettoriale normato e completo con norma

$$\|L\| := \sup_{x \in \mathcal{V} \setminus \{0\}} \frac{\|Lx\|_{\mathbb{C}^n}}{\|x\|_{\mathcal{V}}}. \quad (2.12)$$

L'osservazione precedente dice, quindi, che \mathcal{H}^\dagger è isomorfo a \mathcal{H} .

Definiamo ora *raggi*, o raggi vettore, in uno spazio vettoriale \mathcal{H} , le classi di equivalenza di vettori in \mathcal{H} rispetto alla moltiplicazione per scalare. Dunque, preso un vettore α , il suo raggio di appartenenza è l'insieme:

$$R_\alpha = \{\gamma \in \mathcal{H} \mid \gamma = c \cdot \alpha, c \in \mathbb{C} \setminus \{0\}\}.$$

Inoltre diremo che due vettori sono paralleli se appartengono allo stesso raggio.

2.2.3 Operatori

Un operatore su \mathcal{H} è una mappa da \mathcal{H} in \mathcal{H} ; indicando gli operatori con lettere maiuscole (A, B, X, Y, \dots), scriveremo: $X : \alpha \mapsto X(\alpha) = X\alpha$. Un operatore X si dice:

- *nullo* se $X(\alpha) = 0_{\mathcal{H}}, \quad \forall \alpha \in \mathcal{H}$, e viene indicato con 0_{op} .

- *operatore identità*, o, più semplicemente, *identità*, se $X(\alpha) = \alpha$, $\forall \alpha \in \mathcal{H}$. Indicheremo tale operatore con I .
- *lineare* se:

$$X(a\alpha + b\beta) = aX(\alpha) + bX(\beta), \quad \forall \alpha, \beta \in \mathcal{H}, \quad a, b \in \mathbb{C}.$$

È definita una somma tra operatori: $(X + Y)(\alpha) = X(\alpha) + Y(\alpha)$; è, evidentemente, associativa e commutativa. Due operatori X, Y si dicono *uguali* se $X(\alpha) = Y(\alpha)$, $\forall \alpha \in \mathcal{H}$.

Definiamo *operatore aggiunto* di X l'operatore X^\dagger tale che:

$$\langle X^\dagger \alpha, \beta \rangle = \langle \alpha, X\beta \rangle. \quad (2.13)$$

Se $X = X^\dagger$, X si dirà *hermitiano autoaggiunto*. Due operatori, diciamo X e Y , possono essere composti ottenendo un altro operatore:

$$X \circ Y = XY,$$

e l'operazione è, in generale, non commutativa. È invece associativa. La composizione di due operatori è anche chiamata *prodotto* degli stessi.

Ricordando che l'inversa di un operatore A è l'operatore denominato A^{-1} tale che $A^{-1} \circ A = I$, un operatore A si dice *unitario* se $A^\dagger = A^{-1}$. La terminologia si giustifica come segue:

$$\langle A\alpha, A\beta \rangle = \langle A^\dagger A\alpha, \beta \rangle = \langle \alpha, \beta \rangle. \quad (2.14)$$

Quindi gli operatori unitari sono gli operatori isometrici invertibili.

2.3 Spazi di stato, operatori, misura quantistica

2.3.1 Spazio di stato (“ket”)

Tutta l’informazione oggettiva che possiamo avere riguardo un sistema fisico deriva dalle misure che possiamo effettuare su di esso e corrisponde agli esiti delle osservazioni. L’informazione su di una misura di un sistema è descritta (al meglio) da una distribuzione di probabilità dell’esito della misura sullo spettro dell’osservabile corrispondente³.

Avremo allora l’informazione *completa* su di un sistema fisico conoscendo la distribuzione di probabilità sullo spettro di ogni osservabile corrispondente ad un’osservazione che è possibile fare sul sistema stesso. Tale informazione completa definisce lo *stato fisico* del sistema.

Nella formulazione più diffusa della *meccanica quantistica* ad ogni sistema viene fatto corrispondere uno spazio di Hilbert separabile (\mathcal{H} , che chiameremo *spazio di stato*)⁴ ed allo stato fisico del sistema viene fatto corrispondere un vettore nello spazio di Hilbert (*vettore di stato*, o, più semplicemente, *stato*, quando non vi sia ambiguità con lo stato fisico del sistema).

La definizione del processo di misura in meccanica quantistica, anticipando quanto verrà esposto nella sezione §2.30, mette però in luce che tale corrispondenza non è biunivoca: tutti i vettori appartenenti allo stesso *raggio* nello spazio di Hilbert corrispondono alla stessa distribuzione di probabilità. Dunque la corrispondenza uno a uno è tra stati fisici e raggi, ma la struttura di spazio vettoriale di \mathcal{H} è utile in quanto garantisce la validità del *principio di sovrapposizione*. Possiamo esprimerlo nella seguente forma (sostituendo il

³Abbiamo già richiamato che, nella descrizione di sistemi fisici che presentano effetti quantistici, non è possibile prescindere da una descrizione probabilistica di tali fenomeni; il formalismo introdotto, comunque, dà modo di includere anche processi di misura deterministici.

⁴Tale spazio è, in qualche modo, legato al numero, al tipo ed alla forma delle distribuzioni di probabilità cui si accennava in precedenza.

concetto di vettore con quello di stato):

una qualunque combinazione lineare di stati è ancora uno stato, detto sovrapposizione degli stati intervenuti nella combinazione.

Questo principio è essenziale, insieme all'utilizzo del campo complesso, per dare ragione agli effetti di "interferenza" manifestati dai sistemi quantistici. Inoltre la definizione del processo di misura permette di superare, almeno parzialmente, l'ambiguità che sorge nell'associare un vettore allo stato di un sistema fisico: l'unico modo di poterli associare è quello di misurare lo stato e la misura restituisce il vettore di stato normalizzato, a meno di un coefficiente di fase. Noteremo come la fase globale di uno stato non altera l'esito di una misura, ma la fase relativa di stati sovrapposti ha significato fisico e può essere dedotta da misure indirette.

Introduciamo ora la notazione "bra(c)-ket", dovuta a Dirac, largamente utilizzata nella letteratura specifica:

- I vettori di \mathcal{H} sono evidenziati con la notazione $|\cdot\rangle$ (**ket**); nel presente lavoro utilizzeremo preferibilmente una lettera greca, all'interno delle parentesi, per gli elementi di \mathcal{H} , corredata eventualmente di ulteriori indici o parametri per specificare, ad esempio, il tempo di riferimento. Nell'ambito della computazione quantistica, gli stati di riferimento standard sono invece identificati da stringhe di zeri ed uno, o dai simboli "+" e "-" per i sistemi a spin $\frac{1}{2}$.
- Prodotto per scalare: posso moltiplicare per un elemento del campo \mathbb{C} , indifferente a destra e a sinistra del ket:

$$c \cdot (|\alpha\rangle) = (|\alpha\rangle) \cdot c = c|\alpha\rangle = |\alpha\rangle c = |\gamma\rangle \quad \in \mathcal{H} \quad (2.15)$$

- La combinazione lineare di due vettori di stato, è ancora uno stato, detto *sovrapposizione* dei due stati, come già evidenziato precedentemente.

Dunque, lavorando con i ket, si scrive:

$$a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle = |\gamma\rangle \quad \in \mathcal{H} \quad (2.16)$$

Si noti che è rilevante, in questo caso, la fase relativa dei due stati.

2.3.2 Spazio “bra” e prodotto scalare

Introduciamo ora lo spazio, \mathcal{H}^\dagger , lo spazio duale allo spazio ket, i cui elementi sono i funzionali lineari su \mathcal{H} ; il Teorema 2 mostra che tale spazio è isomorfo ad \mathcal{H} e, associando ad ogni elemento di $\alpha \in \mathcal{H}$ il corrispondente funzionale nell’isomorfismo naturale tra \mathcal{H} e \mathcal{H}^\dagger , possiamo passare ad una comoda rappresentazione per il prodotto scalare. Rappresentando i vettori in \mathcal{H}^\dagger nella forma $\langle \alpha |$, chiamata **bra** (con somma e prodotto per scalare con notazioni equivalenti a quelle di sopra), ad ogni ket facciamo corrispondere dualmente un bra, tramite l’isomorfismo definito precedentemente (si veda la 2.11):

$$|\alpha\rangle \leftrightarrow \langle \alpha| = F(|\alpha\rangle) \in \mathcal{H}^\dagger; \quad (2.17)$$

Questo implica che:

$$c|\alpha\rangle \leftrightarrow c^* \langle \alpha| \quad (2.18)$$

Possiamo ora riscrivere il prodotto interno tra elementi di \mathcal{H} come il *prodotto scalare* di un bra e di un ket:

$$\langle \beta, \alpha \rangle = (\langle \beta | \cdot (|\alpha \rangle)) = \langle \beta | \alpha \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle,^5 \quad (2.19)$$

con le proprietà 2.3-2.7 riscritte come:

1. Skew-Symmetry (Antisimmetria)

$$\langle \beta | \alpha \rangle = (\langle \alpha | \beta \rangle)^* \quad (2.20)$$

2. Positività

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \geq 0 \quad (2.21)$$

3. Linearità

$$\langle \gamma | (a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle) \rangle = a\langle \gamma | \alpha \rangle + b\langle \gamma | \beta \rangle \quad (2.22)$$

⁵Useremo indifferentemente una delle notazioni della 2.19.

Notiamo che $(\langle\alpha|\alpha\rangle)^{\frac{1}{2}}$ è la *norma* indotta dal prodotto scalare nella nuova notazione.

Inoltre $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ si dicono *Ortogonal* se: $\langle\beta|\alpha\rangle = 0 = \langle\alpha|\beta\rangle$.

Dato un ket $|\alpha\rangle$, è già stato sottolineato che, per rappresentare il raggio corrispondente nello spazio di Hilbert, possiamo passare ad un ket normalizzato $|\tilde{\alpha}\rangle = \frac{|\alpha\rangle}{\langle\alpha|\alpha\rangle^{\frac{1}{2}}}$, con la proprietà che: $\langle\tilde{\alpha}|\tilde{\alpha}\rangle = 1$.

2.3.3 Operatori sullo spazio di stato

Abbiamo già richiamato, in §2.2.3, le definizioni fondamentali sugli operatori su di uno spazio di Hilbert. Gli operatori, in meccanica quantistica, sono di enorme importanza, in particolare in riferimento al seguente assioma:

Assioma 1. *Nel modello quantistico, gli osservabili, cioè le proprietà del sistema fisico che possono essere, in linea di principio, misurate, sono rappresentate da operatori lineari ed Hermitiani.*

Vediamo ora come vengono rappresentati, e che proprietà hanno, gli operatori nel formalismo di Dirac:

- un operatore applica su di un ket da sinistra e la sua immagine è ancora un ket:

$$X(|\alpha\rangle) = X|\alpha\rangle.$$

- $|\alpha\rangle$ è detto *autostato*(eigenket) di A se $A|\alpha\rangle = a|\alpha\rangle$; a si dice *autovalore*(eigenvalue) di A.
- Definiamo la scrittura $\langle\alpha|X$ come il bra in corrispondenza duale al ket $X^\dagger|\alpha\rangle$; dunque, $X|\alpha\rangle$ e $\langle\alpha|X$ non sono in corrispondenza duale, a meno che X non sia autoaggiunto.
- Per la definizione di $\langle\alpha|X$, possiamo riscrivere nella nuova notazione la definizione 2.13 di operatore aggiunto come:

$$\langle X^\dagger\alpha, \beta\rangle = \langle\alpha, X\beta\rangle,$$

come:

$$(\langle \alpha | X | \beta \rangle = \langle \alpha | (X | \beta \rangle).$$

Questo permette di omettere le parentesi e associare l'operatore indifferentemente ad un bra alla sua sinistra o ad un ket alla sua destra, utilizzando la notazione compatta:

$$\langle \alpha | X | \beta \rangle.$$

Si definisce anche un *prodotto esterno* di $|\beta\rangle$ e $\langle\alpha|$: esso è una mappa che associa ad una coppia ordinata di un ket e di un bra un operatore di proiezione sul raggio di appartenenza del ket. Nel formalismo introdotto, tale definizione può essere vista, e compresa meglio, come una naturale conseguenza del seguente:

Assioma 2. Assioma Associativo della Moltiplicazione

Se abbiamo una catena di moltiplicazioni "legali" ⁶, vale la proprietà associativa.

i.e.: $(|\beta\rangle\langle\alpha|)|\gamma\rangle = |\beta\rangle(\langle\alpha|\gamma\rangle)$ rende evidente l'affermazione precedente sul prodotto esterno come operatore.)

Introduciamo a questo punto anche alcune definizioni che ci torneranno utili più avanti:

Definizione 1. Relazioni di Commutazione

Detto \mathcal{L} l'insieme degli operatori, definiamo le seguenti mappe da $\mathcal{L} \times \mathcal{L}$ in \mathcal{L} :

$$\text{Commutatore} : [A, B] = AB - BA \quad (2.23)$$

$$\text{Anticommutatore} : \{A, B\} = AB + BA \quad (2.24)$$

Due osservabili si dicono *compatibili* se commutano, cioè se $[A, B] = 0$; si può vedere che se A e B sono compatibili, hanno gli stessi autospazi.

⁶Con questo termine si intende, essenzialmente, una catena di "prodotti", o composizioni di simboli formali, definite: bra-ket, operatore-operatore, bra-operatore, operatore-ket, ket-bra.

2.3.4 Basi di ket e rappresentazione matriciale degli operatori

Per un operatore hermitiano (d'ora in si tralascerà di specificare "lineare", in quanto tutti gli operatori di interesse da qui in avanti sono tali) vale il seguente:

Teorema 3. Autovalori

Gli autovalori a_i di un operatore hermitiano A sono reali, gli autostati $|\alpha_i\rangle$ di A corrispondenti ad autovalori diversi sono ortogonali.

Dunque, normalizzando gli autostati, otteniamo una collezione di stati ortonormali (si veda 2.9). Non solo: se lo spazio generato dagli autostati di A coincide con l'intero spazio di Hilbert di interesse⁷ possiamo anche dire che gli autostati (normalizzati) di A formano una base ortonormale dello spazio di Hilbert.

Possiamo ora espandere ogni stato nella nuova base $|\alpha_i\rangle$ come:

$$|\gamma\rangle = \sum_i c_i |\alpha_i\rangle \quad (2.25)$$

con $c_i = \langle \alpha_i | \gamma \rangle$. Per ricavare i c_i basta moltiplicare i due termini della 2.25 per $\langle \alpha_j |$, variare j e sfruttare l'ortonormalità degli $|\alpha_i\rangle$.

Da ciò si evince che:

$$|\gamma\rangle = \sum_i |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i | \gamma \rangle \quad (2.26)$$

e quindi la fondamentale *relazione di completezza o chiusura*:

$$I = \sum_i |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i| \quad (2.27)$$

dove con I si intende l'operatore identità. Tale relazione ci permette, in sostanza, di sostituire nelle espressioni uno stato con la sua espansione nella base scelta.

⁷Introduciamo tale ipotesi per semplicità, evitando così di dover cercare un insieme *completo di osservabili*, cioè di osservabili compatibili la cui unione degli autospazi generi l'intero spazio di Hilbert.

Questa utile relazione ci consente di mostrare un'altra proprietà dei coefficienti c_i : se $|\gamma\rangle$ è normalizzato

$$1 = \langle\gamma|\gamma\rangle = \langle\gamma|(\sum_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|)|\gamma\rangle = \sum_i \langle\alpha_i|\gamma\rangle^2 = \sum_i |c_i|^2 \quad (2.28)$$

Inoltre l'operatore $|\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$ è l'operatore di proiezione sull'autospazio di base relativo a a_i :

$$(|\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|)|\gamma\rangle = c_i|\alpha_i\rangle$$

Scelta la base possiamo dunque rappresentare⁸ un ket di stato come un vettore colonna $\begin{bmatrix} \vdots \\ c_i \\ \vdots \end{bmatrix}$, un bra come un analogo vettore riga e avere una rappresentazione matriciale degli operatori:

$$A \doteq \begin{bmatrix} \ddots & \vdots & \\ \dots & \langle\alpha_i|A|\alpha_j\rangle & \dots \\ & \vdots & \ddots \end{bmatrix}_{i,j};$$

da ciò risulta facilmente che l'aggiunta di A risulta rappresentata dalla coniugata trasposta della matrice che rappresenta A⁹.

Inoltre, se la matrice rappresenta un osservabile nella base dei suoi autostati (normalizzati), allora è diagonale

$$A = \sum_i a_i \Lambda_i = \sum_i a_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| \doteq \begin{bmatrix} \ddots & & \\ & a_{i=j} & \\ & & \ddots \end{bmatrix}_{i,j};$$

⁸Verrà utilizzato il simbolo \doteq per indicare la rappresentazione matriciale, o vettoriale, nella particolare base considerata.

⁹In assenza di ambiguità sulla base scelta, d'ora in poi confonderemo l'operatore lineare con la sua rappresentazione matriciale.

2.3.5 Misura quantistica

Uno degli elementi fondamentali della struttura teorica della meccanica quantistica è la teoria della misura: è l'elemento concettualmente più profondo e rivoluzionario dell'intera teoria e meriterebbe una discussione approfondita, che esula però dagli scopi di questa veloce sintesi di nozioni di base.

Richiamiamo semplicemente i concetti e postulati fondamentali:

- *Postulato 1:* Quando viene effettuata una misura (osservazione) relativa ad un osservabile A il sistema è forzato ad assumere come stato uno degli autostati di A ; la misura, dunque, altera lo stato del sistema precedente all'osservazione, proiettandolo ortogonalmente su di un autostato dell'osservabile relativo alla misura;
- *Postulato 2:* Non è possibile sapere con certezza in quale autostato si troverà il sistema come esito della misura, ma la probabilità di trovarlo in un dato autostato $|\alpha_i\rangle$ è data da

$$P_i = |\langle \alpha_i | \gamma \rangle|^2, \quad (2.29)$$

con $|\gamma\rangle$ lo stato normalizzato del sistema immediatamente prima della misura stessa; il risultato della misura corrisponderà all'autovalore relativo all'autostato in cui è collassato il sistema.

Lo stato del sistema dopo una misura è generalmente diverso da quello antecedente alla misura stessa, e si può scrivere come:

$$|\gamma\rangle \rightarrow \frac{P|\gamma\rangle}{\sqrt{\langle \gamma | P | \gamma \rangle}} = \frac{P|\gamma\rangle}{\|P|\gamma\rangle\|}, \quad (2.30)$$

dove P è l'operatore di proiezione sull'autospazio risultante.

Inoltre diamo le seguenti:

Definizione 2. *Valore Atteso*

Definiamo come *valore atteso* di un osservabile A rispetto ad un dato stato $|\gamma\rangle$:

$$\langle A \rangle = \langle \gamma | A | \gamma \rangle \quad (2.31)$$

può essere facilmente visto come:

$$\begin{aligned}\langle A \rangle &= \sum_i \sum_j \langle \gamma | \alpha_i \rangle \langle \alpha_i | A | \alpha_j \rangle \langle \alpha_j | \gamma \rangle \\ &= \sum_i a_i |\langle \alpha_i | \gamma \rangle|^2\end{aligned}\quad (2.32)$$

utilizzando due volte la 2.27 e il fatto che A è diagonale se rappresentata nella base dei suoi autovettori; quindi il valore atteso è la somma dei possibili esiti pesati dalla probabilità di ottenerli.

Introduciamo ora l'operatore $\Delta A = A - \langle A \rangle I$, dove il valore atteso sempre riferito ad uno stato $|\gamma\rangle$. A partire da esso possiamo dare la seguente:

Definizione 3. *Varianza*

Si definisce come varianza del valore atteso:

$$\langle \Delta A^2 \rangle = \langle \gamma | (A - \langle A \rangle) (A - \langle A \rangle) | \gamma \rangle = \langle \gamma | (A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2) | \gamma \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2. \quad (2.33)$$

Chiamata anche dispersione, la varianza rappresenta il valore atteso degli scostamenti quadratici degli esiti della misura rispetto al valore atteso della stessa.

2.3.6 Relazione di Indeterminazione

Dati due osservabili A, B , vale la seguente disuguaglianza:

$$\langle \Delta A^2 \rangle \langle \Delta B^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2. \quad (2.34)$$

Per dimostrarla, si considerino:

Lemma 1. *Disuguaglianza di Schwarz:*

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \geq |\langle \alpha | \beta \rangle|^2, \quad (2.35)$$

analoga, nello spazio bra-ket, a:

$$|v|^2 |w|^2 \geq |v \cdot w|^2$$

nello spazio euclideo.

Dim.: le proprietà 2.3-2.7 ci permettono di scrivere:

$$(\langle \alpha | + \lambda^* \langle \beta |)(|\alpha\rangle + \lambda |\beta\rangle) \geq 0, \quad \forall \lambda \in \mathbb{C}.$$

Allora, in particolare, deve valere per $\lambda = -\frac{\langle \beta | \alpha \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle}$, da cui si trova:

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle - |\langle \alpha | \beta \rangle|^2 \geq 0.$$

□

Lemma 2. *Il valore atteso di un operatore Hermitiano è puramente reale.*

Dim.: La 2.3 e la corrispondenza duale tra $\langle \alpha | A$ e $A^\dagger | \alpha \rangle$ ci permettono di scrivere:

$$\langle \alpha | A | \alpha \rangle = \langle \alpha | A^\dagger | \alpha \rangle,$$

e quindi concludere. □

Si noti, inoltre, come un operatore anti-Hermitiano ($B = -B^\dagger$) ha valore atteso puramente immaginario.

Siamo ora in grado di provare la 2.34: si applichi il primo lemma ad $|\alpha\rangle = \Delta A |\gamma\rangle$ e $|\beta\rangle = \Delta B |\gamma\rangle$, con $|\gamma\rangle$ uno stato qualunque. Si ottiene:

$$\langle \Delta A^2 \rangle \langle \Delta B^2 \rangle \geq |\langle \Delta A \Delta B \rangle|^2,$$

sfruttando l'Hermitianità di ΔA e ΔB . Notiamo ora che:

$$\Delta A \Delta B = \frac{1}{2} [\Delta A, \Delta B] + \frac{1}{2} \{\Delta A, \Delta B\},$$

con il commutatore che è chiaramente anti-Hermitiano, mentre l'anticommutatore è Hermitiano. Otteniamo allora:

$$\langle \Delta A \Delta B \rangle = \frac{1}{2} \langle [\Delta A, \Delta B] \rangle + \frac{1}{2} \langle \{\Delta A, \Delta B\} \rangle,$$

e, grazie al secondo lemma, possiamo dire che la parte relativa al commutatore è puramente immaginaria, mentre la parte relativa all'anticommutatore è puramente reale. Quindi:

$$|\langle \Delta A \Delta B \rangle|^2 = \frac{1}{4} | \langle [\Delta A, \Delta B] \rangle |^2 + \frac{1}{4} | \langle \{\Delta A, \Delta B\} \rangle |^2;$$

se omettiamo il secondo termine, relativo all'anticommutatore, otteniamo la disuguaglianza 2.34. Essa esprime un vincolo (inferiore) all'accuratezza con cui è possibile misurare due grandezze, nel caso in cui gli osservabili relativi non commutino. Infatti possiamo interpretare la varianza come la dispersione delle misure intorno al valor medio e vedere che, se vogliamo rendere arbitrariamente piccola la dispersione per una misura, la dispersione relativa all'altro osservabile non può essere, in generale, resa altrettanto piccola. È una proprietà fondamentale dei sistemi quantistici, nota come *relazione (o principio) di indeterminazione*.

2.4 Dinamica quantistica

2.4.1 L'Equazione di Schroedinger

Come evolve nel tempo un sistema quantistico rappresentato all'istante t_0 dal ket $|\gamma\rangle$, in assenza di misure sul sistema stesso?

Non ci aspettiamo, in generale, che rimanga in tale stato, ma, denotando $|\gamma, t_0; t\rangle$ lo stato del sistema in un istante $t > t_0$ e t come un parametro continuo dell'evoluzione, richiediamo che:

$$\lim_{t \rightarrow t_0} |\gamma, t_0; t\rangle = |\gamma, t_0; t_0\rangle = |\gamma\rangle.$$

Dunque vogliamo studiare l'evoluzione temporale

$$|\gamma\rangle = |\gamma, t_0; t_0\rangle \rightarrow |\gamma, t_0; t\rangle :$$

possiamo mettere in relazione i due ket mediante un opportuno operatore $\mathcal{U}(t, t_0)$, che chiameremo operatore di evoluzione temporale:

$$|\gamma, t_0; t\rangle = \mathcal{U}(t, t_0)|\gamma, t_0\rangle. \quad (2.36)$$

Le proprietà che tale operatore deve soddisfare sono:

- (*Unitarietà*) Espandendo nei ket di base di un osservabile A lo stato normalizzato $|\gamma\rangle$ abbiamo:

$$|\gamma, t_0\rangle = \sum_i c_i(t_0)|\alpha_i\rangle$$

e, al tempo t :

$$|\gamma, t_0; t\rangle = \sum_i c_i(t)|\alpha_i\rangle;$$

Poichè i c_i^2 rappresentano la probabilità di trovare il sistema nell' i -esimo autostato di A , richiediamo che

$$\sum_i c_i^2(t_0) = \sum_i c_i^2(t) = 1,$$

essendo, in generale, $c_i(t) \neq c_i(t_0)$.

- (*Proprietà di composizione*) Una richiesta naturale è che:

$$\mathcal{U}(t_2, t_0) = \mathcal{U}(t_2, t_1)\mathcal{U}(t_1, t_0),$$

per $t_2 > t_1 > t_0$;

- (*Evoluzione infinitesima*) Consideriamo ora un operatore di evoluzione temporale relativo a un dt infinitesimo:

$$|\gamma, t_0; t_0 + dt\rangle = \mathcal{U}(t_0 + dt, t_0)|\gamma, t_0\rangle.$$

Oltre ai requisiti già specificati, ci aspettiamo che la differenza tra $\mathcal{U}(t_0 + dt, t_0)$ e l'identità sia del prim'ordine rispetto a t .

Si può mostrare che tali richieste sono soddisfatte nel caso

$$\mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) = I - \Omega dt,$$

trascurando gli infinitesimi di ordine superiore a dt , dove l'approssimazione è nel senso della norma degli operatori¹⁰, e con Ω operatore hermitiano. Ω deve avere la dimensione di una frequenza: assumiamo che l'evoluzione sia generata dall'Hamiltoniano¹¹ e, ricordando che \hbar è la costante universale di Planck divisa per 2π , scriviamo

$$\Omega = \frac{H}{\hbar} \Rightarrow \mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) = I - \frac{iHdt}{\hbar}$$

con H hamiltoniano del sistema. Tale assunzione si rivela corretta nella descrizione dell'evoluzione dei sistemi quantistici.

Per le proprietà sopra elencate possiamo scrivere:

$$\mathcal{U}(t + dt, t_0) = \mathcal{U}(t + dt, t)\mathcal{U}(t, t_0) = \left(I - \frac{iHdt}{\hbar} \right) \mathcal{U}(t, t_0)$$

¹⁰La definizione di tale norma è analoga a quella presentata nella 2.12 per i funzionali lineari, dove la norma sul denominatore non è più il valore assoluto nel campo complesso, ma è la norma definita sullo spazio che contiene l'immagine dell'operatore.

¹¹Tale assunzione può essere vista come naturale conseguenza dei risultati sia delle meccanica analitica, sia delle prime osservazioni sui sistemi quantistici della meccanica ondulatoria: l'Hamiltoniano è l'operatore legato all'energia del sistema e l'energia si può esprimere come $E = \hbar\omega$, dove ω è una frequenza.

$$\Rightarrow \mathcal{U}(t + dt, t_0) - \mathcal{U}(t, t_0) = - \left(\frac{iHdt}{\hbar} \right) \mathcal{U}(t, t_0)$$

che può essere riscritta come:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = H\mathcal{U}(t, t_0) \quad (2.37)$$

nota come *Equazione di Schrodinger per l'operatore di evoluzione temporale*, o, applicando entrambi i termini a: $|\gamma, t_0\rangle$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\gamma, t_0; t\rangle = H|\gamma, t_0; t\rangle, \quad (2.38)$$

chiamata analogamente *Equazione di Schrodinger per il vettore di stato*. Queste equazioni descrivono l'evoluzione di un sistema quantistico, *fino a quando non intervenga una misura sul sistema stesso*.

Dati l'Hamiltoniano, la sua eventuale dipendenza temporale e lo stato iniziale del sistema, per trovare esplicitamente lo stato finale, o, analogamente, l'operatore di evoluzione temporale corrispondente, previsto dall'equazione 2.37, si distinguono generalmente i seguenti casi:

I) H è indipendente dal tempo:

$$\Rightarrow \mathcal{U}(t, t_0) = e^{-\frac{iH(t-t_0)}{\hbar}} \quad (2.39)$$

II) H dipende dal tempo, ma i vari $H(t)$ commutano:

$$\Rightarrow \mathcal{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t) dt} \quad (2.40)$$

III) H dipende dal tempo ed i vari $H(t)$ **non** commutano:

$$\Rightarrow \mathcal{U}(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_0^t \int_0^{t_1} \dots \int_0^{t_{n-1}} (H(t_1)H(t_2)\dots H(t_n)) dt_n dt_{n-1} \dots dt_1 \quad (2.41)$$

(Serie di Dyson).

2.4.2 Autostati energetici

E' interessante valutare come $\mathcal{U}(t)$ agisce sugli autostati di un osservabile di interesse A , nel caso particolare in cui $[A, H] = 0$ e H è un Hamiltoniano indipendente dal tempo. In tal caso gli autostati di A sono anche autostati di H e vengono chiamati *Autostati Energetici*: siano $|\alpha_i\rangle$ tali vettori di stato; chiamiamo inoltre E_i gli autovalori relativi, per cui

$$H|\alpha\rangle = E_i|\alpha_i\rangle.$$

Possiamo espandere gli operatori di evoluzione temporale in termini di $\{|\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|\}_i$, prendendo, per semplicità, $t_0 = 0$:

$$\mathcal{U}(t) = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} = \sum_i \sum_j |\alpha_j\rangle\langle\alpha_j| e^{-\frac{iHt}{\hbar}} |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| \quad (2.42)$$

$$= \sum_i |\alpha_i\rangle e^{-\frac{iE_i t}{\hbar}} \langle\alpha_i|; \quad (2.43)$$

Allora ogni coefficiente di espansione $c_i(t)$ per $|\alpha\rangle$ evolve secondo:

$$c_i(t) = c_i(t_0) e^{-\frac{iE_i t}{\hbar}}$$

Quindi ogni c_i ruota nel piano complesso, rimanendo costante in modulo (quindi rimane costante anche la probabilità relativa all'osservazione di quell'autostato), ma cambia la fase relativa tra i vari $c_i(t)$, in quanto le frequenze:

$$\omega = \frac{E_i}{\hbar}$$

sono diverse.

Il discorso è generalizzabile per interi insiemi di osservabili mutuamente compatibili e compatibili con H : questo permette di espandere lo stato nella base degli Autovettori Energetici e determinare semplicemente l'evoluzione temporale.

2.4.3 Dipendenza temporale dei valori attesi

Vediamo in che maniera l'evoluzione temporale guidata da $\mathcal{U}(t)$ agisce sui valori attesi degli osservabili di interesse. Supponiamo inizialmente che lo

stato in un certo istante $t = 0$ coincida con uno degli autostati energetici di H , che denoteremo con $\{|\alpha_i\rangle\}$. Valutiamo dunque il valore atteso di un osservabile B (che non necessita di commutare con H):

$$\langle B(t) \rangle = (\langle \alpha_i | \mathcal{U}^\dagger(t, 0)) B (\mathcal{U}(t, 0) | \alpha_i \rangle) \quad (2.44)$$

$$= \langle \alpha_i | \left(e^{\frac{iE_i t}{\hbar}} \right) B \left(e^{-\frac{iE_i t}{\hbar}} \right) | \alpha_i \rangle \quad (2.45)$$

$$= \langle \alpha_i | B | \alpha_i \rangle \quad (2.46)$$

indipendente da t ; ecco perchè gli autostati energetici si chiamano anche *stati stazionari*;

Vediamo anche il caso generale in cui $|\gamma\rangle = \sum_i c_i |\alpha_i\rangle$, cioè una sovrapposizione di stati stazionari:

$$\langle B(t) \rangle = \left(\sum_i c_i^* \langle \alpha_i | \mathcal{U}^\dagger(t, 0) \right) B \left(\sum_j c_j \mathcal{U}(t, 0) | \alpha_j \rangle \right) \quad (2.47)$$

$$= \langle \alpha_i | \left(\sum_i c_i^* e^{\frac{iE_i t}{\hbar}} \right) B \left(\sum_j c_j e^{-\frac{iE_j t}{\hbar}} \right) | \alpha_i \rangle \quad (2.48)$$

$$= \sum_i \sum_j c_i^* c_j \langle \alpha_i | B | \alpha_j \rangle e^{-\left(\frac{i(E_j - E_i)t}{\hbar} \right)}; \quad (2.49)$$

notiamo quindi che l'evoluzione temporale dei valori attesi è determinata dalla sommatoria di termini oscillanti con frequenza corrispondente alla differenza di energia tra gli autostati energetici (*frequenza di Bohr*):

$$\omega_{j,i} = \frac{E_j - E_i}{\hbar}. \quad (2.50)$$

2.5 Operatori di densità

2.5.1 Operatori di densità

Il formalismo sviluppato finora descrive il comportamento di un singolo sistema quantistico isolato di cui conosciamo esattamente lo stato iniziale o, al più, su un insieme di sistemi identici, inizialmente preparati nello stesso stato $|\gamma\rangle$; per lavorare con sistemi quantistici reali, in cui, potenzialmente, si ha una qualunque distribuzione dei possibili stati sull'insieme di sistemi considerato, introduciamo il concetto di *popolazione frazionale*¹². Si introducono cioè dei pesi w_i , che indicano la probabilità di trovare il sistema in uno stato $|\gamma_i\rangle$ ¹³: sono numeri reali non negativi e, come ci si poteva aspettare, deve valere:

$$\sum_i w_i = 1.$$

E' opportuno precisare che i w_i non vanno confusi nè con i c_i , coefficienti della composizione lineare degli autostati di base relativi all'osservabile di interesse per ottenere un certo stato, nè con i $|c_i|^2$: aggiungeremo qualcosa più avanti su questa importante distinzione tra modi descrivere il sistema di interesse.

Si possono distinguere:

- **Insiemi Puri:** gli insiemi di sistemi che sono descritti dallo stesso stato, ovvero

$$\exists \bar{w}_i = 1;$$

- **Insiemi Completamente Casuali:** gli insiemi di sistemi distribuiti uniformemente:

$$w_i = w_j, \forall i, j;$$

¹²Un approccio di questo tipo ci permetterà di trattare sottoinsiemi di sistemi congiunti, che saranno presentati nella prossima sezione, indipendentemente dal resto del macrosistema.

¹³Non c'è alcuna restrizione sugli stati da considerare e non è necessario che siano ortogonali.

- **Insiemi Misti:** gli insiemi in condizioni intermedie, per cui l'unica restrizione sui $\{w_i(\geq 0)\}$ è $\sum_i w_i = 1$.

Definiamo ora, dato un osservabile A , la *media d'insieme* di A come:

$$[A] = \sum_i w_i \langle \gamma_i | A | \gamma_i \rangle = \sum_i \sum_j w_i |\langle \alpha_j | \gamma_i \rangle|^2 a_j, \quad (2.51)$$

con $\{|\alpha_j\rangle\}$ autostati di A e a_j relativi autovalori; si può anche scrivere, in una base $\{|\beta_k\rangle\}$

$$[A] = \sum_i w_i \sum_k \sum_l \langle \gamma_i | \beta_k \rangle \langle \beta_k | A | \beta_l \rangle \langle \beta_l | \gamma_i \rangle \quad (2.52)$$

$$= \sum_k \sum_l \left(\sum_i w_i \langle \beta_l | \gamma_i \rangle \langle \gamma_i | \beta_k \rangle \right) \langle \beta_k | A | \beta_l \rangle, \quad (2.53)$$

in cui le proprietà dell'insieme dipendono dall'osservabile considerato e dalla fattorizzazione.

Possiamo dunque dare la seguente:

Definizione 4. *L'operatore di densità è :*

$$\rho = \sum_i w_i |\gamma_i\rangle \langle \gamma_i|.$$

Gli elementi della matrice corrispondente saranno allora nella forma:

$$\langle \beta_k | \rho | \beta_l \rangle = \sum_i w_i \langle \beta_k | \alpha_i \rangle \langle \alpha_i | \beta_l \rangle,$$

e dunque

$$[A] = \sum_l \sum_k \langle \beta_k | \rho | \beta_l \rangle \langle \beta_l | A | \beta_k \rangle = \text{Tr}(\rho A).$$

Quindi, essendo la traccia indipendente dalla rappresentazione, la media d'insieme può essere calcolata in una qualunque base conveniente. Inoltre:

- L'operatore di densità è Hermitiano (dalla definizione) e semidefinito positivo;

- Soddisfa la proprietà di normalizzazione:

$$\text{Tr}(\rho) = \sum_i \sum_k w_i \langle \beta_k | \alpha_i \rangle \langle \alpha_i | \beta_k \rangle \quad (2.54)$$

$$= \sum_i w_i \langle \alpha_i | \alpha_i \rangle \quad (2.55)$$

$$= 1; \quad (2.56)$$

- Nel caso di un insieme puro, la matrice è idempotente:

$$\rho = \rho^2, \text{Tr}(\rho^2) = 1,$$

e, quindi, è una proiezione ortogonale.

Si può inoltre mostrare che la traccia di ρ^2 è uguale ad uno solo nel caso di un insieme puro, minore di uno altrimenti.

Cerchiamo ora di definire meglio i diversi ruoli di operatore di densità e vettore di stato nel descrivere la nostra conoscenza riguardo un sistema o un insieme di sistemi fisici.

- Il vettore di stato è adatto a descrivere sistemi di cui si conoscono esattamente lo stato iniziale e gli hamiltoniani che hanno guidato la sua evoluzione; in un certo senso questa descrizione descrive bene, rispetto alla misura, l'incertezza *intrinseca* del sistema, cioè quella dovuta a una sovrapposizione degli autostati dell'osservabile in questione, che introduce una predizione probabilistica relativa all'esito della misura. È quindi un'incertezza strettamente (e solamente) legata alla natura dei sistemi quantistici rispetto alla misura.
- D'altra parte, se non possiamo conoscere l'esatta preparazione di ogni sottosistema di un insieme, se possono essere intervenute dinamiche impreviste o se non conosciamo esattamente che forma di interazione lega un sottosistema ad un sistema ambiente o al resto dell'insieme, la rappresentazione tramite sovrapposizione di autostati non è più adeguata. Sono presenti nella nostra conoscenza del sistema delle componenti di

incertezza non più legate solamente al processo di misura quantistica, quindi *intrinseche* nel modello stesso, ma *estrinseche* ad esso, legate alla nostra impossibilità di conoscere sufficientemente bene lo stato del sistema o di descrivere interamente un modello complicato. Il modello del sistema migliore che possiamo dare, in una di queste situazioni, richiede l'introduzione di un'altra componente probabilistica che tenga conto di questa nuova fonte di incertezza sul comportamento del sistema stesso.

L'approccio tramite operatori di densità, tramite l'introduzione dei w_i , permette di dare una previsione statistica rispetto a qualunque tipo di misura, rispondendo adeguatamente a tale problematica e rappresentando correttamente la maggior parte dei sistemi reali.

2.5.2 Evoluzione temporale degli operatori di densità

Dalla definizione di operatore di densità,

$$\rho = \sum_i w_i |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i|,$$

si vede che l'evoluzione dell'operatore stesso è determinata dall'evoluzione degli $|\alpha_i\rangle$, a meno di non modificare i coefficienti w_i .

Possiamo allora scrivere:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \sum_i w_i (H |\alpha_i(t)\rangle \langle \alpha_i(t)| - |\alpha_i(t)\rangle \langle \alpha_i(t)| H) \\ &= -[\rho, H] \end{aligned} \quad (2.57)$$

e, dunque,

$$\rho(t) = \mathcal{U}(t) \rho \mathcal{U}^\dagger(t).$$

Anche per gli operatori di densità la dinamica è generata dall'hamiltoniano ed è determinata dall'operatore di evoluzione temporale, che agisce a destra e sinistra (coniugato) di ρ .

Come esito di una misura, anche l'operatore di densità è proiettato sugli autostati esito della misura stessa e, per ognuno di essi, vale:

$$\rho \rightarrow \frac{P_i^\dagger \rho P_i}{\text{Tr}(P_i \rho)}.$$

2.5.3 La sfera di Bloch

Introduciamo ora una notazione che sarà utile in seguito. La più generale matrice di densità in uno spazio bidimensionale può essere scritta come combinazione lineare a coefficienti reali della base $\{I, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$, formata dalle matrici di Pauli:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.58)$$

$$\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (2.59)$$

$$\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.60)$$

più l'identità; per maggiori dettagli sulla rappresentazioni di rotazioni e sul formalismo di Pauli, si veda l'appendice A. Avendo le σ_i traccia nulla, è necessario che la I abbia coefficiente $\frac{1}{2}$ per potere avere $Tr(\rho) = 1$. In questo modo tolgo un grado di libertà alla rappresentazione matriciale di ρ , e, prendendo un vettore $\vec{P} = P_1, P_2, P_3$, posso scrivere:

$$\rho(\vec{P}) = \frac{1}{2}(I + \vec{P} \cdot \vec{\sigma}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + P_3 & P_1 - iP_2 \\ P_1 + iP_2 & 1 - P_3 \end{pmatrix}. \quad (2.61)$$

Condizione necessaria per cui ρ abbia autovalori (w_i) positivi è che

$$\det(\rho) = 1 - P_3^2 - P_2^2 - P_1^2 \geq 0,$$

essendo il determinante il prodotto degli autovalori. Allora la condizione è che:

$$|\vec{P}|^2 \leq 1,$$

quindi $0 \leq |\vec{P}| \leq 1$.

Possiamo allora descrivere tutti i possibili operatori di densità come punti nella palla unitaria dello spazio tridimensionale, la *Sfera di Bloch*, identificati dalle tre coordinate \vec{P} .

2.6 Spazi di stato congiunti

2.6.1 Prodotto tensoriale

Consideriamo due sistemi quantistici indipendenti \mathcal{A}, \mathcal{B} , inizialmente descritti dagli stati $|\alpha_{\mathcal{A}}\rangle \in \mathcal{H}_{\mathcal{A}}, |\alpha_{\mathcal{B}}\rangle \in \mathcal{H}_{\mathcal{B}}$. Supponiamo ora di dover descrivere, ad esempio, delle interazioni tra i sistemi: è necessario passare da i due spazi di stato indipendenti ad uno *Spazio Congiunto*, che indicheremo con:

$$\mathcal{H}_{\mathcal{AB}} = \mathcal{H}_{\mathcal{A}} \otimes \mathcal{H}_{\mathcal{B}};$$

Il simbolo \otimes indica il *prodotto tensore* dei due spazi di stato, così caratterizzato:

- se $N_{\mathcal{A}}$ e $N_{\mathcal{B}}$ sono le dimensioni rispettivamente di $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ e $\mathcal{H}_{\mathcal{B}}$, la dimensione di $\mathcal{H}_{\mathcal{AB}}$ è $N_{\mathcal{AB}} = N_{\mathcal{A}} \cdot N_{\mathcal{B}}$;
- il prodotto tensore tra ket di $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ e $\mathcal{H}_{\mathcal{B}}$ (o tra bra dei relativi spazi duali) che mappa tra coppie di vettori appartenenti ai due spazi in vettori di $\mathcal{H}_{\mathcal{AB}}$, è definito costruttivamente specificando che mappa una coppia di vettori

$$(|a_i\rangle_{\mathcal{A}}, |b_j\rangle_{\mathcal{B}}) \rightarrow |a_i b_j\rangle_{\mathcal{AB}} = |a_i\rangle_{\mathcal{A}} \otimes |b_j\rangle_{\mathcal{B}},$$

avendo le seguenti proprietà ¹⁴:

1. Linearità:

$$(c|\alpha\rangle) \otimes |\beta\rangle = c(|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle);$$

2. Distributiva rispetto alla somma:

$$|\alpha\rangle \otimes (|\beta\rangle + |\gamma\rangle) = |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle + |\alpha\rangle \otimes |\gamma\rangle;$$

¹⁴Per non creare confusione e non dover appesantire la scrittura formale tralascieremo a volte i pedici relativi al sistema di riferimento, impegnandoci a mantenere ordinata la scrittura dei prodotti, mantenendo il termine relativo al primo spazio a sinistra e quello relativo al secondo a destra (e così via nel caso in cui più spazi partecipino al prodotto) .

3. Aggiunta:

$$(|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle)^\dagger = \langle\alpha| \otimes \langle\beta|;$$

4. Distributiva rispetto al prodotto scalare:

$$(\langle\alpha_{\mathcal{A}}| \otimes \langle\beta_{\mathcal{B}}|)(|\gamma_{\mathcal{A}}\rangle \otimes |\psi_{\mathcal{B}}\rangle) = \langle\alpha_{\mathcal{A}}|\gamma_{\mathcal{A}}\rangle \langle\beta_{\mathcal{B}}|\psi_{\mathcal{B}}\rangle;$$

- se $\{a_i\}, \{b_j\}$ sono basi ortonormali di $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}, \mathcal{H}_{\mathcal{B}}$, una base ortonormale di $\mathcal{H}_{\mathcal{AB}}$ è:

$$\{|a_i, b_j\rangle = |a_i\rangle \otimes |b_j\rangle\};$$

possiamo dunque scrivere un qualunque stato appartenente a $\mathcal{H}_{\mathcal{AB}}$ come:

$$|\alpha\rangle_{\mathcal{AB}} = \sum_i \sum_j c_{i,j} |a_i\rangle \otimes |b_j\rangle.$$

E' frequente in letteratura l'omissione del simbolo di prodotto tensore \otimes , "giustificata" dal fatto che un prodotto tra ket e ket (o tra bra e bra) non è definito altrimenti. Va comunque sottolineato che il prodotto tra ket e ket non ha significato fisico per stati che si riferiscono allo stesso sottospazio, e quindi allo stesso sistema.

2.6.2 Stati legati (Entanglement)

Una delle più profonde conseguenze dell'introduzione dello spazio di stato congiunto è l'esistenza di stati $|\psi\rangle_{\mathcal{AB}} \in \mathcal{H}_{\mathcal{AB}}$ che non possono essere espressi come prodotto tensoriale di due stati $|\psi\rangle_{\mathcal{A}} \in \mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ e $|\psi\rangle_{\mathcal{B}} \in \mathcal{H}_{\mathcal{B}}$.

Questi stati non fattorizzabili sono detti *legati* o, mantenendo la dicitura anglosassone, *entangled*.

Si considerino, ad esempio, due sistemi bidimensionali descritti nelle basi $\{|0_{\mathcal{A}}\rangle, |1_{\mathcal{A}}\rangle\}$ e $\{|0_{\mathcal{B}}\rangle, |1_{\mathcal{B}}\rangle\}$; i vettori in $\mathcal{H}_{\mathcal{AB}}$ possono essere allora espressi nella base:

$$\{|0_{\mathcal{A}}\rangle \otimes |0_{\mathcal{B}}\rangle, |0_{\mathcal{A}}\rangle \otimes |1_{\mathcal{B}}\rangle, |1_{\mathcal{A}}\rangle \otimes |0_{\mathcal{B}}\rangle, |1_{\mathcal{A}}\rangle \otimes |1_{\mathcal{B}}\rangle\},$$

o, in maniera più compatta:

$$\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}, \quad (2.62)$$

detta anche *base canonica* per \mathcal{H}_{AB} ; gli stati fattorizzabili sono quindi nella forma:

$$\begin{aligned} |\psi_{AB}^f\rangle &= (a_0|0_A\rangle + a_1|1_A\rangle) \otimes (b_0|0_B\rangle + b_1|1_B\rangle) \\ &= a_0b_0|00\rangle + a_0b_1|01\rangle + a_1b_0|10\rangle + a_1b_1|11\rangle. \end{aligned} \quad (2.63)$$

I coefficienti rispetto alla nuova base dello spazio congiunto devono, quindi, soddisfare alcune relazioni per poter essere scritti in forma fattorizzata. Se $|\psi\rangle = x|00\rangle + y|01\rangle + z|10\rangle + w|11\rangle \in \mathcal{H}_{AB}$, perchè possa essere scritto in forma fattorizzata, devono valere le seguenti:

$$\begin{cases} x &= a_0b_0 \\ y &= a_0b_1 \\ z &= a_1b_0 \\ w &= a_1b_1. \end{cases}$$

Un caso in cui questo non succede, ad esempio, è $|\psi_{AB}^l\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$: non c'è modo di trovare due stati distinti di \mathcal{A} e \mathcal{B} il cui prodotto dia $|\psi_{AB}^l\rangle$. Infatti:

$$\begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} &= a_0b_0 \\ 0 &= a_0b_1 \\ 0 &= a_1b_0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} &= a_1b_1, \end{cases}$$

implicherebbe che a_0 o b_1 , e a_1 o b_0 , siano uguali a zero (si vedano le due condizioni “centrali”); questo è in contraddizione con le rimanenti condizioni, in quanto anche gli altri due prodotti sarebbero forzati ad assumere valore zero.

2.6.3 Prodotto tensoriale di operatori

Se A e B sono operatori lineari rispettivamente su \mathcal{H}_A e \mathcal{H}_B , allora $A \otimes B$ è un operatore su \mathcal{H}_{AB} , e la sua azione su di uno stato arbitrario:

$$|\psi_{AB}\rangle = \sum_{i,j} c_{ij} |a_i\rangle \otimes |b_j\rangle$$

è definita da:

$$A \otimes B |\psi_{AB}\rangle = \sum_{i,j} c_{ij} (A|a_i\rangle) \otimes (B|b_j\rangle).$$

Nel caso in cui sia possibile scrivere A e B come somma di operatori di proiezione sugli autospazi, come nel caso siano due osservabili i cui autospazi generino l'intero spazio di Hilbert, si può scrivere:

$$A \otimes B = \left(\sum_i \lambda_i P_i^A \right) \otimes \left(\sum_j \mu_j P_j^B \right) = \sum_{i,j} \lambda_i \mu_j P_i^A \otimes P_j^B,$$

dove l'operatore P_i rappresenta l'operatore di proiezione ortogonale sull' i -esimo autospazio di base.

Dati due operatori di densità, ognuno relativo ad uno dei due sottosistemi \mathcal{A} e \mathcal{B} possiamo combinarli per ottenere un operatore di densità che descrive uno stato d'insieme in \mathcal{H}_{AB} :

$$\rho_{AB} = \rho_A \otimes \rho_B.$$

Più in generale, possiamo considerare operatori di densità su tutto \mathcal{H}_{AB} :

$$\rho_{AB} = \sum_i w_i |\psi_{AB}\rangle \langle \psi_{AB}|,$$

con $|\psi_{AB}\rangle$ stato puro di \mathcal{H}_{AB} .

Osserviamo anche che, scelta una base per i due spazi, operatore su \mathcal{H}_{AB} generato da A su \mathcal{H}_A , B su \mathcal{H}_B , ha rappresentazione matriciale a blocchi:

$$A \otimes B \doteq \begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \\ \dots & a_{ij} B & \dots \\ & \vdots & \ddots \end{pmatrix}_{i,j}. \quad (2.64)$$

Degli operatori particolarmente utili su $\mathcal{H}_{\mathcal{AB}}$ sono i *proiettori parziali*:

$$I_{\mathcal{A}} \otimes P_{j,\mathcal{B}}, P_{i,\mathcal{A}} \otimes I_{\mathcal{B}};$$

sono ancora proiettori, in quanto vale:

$$(A_1 \otimes B_1)(A_2 \otimes B_2) = A_1 A_2 \otimes B_1 B_2.$$

Posso quindi scomporre spettralmente osservabili del tipo $O^{\mathcal{A}} \otimes I_{\mathcal{B}}$ tramite i proiettori: se $P_k^{\mathcal{B}} = |b_k\rangle\langle b_k|$ con $\{|b_j\rangle\}$ base di $\mathcal{H}_{\mathcal{B}}$, allora:

$$(I_{\mathcal{A}} \otimes P_{k,\mathcal{B}})|\psi_{\mathcal{AB}}\rangle = (I_{\mathcal{A}} \otimes P_{k,\mathcal{B}}) \sum_{i,j} c_{ij} |a_i\rangle \otimes |b_j\rangle \quad (2.65)$$

$$= \sum_{i,j} c_{ij} |a_i\rangle |b_k\rangle \quad (2.66)$$

$$= b_k |\psi_{\mathcal{A}}\rangle \otimes |b_k\rangle. \quad (2.67)$$

$$(2.68)$$

Tale proiettore, applicato ad uno stato fattorizzabile, modifica solo lo stato relativo al sottosistema \mathcal{B} . Se, invece, è *legato (entangled)*, l'intero stato è modificato.

Capitolo 3

Controllo di Sistemi Quantistici

Sono molte, ormai, le applicazioni tecnico-scientifiche in cui bisogna confrontarsi con sistemi fisici che presentano effetti quantistici. Dalla chimica molecolare alla spettroscopia, dalle telecomunicazioni ottiche alla computazione quantistica, le problematiche chiave sono le stesse: preparare il sistema in un dato stato, guidare la sua evoluzione nel tempo fino ad uno stato obiettivo, eseguire una misura delle grandezze fisiche rilevanti. Per quanto riguarda la seconda fase, in particolare, è in atto, da parte di diversi gruppi di ricerca in tutto il mondo, il tentativo di utilizzare gli strumenti già ampiamente sviluppati nella teoria del controllo per dare un adeguato supporto teorico alla fervente ricerca sperimentale.

Il presente lavoro mira a collocarsi in quest'ottica, studiando i modelli matematici dei sistemi quantistici di interesse da un punto di vista “controlistico” e focalizzando in particolare l'attenzione sulle problematiche di stabilità e robustezza.

3.1 Il modello

3.1.1 L'Hamiltoniano del sistema

Consideriamo un sistema quantistico isolato (senza interazioni con il resto dell'universo), la cui evoluzione libera è descritta, a partire dall'istante t_0

dalla 2.38:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi, t_0; t\rangle = H(t) |\psi, t_0; t\rangle. \quad (3.1)$$

Supponiamo che il sistema, per $t = t_0$, sia nello stato (noto) $|\psi_0\rangle = |\psi, t_0; t\rangle$, e l'obiettivo della strategia di controllo sia lo stato $|\psi_f\rangle$. Il modo naturale di includere nel modello le interazioni con l'esterno, attuate e controllate per guidare l'evoluzione dello stato, è quello di perturbare l'hamiltoniano H_0 dell'evoluzione libera del sistema, detto anche hamiltoniano *interno*, che supporremo indipendente dal tempo, con delle opportune componenti "forzate". Passiamo cioè da $H(t) = H_0$ ad un hamiltoniano nella forma:

$$H(t) = H_0 + \sum_{i=1}^m u_i(t) H_i,$$

con gli $u_i(t)$, supposte integrabili secondo Lebesgue, che giocano il ruolo di *ingressi* per il sistema, gli H_i operatori hermitiani lineari, indipendenti dal tempo, che determinano l'influenza degli $u_i(t)$ sull'hamiltoniano totale. Gli $u_i(t)$, ad esempio, possono rappresentare impulsi elettromagnetici e gli H_i gli operatori di accoppiamento al sistema. Otteniamo così il seguente modello di evoluzione per lo stato:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi, t\rangle = (H_0 + \sum_{i=1}^m u_i(t) H_i) |\psi, t\rangle, \quad (3.2)$$

o, analogamente per l'operatore di evoluzione temporale (*propagatore*):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t) = (H_0 + \sum_{i=1}^m u_i(t) H_i) \mathcal{U}(t). \quad (3.3)$$

Il modello così ottenuto è abbastanza generale e permette, con scelte opportune degli $u_i(t)$ e degli H_i , di descrivere tutti i sistemi particolari che useremo più avanti.

3.1.2 Controllabilità e raggiungibilità

Un approccio molto utilizzato nel tentativo di inquadrare l'evoluzione del sistema come un problema di controllo, è quello di considerare il modello 3.3

e cercare, quindi, di ottenere, tramite una strategia opportuna, il propagatore desiderato.

Un primo quesito a cui è importante rispondere riguarda la possibilità di ottenere effettivamente il propagatore desiderato con i controlli realizzabili e in quanto tempo ciò sia possibile. Posto il problema in questi termini, diventa naturale, limitandosi a considerare il caso finito dimensionale, affrontare il problema studiando i gruppi di Lie generati dalle matrici H_i , che determinano il tipo di interazioni, dopo averle opportunamente trasformate.

Ci limitiamo qui a riportare il seguente risultato sulla controllabilità dei sistemi quantistici, rimandando ai lavori citati in bibliografia per una trattazione approfondita ([7],[5],[6]):

Teorema 4. *Si consideri il sistema 3.3 e si scrivano $\frac{H_i}{i\hbar} = D_i + A_i$, $i = 1, \dots, n$ dove $D_i = \frac{1}{2} \text{diag}(\text{Tr}(A_i), \text{Tr}(A_i))$. Le matrici A_i sono a traccia nulla e le D_i danno un contributo di pura fase alla soluzione del sistema, quindi possiamo limitarci a considerare:*

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t) = \left(A_0 + \sum_{i=1}^m u_i(t) A_i \right) \mathcal{U}(t).$$

Sia \mathcal{G}_0 il sottogruppo di Lie di $SU(2)$ generato da $\{A_0, \dots, A_n\}$ e \mathcal{G}_1 quello generato da $\{A_1, \dots, A_n\}$; sia, inoltre, $R(\mathcal{U}(t_0), t)$ l'insieme di matrici raggiungibili in un tempo t a partire da $\mathcal{U}(t_0)$. Allora:

- esiste un tempo $t^* \geq 0$ tale che:

$$R(I, t) = \mathcal{G}_0$$

per ogni $t \geq t^*$;

- L'insieme di matrici raggiungibili in un tempo arbitrario è dato da:

$$\bigcap_{t>0} R(I, t) = \mathcal{G}_1.$$

3.2 Stabilità e Robustezza

3.2.1 Problematiche di interesse

Richiamiamo ora alcuni concetti e definizioni fondamentali dal campo dell'automatica. Sia da un punto di vista teorico, che, soprattutto, da un punto di vista sperimentale è cruciale valutare il comportamento di un sistema su cui si desidera applicare una qualche strategia di controllo rispetto a variazioni delle condizioni iniziali o rispetto a variazioni nell'implementazione del controllo.

Un'altra caratteristica del sistema che si vuole studiare è il comportamento rispetto a possibili variazioni dei parametri, o, più in generale, del sistema stesso rispetto alla sua condizione “nominale”.

Caratteristiche del primo tipo vengono chiamate proprietà di *stabilità* del sistema, mentre la seconda è una proprietà di *robustezza*.

Per un sistema di primo grado, nella forma generale $\dot{x} = f(x, u)$, dove x rappresenta il vettore di stato e u gli ingressi, per cui supponiamo l'“uscita” di interesse coincida con lo stato x , si danno le seguenti definizioni (si veda [11]), relative alla *stabilità rispetto alle condizioni iniziali*:

Definizione 5. x_e si dice stato di equilibrio per il sistema $\dot{x} = f(x, u)$, relativo all'ingresso costante \bar{u} , se si ha:

$$f(x_e, \bar{u}) = 0.$$

Definizione 6. Uno stato di equilibrio x_e si dice stabile, se, per ogni numero reale $\varepsilon \geq 0$ esiste un numero reale $\delta \geq 0$ tale che, se:

$$\|x(0) - x_e\| < \delta$$

allora $\forall t > 0$ gli stati della traiettoria¹ con origine in $x(0)$ soddisfano:

$$\|x(t) - x_e\| < \varepsilon.$$

¹Con traiettoria si intende l'insieme degli stati assunti dal sistema per $t > 0$.

Definizione 7. *Uno stato di equilibrio x_e si dice asintoticamente stabile se è stabile e se esiste un numero reale $\delta > 0$ tale che, se:*

$$\|x(0) - x_e\| < \delta,$$

allora $\lim_{t \rightarrow +\infty} \|x(t) - x_e\| = 0$.

Un secondo tipo di stabilità, relativa al sistema e non ad un suo punto di equilibrio, molto importante per i problemi di controllo, è la *stabilità ingresso-uscita*, o stabilità BIBO (Bounded Input Bounded Output).

Definizione 8. *Un sistema è stabile nel senso ingresso-uscita se mappa ingressi limitati in uscite limitate.*

La caratterizzazione della proprietà di *robustezza*, anche in ambito di teoria del controllo, non è formalizzabile in maniera così precisa. In generale è necessario individuare due “ingredienti” fondamentali:

- l'insieme \mathcal{P} dei sistemi (o impianti) che si desidera controllare. \mathcal{P} descrive l'incertezza che abbiamo nella descrizione del sistema;
- una caratteristica del sistema, per esempio la stabilità BIBO, o altre specifiche che si desidera conseguire indipendentemente da $p \in \mathcal{P}$.

La problematica chiave è lo studio di come questa caratteristica risenta dello scostamento del sistema reale da quello nominale, di “progetto”.

Si parla, inoltre, di incertezza *non strutturata* quando, introdotta un'opportuna metrica sull'insieme \mathcal{S} di tutti i sistemi per mezzo della funzione distanza $d(\cdot, \cdot)$, l'unica maniera di dare una descrizione di \mathcal{P} è scriverlo nella forma

$$\mathcal{P} = \{p \in \mathcal{S} \mid d(f, f_0) \leq k\},$$

con f_0 sistema nominale e k una qualche costante. Casi di *incertezza strutturata* sono, invece, un insieme finito di sistemi possibili $\mathcal{P} = \{p_1, \dots, p_n\}$, o

²Questa seconda proprietà caratterizza l’“attrattività” del punto di equilibrio considerato.

identificato da un intervallo di possibili valori per un parametro interno al sistema, $\mathcal{P} = \{p_q \in \mathcal{S} \mid q_1 \leq q \leq q_2\}$.

Richiamate le definizioni fondamentali relative ai concetti di stabilità e robustezza, si tratta ora di valutare la loro applicabilità al modello 3.2. Esaminiamo, dunque, una per una le definizioni date relativamente a un modello matematico per un sistema quantistico abbastanza generale.

3.2.2 Comportamento rispetto alle condizioni iniziali

Anche se non è di centrale interesse rispetto ad altri tipi di analisi, procediamo, per completezza, facendo alcune osservazioni sulle definizioni date. Come è stato ricordato in precedenza (§2.3.1), il significato fisico di uno stato non cambia rispetto a fattori di fase complessivi. Quindi, se il sistema è in uno stato iniziale $|\psi\rangle$ e l'evoluzione temporale non fa altro che restituire, in ogni istante t , uno stato nella forma $c(t)|\psi\rangle$, con $c(t) \in \mathbb{C}$, in realtà lo stato fisico del sistema non cambia. Quindi apparirebbe naturale modificare la definizione di stato di equilibrio per un sistema quantistico, nella forma che segue:

Definizione 9. $|\psi\rangle$ è uno stato di equilibrio per un sistema quantistico se ogni stato assunto dal sistema, che si trova nello stato $|\psi\rangle$ in t_0 , durante un'evoluzione libera guidata da una n -upla di ingressi costanti \bar{u} , per $t \geq t_0$, si può scrivere nella forma $c(t)|\psi\rangle$, con $c(t) \in \mathbb{C}$.

Questa definizione è costruita per coinvolgere, ovviamente, tutti gli stati stazionari legati all'hamiltoniano considerato. La formulazione precedente, che non considera le particolarità del formalismo quantistico, si sarebbe limitata a comprendere i soli (eventuali) autostati energetici ad autovalore energetico nullo.

Detto questo, scrivendo il sistema 3.2 nella forma:

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi, t\rangle = \frac{H(\bar{u})}{i\hbar}|\psi, t\rangle, \quad (3.4)$$

è immediato verificare che, essendo gli autovalori di H reali, gli autovalori di $\frac{H(\bar{u})}{i\hbar}$ sono puramente immaginari. Quindi, grazie a dei risultati ben

noti per i sistemi lineari (si veda, ad esempio, [11]) ogni stato stazionario è (semplicemente) stabile, ma non convergente. Tale osservazione rende “poco interessante” lo studio di caratteristiche analoghe alla stabilità rispetto alle condizioni iniziali in senso “controllistico”: l’unitarietà dell’evoluzione mantiene costante la norma della differenza tra lo stato di equilibrio e lo stato reale per tutta l’evoluzione temporale, nel caso in cui H sia indipendente dal tempo. Nessuno stato di equilibrio, inclusi quelli compresi dalla nuova definizione, avrebbe quella proprietà di attrattività che lo renderebbe un obiettivo per l’evoluzione temporale sostanzialmente insensibile a variazioni delle condizioni iniziali.

3.2.3 Continuità rispetto agli ingressi

Per il modello preso in considerazione, ha poco senso domandarsi se il sistema sia stabile nel senso ingresso-uscita: la normalizzazione dei vettori di stato nel processo di misura li costringe a rimanere sulla sfera di raggio unitario, e quindi la nostra “uscita”, che coincide con lo stato del sistema, è forzosamente limitata per ogni ingresso.

È invece più interessante chiedersi se lo stato finale è funzione continua degli ingressi. Per semplicità espositiva, la dimostrazione che segue considera un sistema finito dimensionale con un solo ingresso, ma l’estensione al caso infinito dimensionale e ad m ingressi non presenta particolari difficoltà. Consideriamo la seguente situazione, per il modello 3.2 nel caso $m = 1$, che quindi assume la forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \frac{H_0 + u_1(t)H_1}{i\hbar} |\psi(t)\rangle;$$

- fissiamo in $[t_0, t_1]$ l’intervallo temporale in cui avviene l’evoluzione.
- Sia $|\psi_0\rangle = |\psi(t_0)\rangle$ lo stato iniziale del sistema;
- supponiamo inoltre di aver trovato il controllo $u^*(t)$ che guida il sistema da $|\psi_0\rangle$ nello stato obiettivo $|\psi_f\rangle = |\psi_{u^*}(t_1)\rangle$.

Ci chiediamo quale sia l'effetto sullo stato finale se, invece che la funzione di controllo $u^*(t)$, si impiega una funzione “perturbata” $u(t) := u^*(t) + \delta u(t)$, dove supponiamo che δu sia piccola in un'opportuna norma: consideriamo, ad esempio, $\|\delta u\| = \sup_{[t_0, t_1]} |\delta u(t)|$. L'evoluzione, in questo caso, viene determinata da:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_\delta(t)\rangle = H_0 |\psi_\delta(t)\rangle + u^*(t) H_1 |\psi_\delta(t)\rangle + \delta u H_1 |\psi_\delta(t)\rangle;$$

Confrontandola con l'evoluzione imperturbata otteniamo:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (|\psi_\delta(t)\rangle - |\psi(t)\rangle) = H_0 (|\psi_\delta(t)\rangle - |\psi(t)\rangle) + u^*(t) H_1 (|\psi_\delta(t)\rangle - |\psi(t)\rangle) + \delta u H_1 |\psi_\delta(t)\rangle. \quad (3.5)$$

Definiamo ora il vettore di $\Delta\psi(t) = |\psi(t)\rangle - |\psi_\delta(t)\rangle$, che rappresenta in ogni istante tra t_0 e t_1 la differenza tra lo stato dell'evoluzione voluta e quello dell'evoluzione perturbata.

Riformulando il problema, ci chiediamo se $\forall \varepsilon > 0 \quad \exists \delta > 0$ tale che se:

$$\|\delta u(t)\| < \delta \Rightarrow \|\Delta\psi(t_1)\| < \varepsilon,$$

dove $\|\cdot\|$ indica la norma dell'estremo superiore.

Allora possiamo scrivere la 3.5 come:

$$\frac{\partial}{\partial t} \Delta\psi(t) = (H_0 + u^*(t) H_1) \Delta\psi(t) + H_1 (|\psi_\delta(t)\rangle) \delta u(t). \quad (3.6)$$

Passiamo dunque a scriverla nella forma compatta;

$$\frac{\partial}{\partial t} \Delta\psi(t) = H(t) \Delta\psi(t) + f(t); \quad (3.7)$$

sappiamo inoltre che $\Delta\psi(0) = 0$ e che, essendo H_1 costante e $|\psi_\delta(t)\rangle$ limitato, vincolando $\delta u(t)$ ad essere minore di δ , possiamo ottenere che $\|f(t)\|$ sia arbitrariamente piccola.

La soluzione generale per $\Delta\psi(t)$ è, introducendo la *matrice fondamentale* (di Green) $\Phi(t_0, t)$, nella forma:

$$\Delta\psi(t) = \Phi(t_0, t) \Delta\psi(0) + \int_{t_0}^t \Phi(t_0, \sigma) f(\sigma) d\sigma, \quad (3.8)$$

dove il primo addendo vale zero, in quanto $\Delta\psi(0) = 0$, $\Phi(t_0, t)$ è una funzione limitata e per il secondo addendo si può ottenere, per ogni ϵ :

$$\left\| \int_{t_0}^t \Phi(t_0, \sigma) f(\sigma) d\sigma \right\| < \epsilon,$$

grazie ad una scelta opportuna di δ , con $\|\delta u(t)\| < \delta$. Abbiamo così concluso, mostrando che, in particolare per $t = t_1$, lo stato finale è una funzione continua degli ingressi.

3.2.4 Robustezza per un sistema quantistico

I problemi di robustezza necessitano, come abbiamo visto, di identificare delle caratteristiche e delle specifiche sul sistema, oltre ad un insieme di sistemi possibili. È quindi difficile anche soltanto identificare il problema a questo livello di generalità. Vedremo, inoltre, che lo stesso concetto di robustezza assume forme sostanzialmente diverse a seconda delle applicazioni, pur all'interno della stessa area di ricerca. Rimandiamo dunque il tentativo di formalizzare questa caratteristica per i sistemi quantistici, affrontando, invece, uno dei campi più interessanti e promettenti di applicazione della meccanica quantistica e del controllo dei suoi sistemi.

Capitolo 4

Computazione Quantistica

4.1 In principio

“In conclusione sembra che le leggi della fisica non pongano alcuna barriera alla possibilità di ridurre le dimensioni dei computer fino al livello in cui i singoli bits abbiano dimensioni atomiche e il comportamento quantistico giochi un ruolo dominante.”

Richard Phillips Feynman

Nei primi anni ottanta, la miniaturizzazione sempre più spinta dei componenti elettronici costituiva la vera sfida nel campo della ricerca informatica. L'integrazione di moltissime porte logiche (*gates*) di base in piccoli elementi di silicio poneva però dei problemi, nuovi ed inevitabili: il comportamento di un elemento costituito, al limite, da pochi atomi è descritto dalle leggi della meccanica quantistica, presentando così effetti peculiari, ben lungi dal poter essere spiegati con modelli classici.

R. P. Feynman fu tra i primi fisici ad occuparsi della questione, dando le linee guida sul possibile utilizzo di sistemi quantistici come costituenti di un nuovo tipo di calcolatore; sottolineò, inoltre, come un calcolatore di questo tipo sarebbe allo stesso tempo un “simulatore” ideale per i sistemi quantistici. A partire dalle osservazioni sviluppate in quel periodo, si iniziò a costruire

una nuova teoria dell'informazione¹, che tenesse conto delle possibilità, ancora teoriche, offerte dal calcolatore quantistico. In particolare, una nuova classificazione della complessità computazionale si rese necessaria, grazie alle peculiarità ed ai vantaggi offerti dal nuovo paradigma computazionale.

Contributi fondamentali sono stati dati da Shannon, per quanto riguarda l'informazione quantistica, da Deutsch, relativamente alle possibilità ed ai vantaggi di un teorico calcolatore quantistico, e da molti altri. Per una trattazione approfondita dell'argomento si vedano le ottime "Lecture Notes" del corso tenuto da J.Preskill a Caltech [17].

Fin dai suoi inizi, la formalizzazione di una teoria dell'informazione è stata sempre legata alla crittografia: Turing e Shannon hanno lavorato nei dipartimenti di crittoanalisi dei rispettivi governi, Inglese e Americano, durante la seconda guerra mondiale. Anche alcune delle possibilità più entusiasmanti offerte dalle nuove idee sull'informazione e sulla computazione si applicano proprio in questo campo. La trasmissione di fotoni "entangled" permette, tramite tecniche sperimentali mature, di implementare semplici algoritmi di crittografia di segnali lungo canali quantistici non decrittabili; non solo: la realizzazione di un calcolatore quantistico permetterebbe di implementare l'algoritmo di fattorizzazione di Shor, ad oggi unica risposta con complessità polinomiale, rispetto alla dimensione dei numeri in gioco, al metodo RSA (Rivest-Shamir-Aldeman) di codifica di messaggi.

4.2 Il Quantum Bit

4.2.1 Definizione di quantum bit

L'informazione non può essere considerata separatamente dalla sua natura fisica: non si può, cioè, mantenere, modificare o trasmettere informazione senza un adeguato supporto fisico. Un'affermazione del genere, apparentemente ovvia, è la chiave di volta della nuova teoria dell'informazione. È suf-

¹Una teoria dell'informazione è una teoria matematica che descrive la trasmissione, l'immagazzinamento e l'elaborazione di dati.

ficiente utilizzare un sistema quantistico come “supporto” per l’informazione per dover cambiare radicalmente il modo di studiare tale informazione.

Senza addentrarci nella teoria dell’informazione quantistica (QIT), ci limiteremo a studiare le caratteristiche dei sistemi quantistici utilizzati per l’implementazione fisica dell’informazione. Nella teoria classica, il numero di “informazioni” diverse rappresentabili in un sistema ad N stati è N , in accordo con l’intuizione comune e con la fisica classica. In pratica viene utilizzato come modello fondamentale il *bit* (“binary-digit”, cifra binaria), che rappresenta un sistema a due stati, che chiameremo convenzionalmente 0 e 1. La scelta della rappresentazione binaria è dettata dalla semplicità e comodità di realizzazione nei sistemi elettronici. Il bit classico, quindi, mantiene correttamente l’informazione relativa ad una scelta esclusiva tra i due stati possibili in cui si può trovare.

Nella computazione quantistica, invece, si utilizza, come modello per i sistemi fisici di supporto per l’informazione, il *quantum bit* (bit quantistico), chiamato anche *qubit*². Definiamo come quantum bit *lo stato di un sistema quantistico a due stati*, descritto in uno spazio di Hilbert bidimensionale. Scegliamo, senza perdere in generalità rispetto al sistema considerato, di descrivere lo spazio tramite la scelta di una base ortonormale, $\{\psi_i\}$, e, identificando \mathcal{H} di dimensione 2 con \mathbb{C}^2 , useremo le notazioni:

$$\begin{aligned} |\psi_0\rangle = |0\rangle &\doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ |\psi_1\rangle = |1\rangle &\doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{4.1}$$

analoghe all’equivalente classico.

Il sistema così definito supera i limiti della computazione classica in virtù del principio di sovrapposizione: si ha, cioè, la possibilità di “lavorare” con il sistema in una sovrapposizione (combinazione lineare a coefficienti complessi) dei due stati di base. Questa situazione non ha analogo classico, e permette,

²In letteratura si utilizza, a volte, il termine *qubit*: questa dicitura fa generalmente riferimento a sistemi con più di due dimensioni.

in qualche modo, di operare contemporaneamente sui due stati di base; si amplia così la gamma delle operazioni realizzabili rispetto a quelle sviluppate nell'ambito della computazione classica.

Per poter fare qualche esempio che illustri meglio il concetto, si consideri la seguente matrice, che corrisponde alla trasformazione unitaria e idempotente di *Welsh-Hadamard*:

$$\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (4.2)$$

e vale $\hat{H}^\dagger = \hat{H}^{-1} = \hat{H}$. Applicata agli stati di base, otteniamo:

$$\begin{aligned} \hat{H}|0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) =: |\psi_+\rangle, \\ \hat{H}|1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) =: |\psi_-\rangle. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Abbiamo così ottenuto due semplici sovrapposizioni di stati, che saranno molto utili in seguito; si noti che $|\psi_+\rangle$ e $|\psi_-\rangle$ sono ortonormali.

4.2.2 Sistemi a due qubit

Passiamo ora a considerare un macrosistema comprendente due qubit, che chiameremo \mathcal{A} e \mathcal{B} . Gli stati del sistema sono descritti da vettori dello spazio di stato congiunto di $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ e $\mathcal{H}_{\mathcal{B}}$, che sarà uno spazio di Hilbert a quattro dimensioni, $\mathcal{H}_{\mathcal{AB}} = \mathcal{H}_{\mathcal{A}} \otimes \mathcal{H}_{\mathcal{B}}$. Vediamo come ottenere semplicemente delle sovrapposizioni di stati in $\mathcal{H}_{\mathcal{AB}}$:

sovrapposizione di stati senza entanglement Supponiamo che il sistema si trovi nello stato di $\mathcal{H}_{\mathcal{AB}}$:

$$|\psi_i\rangle = |00\rangle = (|0\rangle \otimes |0\rangle) \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

rappresentato nella base canonica di \mathcal{H}_{AB} (2.62); applicando la trasformazione di Hadamard (4.2) ad entrambi i qubit si ottiene:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle)_{\mathcal{A}}(|0\rangle + |1\rangle)_{\mathcal{B}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

sovrapposizione di stati in \mathcal{H}_{AB} .

sovrapposizione di stati con entanglement Consideriamo lo stesso stato iniziale $|\psi_i\rangle$; applichiamo la trasformazione di Welsh-Hadamard, questa volta soltanto al primo qubit:

$$|\psi_H\rangle = \hat{H}_{\mathcal{A}} \otimes \hat{I}_{\mathcal{B}} |\psi_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |0\rangle + |1\rangle \otimes |0\rangle) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Consideriamo ora la trasformazione CNOT, che riprenderemo in seguito (vedi §4.3.2):

$$U_{CNOT} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Se la applichiamo allo stato $|\psi_H\rangle$ abbiamo:

$$U_{CNOT}|\psi_H\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle),$$

stato di \mathcal{H}_{AB} non fattorizzabile, quindi entangled (si veda §2.6.2).

Ci siamo dilungati in alcuni esempi di preparazione dello stato in quanto è una delle fasi cruciali della computazione quantistica; in particolare la

preparazione di sovrapposizioni di stati sta alla base degli algoritmi di calcolo sviluppati esclusivamente per i calcolatori quantistici e dà loro un intrinseco vantaggio rispetto agli analoghi classici. Un esempio di questo tipo verrà dato più avanti. Intanto approfondiremo, con qualche esempio, la conoscenza delle operazioni fondamentali realizzabili con un calcolatore quantistico.

4.3 Porte logiche

4.3.1 Premesse

Una delle idee che permisero lo sviluppo del nuovo paradigma computazionale consiste nella scoperta, effettuata più di vent'anni fa (Charles Bennet, 1973), all'interno del paradigma della fisica classica, che la computazione poteva essere resa *reversibile*. In altre parole, è stata dimostrata la possibilità di realizzare una qualsiasi “computazione” in maniera reversibile sia *logicamente*, attraverso un'opportuna sequenza di trasformazioni biettive, sia *termodinamicamente*, cioè con un apparato fisico che dissipi arbitrariamente poca energia.

Tali trasformazioni reversibili risultano essere facilmente compatibili con l'evoluzione *unitaria* dei sistemi quantistici, permettendo così, almeno teoricamente ³, di pensare alle operazioni logiche su bit quantistici come ad opportune sequenze di evoluzioni temporali unitarie imposte al sistema.

Ma il calcolatore quantistico, come già sottolineato, non è solamente in grado di replicare efficacemente un calcolatore classico: la macchina di Turing quantistica introdotta da Deutsch simula il comportamento di sistemi quantistici più economicamente e risolve alcuni problemi in maniera più veloce di quella classica. Lo sviluppo di algoritmi efficienti è continuato, fino alla soluzione proposta da Peter Shor a due problemi che, fino ad allora e a tutt'oggi, non avevano avuto risposte “classiche” a complessità polinomiale: la fattorizzazione di numeri interi e il logaritmo discreto ([26]).

³Lavorando con sistemi quantistici reali l'unitarietà dell'evoluzione non viene mantenuta a causa dell'interazione incontrollabile con il macrosistema “ambiente”

Nel modello della computazione quantistica che stiamo introducendo, le operazioni elementari sui qubit sono effettuate da *porte logiche*, funzioni binarie sull'insieme di valori logici rappresentati dallo stato dei qubit considerati. A ciascuna porta logica corrisponde, nel modello quantistico, un'evoluzione unitaria dello stato che realizza la trasformazione richiesta.

Esamineremo ora delle porte logiche semplici, ma che, in virtù dei risultati concernenti l'universalità di alcune porte logiche, diventano fondamentali e sufficienti per la realizzazione di operazioni complesse.

4.3.2 Alcune porte logiche

Porta NOT È una porta logica che opera su di un singolo qubit, che corrisponde all'operazione classica di inversione dello stato (bit-flip), o negazione del valore logico da esso rappresentato. Classicamente rappresentata da:

$$U_{NOT,classica} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

viene implementata quantisticamente come:

$$U_{NOT} = -i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

a meno di un coefficiente di fase che rende il determinante uguale a uno. Si noti che può essere ottenuta facilmente, in termini di rotazioni di sistemi a spin $\frac{1}{2}$ lungo l'asse z , ottenibili con impulsi NMR, come $P_x(\pi) = e^{-i\pi\sigma_x}$, una rotazione di π attorno all'asse x ⁴.

Porta \sqrt{NOT} Introduciamo anche questa porta, di scarso interesse pratico, ma didatticamente interessante, in quanto non presenta analogo classico. Definiamo $U_{\sqrt{NOT}}$ come la trasformazione (unitaria) tale che:

$$U_{NOT} = U_{\sqrt{NOT}}U_{\sqrt{NOT}}.$$

⁴Si vedano le parti del lavoro relative alla risonanza magnetica (§5.2.2) per ulteriori spiegazioni.

Si può mostrare che tale requisito è soddisfatto da:

$$U_{\sqrt{NOT}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1+i) & \frac{1}{2}(1-i) \\ \frac{1}{2}(1-i) & \frac{1}{2}(1+i) \end{pmatrix}.$$

Porta CNOT (o XOR) Tale fondamentale porta logica agisce su due bit, invertendo il valore del secondo bit nel caso il primo valga “uno”, da cui il nome di *controlled NOT* (CNOT). Classicamente si utilizza:

$$U_{CNOT} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix};$$

Un analogo quantistico può essere ottenuto con una successione di trasformazioni unitarie semplici.

4.3.3 Porte logiche universali

Fredkin e Toffoli, basandosi sul formalismo sviluppato per una macchina di Turing reversibile, hanno dimostrato che esiste una “*porta universale*” a tre bit per la computazione reversibile. In altre parole, nel tentativo di riprodurre con poche operazioni semplici una qualunque operazione reversibile complessa, sono state sviluppate porte logiche *universali*, cioè tali che una opportuna applicazione in sequenza di tali porte approssimi in maniera arbitrariamente “buona” una qualunque trasformazione su un numero qualunque di bit.

In seguito, grazie alle nuove potenzialità offerte da un calcolatore quantistico, DiVincenzo ha mostrato l’esistenza di porte universali su due bit e molti altri hanno ampliato in seguito le possibilità di scelta. Per concludere, è stato dimostrato ([25]) che la costruzione di porte logiche quantistiche arbitrarie può essere possibile a partire dalla semplice porta CNOT (classica e non universale!), congiuntamente a porte quantistiche su di un solo bit ⁵.

⁵Le porte reversibili che applicano su un solo bit sono ottenibili come rotazioni nello spazio di stato: si veda l’appendice A

4.4 L'algoritmo di Deutsch

4.4.1 Il problema e la soluzione classica

Uno dei primi, fondamentali risultati a deporre a favore del calcolatore quantistico e delle sue potenzialità è stata la risposta di Deutsch ad un semplice problema formulato in ambito classico.

Supponiamo che f sia una funzione binaria di un singolo bit, cioè:

$$f : 0, 1 \longrightarrow 0, 1;$$

supponiamo anche di poter utilizzare f come una “scatola nera”, cioè di poter decidere il valore di ingresso e di poter leggere in qualche modo il valore d'uscita, ma di non sapere come funziona f dentro alla scatola.

Vogliamo scoprire se f è costante o meno. Le funzioni binarie di un bit (x) possono essere:

x	$f_{00}(x)$	$f_{01}(x)$	$f_{10}(x)$	$f_{11}(x)$
0	0	0	1	1
1	0	1	0	1

Diciamo che $f_{00}(x)$ e $f_{11}(x)$ sono funzioni *costanti* di $x \in 0, 1$, mentre diciamo che $f_{10}(x)$ e $f_{01}(x)$ sono *bilanciate*. In ambito classico, l'unico modo per decidere se f è costante o bilanciata è fare due tentativi: sottoporre a f il valore 0, leggere il risultato, poi sottoporre 1, leggere il risultato e avere così la soluzione. Non esiste maniera di rispondere eseguendo meno di due computazioni di f .

4.4.2 La soluzione quantistica

Deutsch ha mostrato, invece, come un potenziale computer quantistico può rispondere al quesito proposto computando f una sola volta. Per prima cosa, abbiamo già sottolineato come la computazione quantistica esegua soltanto

operazioni reversibili, cioè trasformazioni unitarie dello stato; non tutte le f sono reversibili, quindi passiamo a considerare la seguente:

$$U_f : |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle \mapsto |\alpha\rangle |\beta \oplus f(\alpha)\rangle, \quad (4.5)$$

con \oplus addizione binaria. È analoga ad f , ma mantiene nel primo qubit l'informazione relativa ad α .

La soluzione quantistica al quesito utilizza gli stati sovrapposti;

- inizialmente applichiamo la trasformazione di Hadamard \hat{H} ad entrambi i qubit, a partire dallo stato iniziale $|\psi_0\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle$, ottenendo⁶:

$$|\psi_H\rangle = \frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes (|0\rangle - |1\rangle) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

È come se avessimo operato un cambio di base, spostandoci nella base $\psi_{+,-}$ (Si vedano le equazioni 4.3).

- Applicando U_f come definita sopra, risulta che, a seconda della f

⁶D'ora in poi la rappresentazione matriciale di vettori di stato e operatori sarà effettuata rispetto alla "base canonica" $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$, mantenendo l'ordine.

incognita abbiamo:

$$|\psi_{U_f}\rangle = \begin{cases} U_{f_{00}}|\psi_H\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \\ U_{f_{01}}|\psi_H\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \\ U_{f_{10}}|\psi_H\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \\ U_{f_{11}}|\psi_H\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}; \end{cases} \quad (4.6)$$

- A questo punto basta applicare di nuovo le Hadamard, tornando sostanzial-

mente alla base di partenza:

$$|\psi_{fin}\rangle = \left\{ \begin{array}{l} (\hat{H}_\alpha \otimes \hat{H}_\beta)|\psi_{U_{f_{00}}}\rangle = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 \\ 4 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ (\hat{H}_\alpha \otimes \hat{H}_\beta)|\psi_{U_{f_{01}}}\rangle = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 4 \end{pmatrix}, \\ (\hat{H}_\alpha \otimes \hat{H}_\beta)|\psi_{U_{f_{10}}}\rangle = -\frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 \\ 4 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ (\hat{H}_\alpha \otimes \hat{H}_\beta)|\psi_{U_{f_{11}}}\rangle = -\frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 4 \end{pmatrix}; \end{array} \right. \quad (4.7)$$

si nota come lo stato finale risulta $|\psi_{fin}\rangle = |f(0) \oplus f(1)\rangle \otimes |1\rangle^7$: per f_{00} e f_{11} si ottiene lo stato di base $|0\rangle \otimes |1\rangle$, mentre per f_{10} e f_{01} si ottiene $|1\rangle \otimes |1\rangle$. Se ora immaginiamo di eseguire una misura sul primo qubit possiamo sapere se f è costante ($f(0) \oplus f(1) = 0$) oppure bilanciata ($f(0) \oplus f(1) = 1$) avendo eseguito f una sola volta; il vantaggio evidente offerto dal modello quantistico è la possibilità di far operare f sulla nuova base ortonormale, formata da due sovrapposizioni di stati ottenuti tramite le Hadamard.

4.4.3 L'algoritmo di fattorizzazione di Shor

Il principio di sovrapposizione, che permette in qualche modo a Deutsch di valutare f “contemporaneamente” per due stati diversi, è la chiave del

⁷ \oplus indica la somma binaria.

vantaggio di cui intrinsecamente godono gli algoritmi basati sui calcolatori quantistici. Su questo stesso principio si basa l'algoritmo di fattorizzazione di Shor, uno dei più interessanti risultati ottenuti in questo campo.

Un problema per cui non si hanno risposte in tempo polinomiale, basate su calcolatori classici, è quello di trovare i fattori primi di un numero intero; proprio su questo è stato sviluppato uno dei metodi di cifratura più diffusi, il Rivest-Shamir-Aldeman (RSA), che utilizza due numeri primi "grandi", e quindi difficili da trovare una volta moltiplicati tra loro, come chiavi di decrittazione di messaggi cifrati.

Peter Shor è, invece, riuscito a trovare un algoritmo "quantistico" che permette di giungere alla soluzione in un tempo polinomiale rispetto alla dimensione del numero da fattorizzare. Senza scendere in dettaglio, il procedimento consta dei seguenti passi:

- si parte con il registro di "ingresso" x nello stato $|00\dots 0\rangle$, poi si passa ad una sovrapposizione di tutti i possibili stati, applicando una trasformazione di Hadamard ad ogni qubit;
- viene valutata ora la funzione $f(x) = c^x(\text{mod}N)$, dove N è il numero da fattorizzare, c è una costante che non ha fattori primi in comune con N ; ricordiamo che x è una sovrapposizione di tutti i possibili stati del registro di ingresso, così in una sola applicazione di $f(x)$ otteniamo in y tutti gli esiti possibili, dopo averla *compilata* in termini di porte logiche semplici e realizzabili dal calcolatore quantistico.
- $f(x)$ ha un'importante proprietà: è periodica rispetto a x ; se N è un numero primo, il suo periodo è $N - 1$, altrimenti è più breve: da questo periodo si può arrivare con una procedura "classica" ad uno dei fattori primi di N . Applicando una versione adattata della trasformata di Fourier discreta ad x si può ricavare il periodo di $f(x)$ a meno di multipli, ma, anche in questo caso, ci sono degli algoritmi "classici" che permettono di ottenere con affidabilità la risposta cercata.

Il risultato, in realtà, si ottiene con una certa probabilità (l'algoritmo è

probabilistico, non esatto), ma il problema della fattorizzazione ha un'altra caratteristica: è molto semplice verificare se un numero è o meno uno dei fattori cercati. Per verificarlo, infatti, basta provare ad eseguire la divisione esplicitamente, il che “costa” poco dal punto di vista computazionale.

Il miglior algoritmo su di un computer “Booleano” non è polinomiale, e impiega un numero di passi computazionali che va come $e^{ak^{\frac{1}{3}}}$, dove k è la dimensione del numero da fattorizzare; il tempo impiegato dall'algoritmo di Shor va come k^3 per k piccoli, poi si assesta asintoticamente su k^2 . Non è stato dimostrato che non possa esistere un algoritmo polinomiale anche per un calcolatore tradizionale, ma dopo anni di sforzi si intuisce come l'algoritmo di Shor possa aver scosso la comunità scientifica che opera nel campo dell'informatica e aver suscitato un consistente interesse nei confronti del calcolatore quantistico.

4.5 Nuovi sviluppi e prospettive

Un risultato semplice, come quello ottenuto da Deutsch, porta con sé una serie di implicazioni tutt'altro che banali. La comparsa del nuovo paradigma computazionale basato sul calcolatore quantistico impone di rivedere le basi della teoria dell'informazione: l'ordine temporale in cui si può eseguire un'operazione non è indipendente dal sistema fisico utilizzato per poterla implementare. In particolare, il calcolatore quantistico offre possibilità nuove e più veloci per affrontare problemi in campi molto diversi: dalla crittografia (fattorizzazione di Shor) all'ordinamento e ricerca (algoritmo di Grover), si è cercato di dare risposte più efficienti rispetto a quelle sviluppate nel modello tradizionale. Lo stesso Shor sta cercando di dare una risposta a complessità polinomiale al problema del commesso viaggiatore.

4.5.1 La scelta del supporto fisico

Il primo aspetto da valutare nel tentativo di implementare fisicamente un calcolatore quantistico è la scelta del tipo di sistemi fisici da utilizzare come

supporto per i qubit.

I supporti fisici adatti:

- devono essere descritti da spazi di Hilbert bidimensionali;
- devono essere in grado di mantenere l'informazione un tempo sufficientemente lungo;
- devono poter interagire tra loro, in maniera da poter ottenere stati legati di più qubit.

Deve, inoltre, essere possibile interagire con essi in maniera controllata, per generare le trasformazioni volute.

Tra i candidati possibili, ricordiamo i seguenti:

Ion traps Indicata da Cirac e Zoller, questa possibile implementazione è perseguita da Wineland al NIST (National Institute for Standards and Technology). In questa realizzazione ogni qubit è rappresentato in un singolo ione mantenuto in una “trappola” di Paul lineare. Si scelgono come riferimento lo stato di equilibrio (*ground state*) e uno stato eccitato metastabile con vita media particolarmente lunga. Le interazioni sono guidate da un laser, regolato su particolari frequenze in maniera da ottenere assorbimenti ed emissioni controllate.

Uno dei limiti è la lentezza intrinseca del sistema, dovuto alla relazione di incertezza energia-tempo, che vincola la durata minima dell'impulso laser per ottenere l'effetto desiderato.

Cavità QED Un supporto alternativo, suggerito da Pellizzari, Gardiner, Cirac e Zoller, è oggetto di ricerca da parte del gruppo di Kimble a Caltech. Il sistema è costituito da atomi neutri in una cavità ottica e l'informazione può essere mantenuta nello stato degli atomi o nella polarizzazione dei fotoni all'interno della cavità, con gli atomi che realizzano l'accoppiamento tra un fotone e l'altro.

Sistemi NMR (Nuclear Magnetic Resonance) Proposto di recente come supporto per la computazione quantistica indipendentemente sia da Gershenfeld e Chuang che da Cory, Fahmy e Havel, lo spin nucleare di singoli atomi in molecole complesse è studiato e manipolato da decenni nell'ambito della chimica fisica. Grazie alle competenze preesistenti, tale metodo è rapidamente diventato il più promettente. In realtà, presenta alcuni problemi: si utilizzano campioni con moltissime molecole (10^{23}), quindi gli esiti delle computazioni effettuate risultano mediati sull'insieme, e necessita di temperature alte, aggiungendo “rumore” all'informazione. Alcune difficoltà sono comunque state superate, riuscendo a distribuire gli errori sull'insieme mantenendo soltanto l'informazione desiderata.

Probabilmente ci sarà bisogno di nuove idee e nuove tecnologie per poter arrivare ad un “processore quantistico”, ma la sperimentazione prosegue con successo: recentemente sono stati implementati alcuni qubit utilizzando sistemi NMR.

4.5.2 **Mantenere la coerenza dell'informazione quantistica**

I sistemi quantistici non sono mai perfettamente isolati, interagiscono con l'ambiente, gli apparati di controllo e tutto ciò che li circonda. Questo rende difficile trattare sistemi reali, in quanto lo stato del sistema è, potenzialmente, legato allo stato di un sistema molto grande, complesso, su cui non possiamo in generale fare previsioni e che non possiamo controllare. L'evoluzione del sottosistema di interesse perde le caratteristiche di unitarietà, se slegata dal sistema ambiente, e ha delle componenti impreviste: tale fenomeno, noto come *decoherence*, decoerenza, genera effetti indesiderati su ogni tentativo di guidare un sistema quantistico reale in maniera predeterminata.

È evidente, a questo punto, il delinearsi di fenomeni che chiameremo *errori*, cioè di esiti inattesi dell'evoluzione che possono intaccare la bontà

dell'informazione. Uno dei campi di maggior impegno della ricerca nel settore è proprio l'ottenimento, sperimentalmente e teoricamente, di procedure di mantenimento ed elaborazione dell'informazione quantistica che minimizzino l'effetto degli errori.

4.5.3 Gli algoritmi di correzione degli errori

Nonostante i grandi sforzi per ottenere strategie di controllo “decoherence-free”, si deve accettare la possibilità che siano intervenuti degli errori nella computazione.

Nell'ambito della computazione classica sono stati sviluppati molti modi efficaci di verificare la presenza di eventuali errori e correggerli. Ma molti di essi non si possono applicare agli algoritmi quantistici, in quanto presentano difficoltà aggiuntive:

- *errori di fase*, non previsti nei codici classici e distruttivi quando si opera con sovrapposizioni di stati;
- *piccoli errori*: l'informazione quantistica è continua, non limitata agli stati discreti 0 e 1, ma estesa a tutte le loro combinazioni lineari a coefficienti complessi. Errori piccoli sui coefficienti degli stati non sono previsti nella computazione tradizionale, che si preoccupa di correggere soltanto “bit-flips”.
- *la misura disturba lo stato*: diversamente dall'analogo tradizionale, un codice di correzione errori non può effettuare misure per rilevarne, in quanto, come richiamato in precedenza (§2.30), la misura modifica distruttivamente lo stato.
- *No cloning*: È impossibile copiare esattamente l'informazione quantistica, dunque tutti i metodi basati sulla ridondanza dell'informazione sono inutilizzabili.

Nonostante ciò, è stato costruito un complesso apparato teorico intorno al problema della correzione degli errori, includendoli in un modello com-

putazionale che utilizza gli operatori di densità piuttosto che gli stati e permette evoluzioni non unitarie. Recentemente è stato ottenuto un importante risultato sulla possibilità di correggere errori intervenuti in corso di una computazione: il *threshold theorem*, malamente tradotto in italiano “teorema della soglia”. Facendo riferimento ad una particolare tecnica iterativa per codificare e correggere l’informazione, tale teorema dà delle indicazioni quantitative sulla possibile riduzione della probabilità d’errore. Sotto certe condizioni limite (la *soglia*, appunto), anche partendo da componenti soggette ad errore, è possibile ottenere un calcolatore quantistico affidabile; non sembrano dunque esserci limitazioni fisiche alla sua realizzazione, ma rimane aperto il problema ingegneristico (si vedano, per informazioni più precise, [17], [1] e [15]).

Capitolo 5

Risonanza magnetica per sistemi a spin $\frac{1}{2}$

5.1 Sistemi di spin

Lo stato di una particella a spin $\frac{1}{2}$ è rappresentato da un vettore in uno spazio di Hilbert bidimensionale. Siano $|+_z\rangle$ e $|-_z\rangle$ gli autostati relativi all'operatore che rappresenta l'osservabile di spin lungo l'asse z , tali che:

$$\begin{aligned}S_z|+_z\rangle &= \frac{\hbar}{2}|+_z\rangle, \\S_z|-_z\rangle &= \frac{\hbar}{2}|-_z\rangle.\end{aligned}$$

In tale base:

$$\begin{cases} S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_3 \\ S_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_1 \\ S_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_2, \end{cases}$$

e denotiamo con $|\pm_u\rangle$ gli autostati di S_u relativo alla direzione

$$u = \begin{pmatrix} u_x \\ u_y \\ u_z \end{pmatrix};$$

scelta una direzione u nello spazio euclideo tridimensionale, individuata dai due parametri angolari *polare* θ ed *azimuthale* φ , si trova che l'operatore di

spin lungo u si può scrivere come:

$$S_u = S_x \sin \theta \cos \varphi + S_y \sin \theta \sin \varphi + S_z \cos \theta \quad (5.1)$$

$$\doteq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix}, \quad (5.2)$$

nella base $\{|\pm_z\rangle\}$.

Gli autostati corrispondenti si possono scrivere come:

$$|+_u\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} |+_z\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} |-_z\rangle \quad (5.3)$$

$$|-_u\rangle = -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} |+_z\rangle + \cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} |-_z\rangle, \quad (5.4)$$

Un qualunque stato dello spazio bidimensionale può essere scritto in tale forma per opportuni θ e φ in quanto gli altri parametri liberi nello spazio \mathbb{C}^2 sono legati alla normalizzazione del vettore e alla fase globale, non rilevanti per un sistema isolato. Come è naturale, deve essere $0 \leq \theta \leq \pi$ e $0 \leq \varphi \leq \pi$. È interessante osservare che nel passaggio da \mathbb{R}^3 a \mathbb{C}^2 compaiono dei fattori $\frac{1}{2}$ nella 5.3, che tengono conto del fatto che vettori opposti in \mathbb{R}^3 diventano ortogonali in \mathbb{C}^2 .

Nella rappresentazione tramite gli angoli polari ad azimuthali θ e φ , lo stato (spin) del sistema è associato ad un punto sulla sfera unitaria, individuato

dal versore $\vec{n} = \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix}$, chiamato vettore di Bloch. Le componenti di

tale vettore a norma unitaria sono identificate, fissati θ e ϕ , dalle seguenti relazioni:

$$n_x = \sin \theta \cos \varphi,$$

$$n_y = \sin \theta \sin \varphi,$$

$$n_z = \cos \theta;$$

da cui, viceversa, si trova che $\theta = \arcsin(\sqrt{n_x^2 + n_y^2})$ e $\varphi = \arctan \frac{n_y}{n_x}$. Allora, ricordando la 5.1 si può scrivere:

$$S_n = S_x \sin \theta \cos \varphi + S_y \sin \theta \sin \varphi + S_z \cos \theta = \sum_{k=x,y,z} S_k n_k = \vec{S} \cdot \vec{n}. \quad (5.5)$$

Osserviamo un'interessante proprietà di $\langle S_k \rangle$:

$$\begin{aligned}
 \langle S_z \rangle &= \frac{\hbar}{2} (\cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} \langle +_z | + \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} \langle -_z |) \sigma_3 (\cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} |+_z\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} |-_z\rangle) \\
 &= \frac{\hbar}{2} (\cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} \langle +_z | + \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} \langle -_z |) (\cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} |+_z\rangle - \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} |-_z\rangle) \\
 &= \frac{\hbar}{2} (\cos^2 \frac{\theta}{2} - \sin^2 \frac{\theta}{2}) \\
 &= \frac{\hbar}{2} \cos \theta,
 \end{aligned} \tag{5.6}$$

e, analogamente:

$$\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos \varphi, \tag{5.7}$$

$$\langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin \varphi. \tag{5.8}$$

Abbiamo così mostrato che, rappresentando lo stato come vettore di Bloch, tale vettore coincide con il vettore dei valori attesi per l'osservabile di spin, a meno di $\frac{\hbar}{2}$ ¹.

5.2 Dinamica di sistemi di spin $\frac{1}{2}$ in presenza di campi elettromagnetici

In questa sezione studieremo la dinamica dei sistemi di spin $\frac{1}{2}$ in presenza di campi elettromagnetici: prima considereremo soltanto un campo costante, indipendente dal tempo, poi aggiungeremo un campo oscillante sinusoidalmente, ortogonale al primo. Questa seconda situazione ci condurrà a studiare come si innesca e cosa comporta la *risonanza magnetica*. Questa elementare discussione illustra i principi teorici fondamentali alla base del fenomeno, ma concede spazio anche a due argomenti più avanzati: l'approssimazione RWA (rotating wave approximation), utilizzata in molti modelli di interesse, e le equazioni di Bloch per l'ottica; introduciamo soltanto queste ultime come esempio di modelli che comprendano stati misti e fattori di rilassamento e *decoherence*.

¹ $\vec{n} = \vec{\sigma}$, rappresentando gli operatori nella base $\{\pm_z\}$.

5.2.1 Campo elettromagnetico statico: precessione di spin

Essendo interessati al solo osservabile di spin, l'hamiltoniano di un sistema in presenza di un campo elettromagnetico dipende solo dal rapporto giromagnetico γ e dal campo \vec{B} :

$$H = -\gamma \vec{S} \cdot \vec{B} = -\gamma(S_x B_x + S_y B_y + S_z B_z). \quad (5.9)$$

Se scegliamo un sistema di riferimento con l'asse z parallelo al campo \vec{B} , otteniamo:

$$H = -\gamma S_z B_z = \omega_L S_z,$$

dove abbiamo definito *frequenza di Larmor* $\omega_L = -\gamma B_z$. In tal caso gli autostati energetici corrispondono a quelli di S_z , ma con autovalori diversi:

$$\begin{aligned} H|+_z\rangle &= E_+|+_z\rangle, & E_+ &= \frac{1}{2}\hbar\omega_L \\ H|-_z\rangle &= E_-|-_z\rangle, & E_- &= -\frac{1}{2}\hbar\omega_L. \end{aligned} \quad (5.10)$$

L'evoluzione temporale di un generico stato nella forma (si veda 5.3):

$$|\psi(t=0)\rangle = \cos\frac{\theta_0}{2}e^{-i\frac{\varphi_0}{2}}|+_z\rangle + \sin\frac{\theta_0}{2}e^{i\frac{\varphi_0}{2}}|-_z\rangle,$$

è descritta, in questa situazione, da:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \cos\frac{\theta_0}{2}e^{-i\frac{\varphi_0}{2}}e^{-i\frac{\omega_L}{2}t}|+_z\rangle + \sin\frac{\theta_0}{2}e^{i\frac{\varphi_0}{2}}e^{i\frac{\omega_L}{2}t}|-_z\rangle \\ &= \cos\frac{\theta_0}{2}e^{-i\frac{\varphi(t)}{2}}|+_z\rangle + \sin\frac{\theta_0}{2}e^{i\frac{\varphi(t)}{2}}|-_z\rangle, \end{aligned} \quad (5.11)$$

con $\varphi(t) = \varphi_0 + \omega_L t$. Allora il vettore di Bloch corrispondente allo stato (si veda l'appendice A) ha un moto di precessione intorno all'asse z , cioè intorno al campo applicato, con frequenza ω_L . Quest'effetto si indica come *precessione di Larmor*.

In forma più compatta tale precessione può essere descritta tramite il corrispondente operatore di evoluzione temporale:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{H_0}{\hbar}t}|\psi(0)\rangle = e^{-i\frac{\omega_L \sigma_z}{\hbar}t}|\psi(0)\rangle. \quad (5.12)$$

È importante osservare che se lo stato iniziale è $|+_z\rangle$ o $|-_z\rangle$ e vogliamo passare, rispettivamente, a $|-_z\rangle$ o $|+_z\rangle$, ottenendo quindi un'“inversione” dello stato, ciò non risulta possibile tramite l'applicazione di un campo costante B_1 (indipendente dal tempo) che agisca solo lungo le componenti x e y , se siamo in presenza di un campo parallelo all'asse z , B_z . Infatti abbiamo notato che la precessione si instaura intorno alla direzione del campo risultante: se vogliamo ottenere un'inversione dello stato a partire da uno stato descritto da un vettore di Bloch appartenente all'asse z , dovremo ottenere un campo risultante sul piano xy . Ma:

$$\vec{B} = B_z \vec{u}_z + B_{1,x} \vec{u}_x + B_{1,y} \vec{u}_y$$

non può risultare ortogonale a z , fino a quando è presente la componente B_z . Ecco perchè, nel fenomeno della risonanza magnetica, la componente costante del campo è detta anche *campo di mantenimento*.

5.2.2 Risonanza magnetica

Per avvicinarsi al fenomeno della risonanza magnetica, supponiamo sia mantenuto costante un campo di mantenimento $\vec{B}_0 = B_0 \vec{u}_z$ durante tutta l'evoluzione del sistema. Risulta conveniente (anche se non intuitivamente) lavorare in un riferimento rotante che elimini formalmente la precessione di Larmor. In termini di vettori di stato, consideriamo $|\psi'(t)\rangle = O_z |\psi(t)\rangle$, con $O_z = e^{i\frac{\omega_L}{2}\sigma_z t}$. È evidente che in questo sistema di riferimento, finchè $H = H_0 = \omega_L S_z$, $|\psi'(t)\rangle = |\psi'(0)\rangle$.

Vediamo come cambia l'equazione di Schrodinger in presenza di riferimento rotante con frequenza ω :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle = H O_z^{-1} k e \psi'(t),$$

ma vale anche:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (O_z^{-1} \psi'(t)) = i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} O_z^{-1} \psi'(t) + O_z^{-1} \frac{\partial}{\partial t} \psi'(t) \right).$$

Combinandole e applicando a entrambi i membri membri O_z (a sinistra) si ottiene:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi'(t)\rangle = \left(O_z H O_z^{-1} - i\hbar O_z \frac{\partial O_z^{-1}}{\partial t} \right) |\psi'(t)\rangle = H' |\psi'(t)\rangle;$$

essendo O_z unitario, vale $O_z^{-1} = O_z^\dagger$, quindi:

$$-i\hbar O_z \frac{\partial O_z^{-1}}{\partial t} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{-i\frac{\omega}{2}\sigma_z t} = -\frac{\hbar}{2} \omega \sigma_z.$$

Consideriamo ora un campo rotante nel piano xy con frequenza ω ed ampiezza B_1 :

$$B = B_1 (\cos(\omega t) \vec{u}_x + \sin(\omega t) \vec{u}_y);$$

Allora:

$$\begin{aligned} H_1 &= -\gamma B_1 (\cos(\omega t) \vec{u}_x + \sin(\omega t) \vec{u}_y) \vec{S} \\ &= -\gamma \frac{\hbar}{2} (\cos(\omega t) \sigma_x + \sin(\omega t) \sigma_y). \end{aligned}$$

5.2. DINAMICA DI SISTEMI DI SPIN $\frac{1}{2}$ IN PRESENZA DI CAMPI
ELETTROMAGNETICI

Risulta utile, a questo punto, definire gli operatori:

$$\sigma_+ = \frac{1}{2}(\sigma_x + i\sigma_y), \quad \sigma_- = \frac{1}{2}(\sigma_x - i\sigma_y); \quad (5.13)$$

l'Hamiltoniano risulta quindi:

$$H_1 = -\gamma B_1 \frac{\hbar}{2} (e^{-i\omega t} \sigma_+ + e^{i\omega t} \sigma_-)$$

Ora, date le seguenti proprietà di commutazione:

$$\begin{aligned} [\sigma_+, \sigma_z] &= \frac{1}{2}([\sigma_x, \sigma_z] + i[\sigma_y, \sigma_z]) \\ &= \frac{1}{2}(-2i\sigma_y - 2\sigma_x) \\ &= -2\sigma_+; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [\sigma_-, \sigma_+] &= \frac{1}{2}([\sigma_x, \sigma_z] - i[\sigma_y, \sigma_z]) \\ &= \frac{1}{2}(-2i\sigma_y - 2\sigma_x) \\ &= 2\sigma_-, \end{aligned}$$

e sfruttando il fatto che $[\sigma_z, O_z^{-1}] = 0$, possiamo scrivere:

$$\begin{aligned} H' &= O_z (H_0 + H_1) O_z^{-1} - \frac{\hbar}{2} \omega \sigma_z \\ &= O_z \left(\frac{\hbar \omega_L}{2} \sigma_z - \gamma B_1 \frac{\hbar}{2} (e^{-i\omega t} \sigma_+ + e^{i\omega t} \sigma_-) \right) O_z^{-1} - \frac{\hbar}{2} \omega \sigma_z \\ &= \frac{1}{2} \hbar \Delta \sigma_z - \gamma B_1 \frac{\hbar}{2} e^{i\omega t} \sigma_z (e^{i\omega t} \sigma_+ + e^{i\omega t} \sigma_-) e^{-i\omega t} \sigma_z \quad (5.14) \end{aligned}$$

con $\Delta = \omega_L - \omega$, che chiameremo *detuning*². Si può inoltre ricavare che:

$$\begin{aligned} \sigma_+ e^{-i\frac{\omega}{2}\sigma_z t} &= e^{i\frac{\omega}{2}t} \sigma_+ \\ \sigma_- e^{-i\frac{\omega}{2}\sigma_z t} &= e^{-i\frac{\omega}{2}t} \sigma_- \\ e^{i\frac{\omega}{2}\sigma_z t} \sigma_+ &= e^{i\frac{\omega}{2}t} \sigma_+ \\ e^{i\frac{\omega}{2}\sigma_z t} \sigma_- &= e^{i\frac{\omega}{2}t} \sigma_-. \end{aligned}$$

²Si può pensare come l'errore di modulazione del campo rotante rispetto alla frequenza di Larmor indotta dal campo di mantenimento; vedremo che è uno dei parametri critici nell'innescare l'effetto di risonanza.

Tali relazioni, applicate alla 5.14, permettono di arrivare a scrivere la seguente:

$$H' = \frac{1}{2}\hbar\Delta - \gamma B_1 \frac{\hbar}{2}(\sigma_+ - \sigma_-) = \frac{\hbar}{2}(\Delta\sigma_z - \gamma B_1\sigma_x) = -\gamma\vec{S} \cdot \vec{B}_{eff}, \quad (5.15)$$

con:

$$\vec{B}_{eff} = \left(B_0 + \frac{\omega}{\gamma} \right) \vec{u}_z + B_1 \vec{u}_x.$$

Si può allora facilmente osservare che se $\omega = \omega_L = -\gamma B_0$ la componente di \vec{B}_{eff} parallela all'asse z scompare; in generale basta che $\Delta \ll \omega_L$ perchè la forza del campo di mantenimento sia fortemente ridotta nel riferimento rotante.

Nel caso $\Delta = 0$, $|\psi'(t)\rangle$ risente di un campo statico $B_1 \vec{u}_x$, che induce una precessione di Larmor attorno all'asse x : se lo stato iniziale era $|\psi(0)\rangle = | -_z \rangle$, l'applicazione di un campo rotante con frequenza ω_L , in presenza di un campo di mantenimento B_0 , permette di indurre un trasferimento allo stato $|\psi(t)\rangle = |+_z\rangle$ per $t = \frac{2\pi}{|\gamma B_1|}$. Tale fenomeno è noto come *risonanza magnetica*.

È bene sottolineare due aspetti chiave:

- l'inversione di stato “perfetta” si verifica solo nel caso di risonanza esatta, cioè tale per cui \vec{B}_{eff} sia ortogonale a z , individuato dalla condizione $\omega = \omega_L$;
- fino a che la condizione $\omega = \omega_L$ è soddisfatta, il trasferimento di stato avviene anche per B_1 piccolo, se il campo rotante viene applicato per un tempo abbastanza lungo.

Diamo ora alcune definizioni di uso comune nella letteratura specifica. Si definisce *frequenza di Rabi* $\Omega = \gamma B_1$; definendo $\tilde{\Omega} = \sqrt{\Omega^2 + \Delta^2}$ e:

$$\vec{\Omega} = -(\Delta\vec{u}_z + \gamma B_1\vec{u}_x) = -(\Delta\vec{u}_z + \Omega\vec{u}_x) = \tilde{\Omega}\vec{u}_n$$

con $\vec{u}_n = -\left(\frac{\Delta}{\tilde{\Omega}}\vec{u}_z + \frac{\Omega}{\tilde{\Omega}}\vec{u}_x\right)$, si può scrivere:

$$H' = \vec{S} \cdot \vec{\Omega} = \frac{\hbar}{2}\tilde{\Omega}.$$

Si osservi anche che è possibile sostituire \vec{u}_x con un generico versore del piano xy , $\vec{u}_n = \vec{u}_x \cos\phi + \vec{u}_y \sin\phi$.

5.2. DINAMICA DI SISTEMI DI SPIN $\frac{1}{2}$ IN PRESENZA DI CAMPI
ELETTROMAGNETICI

Risolviamo esplicitamente l'equazione di Schrodinger nel riferimento rotante, utilizzando le definizioni appena date: sia $|\psi(0)\rangle = |-z\rangle$; scriviamo $H' = \frac{\hbar\tilde{\Omega}}{2}\sigma_n$, dove

$$\sigma_n = \vec{u}_n \cdot \vec{\sigma} = -\frac{\Delta}{\tilde{\Omega}}\sigma_z - \frac{\Omega}{\tilde{\Omega}}(\sigma_x \cos\phi + \sigma_y \sin\phi) = -\frac{\Delta}{\tilde{\Omega}}\sigma_z - \frac{\Omega}{\tilde{\Omega}}(e^{i\phi}\sigma_+ + e^{-i\phi}\sigma_-);$$

allora:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-\frac{iH'}{\hbar}t}|-z\rangle = e^{-i\frac{\tilde{\Omega}}{2}\sigma_n t}|-z\rangle \\ &= \left[\cos\left(\frac{\tilde{\Omega}t}{2}\right) I - i \sin\left(\frac{\tilde{\Omega}t}{2}\right) \sigma_n \right] |-z\rangle \\ &= \left[\cos\left(\frac{\tilde{\Omega}t}{2}\right) - i\frac{\Delta}{\tilde{\Omega}} \sin\left(\frac{\tilde{\Omega}t}{2}\right) \right] |-z\rangle + \left[ie^{i\phi} \frac{\Omega}{\tilde{\Omega}} \sin\left(\frac{\tilde{\Omega}t}{2}\right) \right] |+z\rangle. \end{aligned} \quad (5.16)$$

Dunque la probabilità di ottenere lo stato $|+z\rangle$ come esito dell'evoluzione è:

$$P_+(t) = |c_+(t)|^2 = \frac{\Omega^2}{\Omega^2 + \Delta^2} \sin^2\left(\frac{\tilde{\Omega}t}{2}\right); \quad (5.17)$$

tale funzione di probabilità, al variare del tempo, oscilla lentamente e fino a valere uno se la condizione di risonanza è verificata, velocemente e mantenendosi più bassa fuori risonanza. Infatti, nel caso di risonanza lo stato finale è nella forma:

$$|\psi(t)\rangle = \cos\frac{\Omega t}{2}|-z\rangle + e^{i\phi} \sin\frac{\Omega t}{2}|+z\rangle.$$

Se è verificata la condizione di risonanza, inoltre, si definiscono i “ Θ -pulse”, cioè gli “impulsi” di campo che generano sul sistema una rotazione dello stato di Θ^3 . Tale angolo è funzione soltanto della durata, diciamo T , dell'impulso, una volta fissata la frequenza di Rabi:

$$\Theta = \Omega T.$$

³Corrisponde, coerentemente a quanto sottolineato nell'appendice A, ad una rotazione di Θ sulla sfera di Bloch, mentre nello spazio di stato la rotazione corrispondente sarà di $\frac{\Theta}{2}$.

Dunque applicando un campo rotante alla frequenza di risonanza⁴ per un tempo opportuno si possono ottenere rotazioni arbitrarie dello spin. Impulsi di particolare interesse, cioè campi elettromagnetici che possiamo quindi interpretare come funzioni di controllo nulle al di fuori dell'intervallo temporale necessario ad ottenere la rotazione desiderata e “rotanti” all'interno, sono:

π -**pulse** l'abbiamo già visto, genera un trasferimento completo di popolazione;

$\frac{\pi}{2}$ -**pulse** genera una sovrapposizione di stati con fase dipendente dal campo oscillante ortogonale a z :

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-z\rangle + ie^{i\phi}|+z\rangle);$$

2π -**pulse** lascia inalterato lo stato, a meno di un fattore di fase -1 dovuto al passaggio tra $SO(3)$ e $SU(2)$.

5.2.3 Rotating wave approximation

Nella pratica sperimentale è difficile controllare un campo rotante in due dimensioni; è invece molto più semplice ottenere un campo oscillante sinusoidalmente lungo una sola direzione, diciamo x , che equivalga alla proiezione su di un asse di un campo rotante rotante nel piano.

Possiamo immaginare un campo di questo tipo, nella forma $B_x \cos(\omega t)\vec{u}_x$, come somma di due campi rotanti nel piano con la stessa frequenza, verso opposto e ampiezza dimezzata:

$$B_x \cos(\omega t)\vec{u}_x = \frac{B_x}{2}(\cos(\omega t)\vec{u}_x + \sin(\omega t)\vec{u}_y) + \frac{B_x}{2}(\cos(\omega t)\vec{u}_x - \sin(\omega t)\vec{u}_y); \quad (5.18)$$

il primo addendo si chiama anche termine *co-rotante* o risonante, mentre il secondo è detto *controrotante* o antirisonante.

⁴È possibile utilizzare anche un campo lungo una direzione fissata che varia sinusoidalmente la sua intensità, come si vedrà nel seguente §5.2.3.

La *rotating wave approximation*(RWA)⁵ consiste nel trascurare il termine controrotante: nel sistema di riferimento ad assi rotanti l'Hamiltoniano effettivo risulterebbe:

$$H' = \frac{\hbar\omega_L}{2}\sigma_z - \frac{\hbar}{2}(\gamma B_x)(\sigma_+ + \sigma_-)\cos\omega t;$$

tramite la RWA si passa a:

$$H' = \frac{\hbar\omega_L}{2}\sigma_z - \frac{\hbar}{2}\left(\frac{\gamma B_x}{2}\right)(\sigma_+e^{-i\omega t} + \sigma_-e^{i\omega t}).$$

In tal caso la frequenza di rabi effettiva diventa $\Omega = \gamma B_1 = \frac{\gamma B_x}{2}$; l'approssimazione è sensata se $|\Delta| \ll \omega_L$, quindi vicino alla risonanza, ed equivale, sostanzialmente, a mediare sul termine controrotante che varia con frequenza maggiore del termine risonante.

5.2.4 Equazioni di Bloch per l'ottica

Abbiamo introdotto tre diverse rappresentazioni dello stato fisico di un sistema quantistico: richiameremo ora, per ogni rappresentazione, le equazioni differenziali che descrivono il fenomeno della risonanza magnetica.

Vettore di stato, ampiezza di probabilità Lo stato è rappresentato come

$|\psi(t)\rangle = c_+(t)|+_z\rangle + c_-(t)|-_z\rangle$ e l'Hamiltoniano, nel sistema di riferimento rotante e con $\phi = 0$, è nella forma:

$$H' = -\frac{\hbar}{2}(\Delta\sigma_z + \Omega\sigma_x).$$

Allora, passando alla rappresentazione matriciale, otteniamo:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} c_+(t) \\ c_-(t) \end{pmatrix} = \frac{i\hbar}{2} \begin{pmatrix} \Delta & \Omega \\ \Omega & -\Delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_+(t) \\ c_-(t) \end{pmatrix};$$

in condizioni di risonanza è semplice ricavare:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}c_+(t) = i\frac{\Omega}{2}c_-(t) \\ \frac{\partial}{\partial t}c_-(t) = i\frac{\Omega}{2}c_+(t) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial^2}{\partial t^2}c_+(t) = -\frac{\Omega^2}{4}c_+(t) \\ \frac{\partial^2}{\partial t^2}c_-(t) = -\frac{\Omega^2}{4}c_-(t). \end{cases} \quad (5.19)$$

⁵Risulta difficile e meno efficace una traduzione in italiano; significa "approssimazione d'onda rotante".

Vettore di Bloch Abbiamo già visto (5.6) che il sistema può essere descritto da un vettore \vec{u} in \mathbb{R}^3 e che risulta:

$$\vec{n} = \langle \vec{\sigma} \rangle.$$

Allora l'effetto della risonanza nel riferimento rotante è una rotazione attorno a \vec{u}_n ; si ottengono le seguenti equazioni:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta & 0 \\ -\Delta & 0 & \Omega \\ 0 & -\Omega & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} n_x = \Delta n_y \\ \frac{\partial}{\partial t} n_y = -\Delta n_x + \Omega n_z \\ \frac{\partial}{\partial t} n_z = -\Omega n_y, \end{cases} \quad (5.20)$$

note come *equazioni di Bloch*.

Operatori di densità Non abbiamo ancora utilizzato gli operatori di densità per descrivere i sistemi di spin, ma l'utilizzo di stati misti è indispensabile, qualora si voglia introdurre nel modello un qualche tipo di *decoherence*.

Era già stata introdotta, in §2.5.3, la rappresentazione degli operatori di densità sulla sfera di Bloch: tale rappresentazione, che permetteva di scrivere:

$$\rho = \frac{1}{2} (I + \vec{v} \cdot \vec{\sigma}),$$

risulta consistente con quella appena introdotta per gli stati puri, facendo corrispondere i punti sulla superficie della sfera agli stati puri. Per tali operatori, l'equazione che descrive l'evoluzione temporale è della forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho], \quad (5.21)$$

chiamata anche *master equation*; nel caso in cui, una volta spostati nel sistema di riferimento rotante, si abbia $H = H'$ come quello definito in precedenza (5.14), dalla 5.21 si ritrovano le 5.20.

Introduciamo ora, nel modello con stati misti, i cosiddetti *termini di rilassamento*. Dall'osservazione fenomenologica si possono individuare due

diversi effetti di *decoherence* per un sistema reale soggetto a risonanza; a questi effetti corrispondono due distinte scale temporali di rilassamento, cioè di perdita di coerenza dello stato:

- T_1 , o tempo di rilassamento longitudinale; indica il tempo richiesto agli stati al livello energetico più alto per decadere al livello minimo. Dà ragione del decadimento esponenziale verso lo stato di equilibrio termico, comportandosi come un effetto dissipativo.
- T_2 , o tempo di rilassamento trasversale; tiene conto del *dephasing* e degli altri “errori” che intervengono a causa delle interazioni spontanee con un ambiente esterno, perturbando stocasticamente la fase della precessione di Larmor.

Riportiamo, senza ricavarle formalmente, le *equazioni di Bloch complete*, che includono i termini di rilassamento appena descritti:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} n_x = \Delta n_y - n_x \frac{1}{T_2} \\ \frac{\partial}{\partial t} n_y = -\Delta n_x + \Omega n_z - n_y \frac{1}{T_2} ; \\ \frac{\partial}{\partial t} n_z = -\Omega n_y - (n_z - n_z^0) \frac{1}{T_1} \end{cases} \quad (5.22)$$

n_z^0 indica la componente z del vettore di Bloch associato allo stato ad energia minima.

5.3 Il teorema di passaggio adiabatico

5.3.1 Un approccio intuitivo

Gli Hamiltoniani affrontati fin'ora erano tutti indipendenti dal tempo; passiamo ora a studiare l'evoluzione di un sistema guidato da un Hamiltoniano tempo variante, che soddisfi però le seguenti condizioni:

- l'Hamiltoniano è costante al di fuori dell'intervallo temporale $[t_0, t_1]$;
- H è una funzione continua del tempo;
- definiamo $T := t_1 - t_0$, $s := \frac{(t-t_0)}{T} \in [0, 1]$, $H(s) := H(t_0 + Ts)$ e analogamente, per l'operatore di evoluzione temporale, chiamiamo $\mathcal{U}_T(s) := \mathcal{U}(t, t_0)$; date tali definizioni, ci interessa studiare l'evoluzione al limite $T \rightarrow \infty$.

L'obiettivo è, quindi, trovare l'operatore di evoluzione temporale al termine dell'evoluzione, $\mathcal{U}_T(1)$. Supponiamo, per semplicità e coerentemente ai casi di interesse nel presente lavoro, che H abbia spettro discreto per ogni t e che, denominati $\{E_i(t)\}$ gli autovalori energetici, P_i sia il proiettore sull'autospazio relativo all' i -esimo autovalore.

Diamo ora una formulazione semplificata del *teorema adiabatico*, facendo delle ipotesi più restrittive di quanto necessario:

- i1)** E_i e P_i sono funzioni continue di s ;
- i2)** per $0 \leq s \leq 1$, vale $E_l(s) \neq E_k(s)$ per ogni $k \neq l$ (*no crossing condition*);
- i3)** le derivate $\frac{\partial P_j}{\partial s}$ $\frac{\partial^2 P_j}{\partial s^2}$ sono continue a tratti.

Se scriviamo $H(s) = \sum_j E_j(s)P_j(s)$, il “*teorema adiabatico*” afferma che:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \mathcal{U}_T(s)P_j(0) = P_j(s) \lim_{T \rightarrow \infty} \mathcal{U}_T(s), \quad \forall j. \quad (5.23)$$

Diamo ora una linea generale di dimostrazione che, senza pretese di essere formale, è utile a capire meglio quanto affermato dalla 5.23.

Consideriamo prima il caso banale in cui gli autospazi di H non dipendano dal tempo:

$$\forall j, \quad P_j(s) = P_j(0) = P_j;$$

si ricava allora:

$$\mathcal{U}_T(s) = \sum_j \left(e^{\frac{iT\rho_j(s)}{\hbar}} P_j \right),$$

con $\rho_j(s) = \int_0^s E_j(\sigma) d\sigma$ (si veda §2.4.1). In tal caso vale la 5.23 in quanto l'operatore di evoluzione temporale in quella forma commuta con la proiezione su uno degli autospazi energetici; in generale, invece, gli autostati "ruotano" nello spazio di Hilbert. Sarebbe comodo potersi sempre ricondurre al caso con i proiettori tempo invarianti: per avvicinarsi a questa situazione è utile passare dalla rappresentazione degli stati rispetto agli stati di base canonici ad una rappresentazione ad "assi rotanti". In pratica, ciò consiste nel passare ad una base dipendente dal tempo, attraverso un'opportuna trasformazione unitaria $A(s)$, tale che:

$$P_s = A(s)P_j(0)A^\dagger(s); \quad (5.24)$$

cerchiamo dunque A in maniera che:

- $A(0) = 1$;
- $i\hbar \frac{\partial A}{\partial s} = K(s)A(s)$, con $K(s)$ operatore Hermitiano appropriato.

Per soddisfare la 5.24 deve valere (condizione necessaria e sufficiente):

$$i\hbar \frac{\partial P_j(s)}{\partial s} = [K(s), P_j(s)]. \quad (5.25)$$

Tale condizione non determina però univocamente K , in quanto, prendendo un qualunque insieme di operatori hermitiani $\{F_j\}$, l'operatore:

$$K'(s) = K(s) + \sum_j P_j(s)F_j(s)P_j(s)$$

soddisfa ancora la 5.25 se K lo faceva. Una scelta sensata è prendere $K(s)$ tale che:

$$P_j(s)K(s)P_j(s) = 0, \quad \forall j.$$

In tal caso, dalla 5.25 si ottiene, applicando P_j a destra:

$$i\hbar \frac{\partial P_j(s)}{\partial s} = K(s)P_j(s) - P_j(s)K(s)P_j(s),$$

che, per la scelta fatta, conduce a:

$$K(s) = i\hbar \sum_j \left(\frac{\partial P_j(s)}{\partial s} \right) P_j(s). \quad (5.26)$$

Introduciamo la notazione per il nuovo sistema di coordinate, definendo:

$$\begin{aligned} H^A(s) &:= \sum_j E_j(s)P_j(0); \\ K^A(s) &:= A^\dagger(s)K(s)A(s); \\ \mathcal{U}^A(s) &:= A^\dagger(s)\mathcal{U}_T(s). \end{aligned}$$

Da $i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \mathcal{U}(s) = H(s)\mathcal{U}(s)$, si ricava ⁶:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \mathcal{U}^A(s) = (TH^A(s) - K^A(s)) \mathcal{U}^A(s); \quad (5.27)$$

⁶Si noti che:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (A(s)\mathcal{U}_T^A(s)) = i\hbar \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} A(s)\mathcal{U}_T^A(s) + A(s)\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}_T^A(s) \right),$$

in quanto $H(s)\mathcal{U}(s) = H(s)A(s)\mathcal{U}_T^A(s)$. Ricordando che abbiamo “costruito” $A(s)$ in modo che:

$$\frac{\partial}{\partial t} A(s) = K(s)A(s),$$

si ottiene:

$$i\hbar A(s) \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}_T^A(s) = TH(s)A(s)\mathcal{U}_T^A(s) - K(s)A(s)\mathcal{U}_T^A(s).$$

Da qui si conclude:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}_T^A(s) &= A^\dagger(s)H(s)A(s)\mathcal{U}_T^A(s) - A^\dagger(s)K(s)A(s)\mathcal{U}_T^A(s) \\ &= (TH_T^A(s) - K^A(s)) \mathcal{U}_T^A(s). \end{aligned}$$

se $K^A(s)$ fosse trascurabile, la trasformazione ci condurrebbe esattamente nel caso semplice trattato all'inizio. Scriviamo la 5.27 senza il termine in K :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \Phi_T(s) = (TH^A(s)) \Phi_T s; \quad (5.28)$$

in tal caso le soluzioni sono della forma:

$$\Phi_T(s) = \sum_j \left(e^{\frac{iT\rho_j(s)}{\hbar}} P_j(0) \right).$$

Osserviamo però che K^A e H^A sono indipendenti da T : se $T \rightarrow \infty$ è intuitivo e si può provare che il termine $TH^A(s)$ “domini” su K^A .

Allora:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \mathcal{U}_T(s) = A(s)\Phi(s),$$

da cui:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \mathcal{U}_T(s) P_j(0) = \lim_{T \rightarrow \infty} A(s) P_j(0) = \lim_{T \rightarrow \infty} A P_j(0) \Phi_T(s)$$

e, grazie al fatto che $P_j(0)$ e $\Phi(s)$ commutano in ogni istante:

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow \infty} A(s) P_j(0) A^\dagger(s) A(s) \Phi_T(s) &= A(s) P_j(0) A^\dagger(s) \lim_{T \rightarrow \infty} A(s) \Phi_T(s) \\ &= P_j(s) \lim_{T \rightarrow \infty} \mathcal{U}_T(s), \end{aligned}$$

che è la conclusione cercata (5.23). \square

Al di là dei passaggi formali, è interessante riflettere sul significato del risultato ottenuto: al *limite adiabatico* ($T \rightarrow \infty$), la probabilità che un sistema si trovi all'inizio dell'evoluzione (t_0) in uno degli autostati energetici dell'Hamiltoniano si conserva durante tutta l'evoluzione. Il limite adiabatico equivale a richiedere che gli autostati cambino *lentamente* nello spazio di Hilbert, in maniera da rendere trascurabile $K(s) = i\hbar \sum_j \left(\frac{\partial P_j(s)}{\partial s} \right) P_j(s)$. L'*approssimazione adiabatica* consiste nell'assumere $\mathcal{U}(t_0, t_1) \approx A(s)\Phi_T(s)$, per T “abbastanza” grande, o per variazioni degli autostati abbastanza lente. Una stima della probabilità d'errore, e quindi della bontà dell'approssimazione, si può dare per ogni autostato nella forma:

$$\eta_i < \left| \frac{\max_t \{ \frac{\partial}{\partial t} |\psi_{E_i}\rangle \}}{\min_j \{ \omega_{Bohr,ij} \}} \right|. \quad (5.29)$$

5.3.2 Le strategie utilizzate

Il teorema adiabatico permette di mettere a punto delle strategie per guidare lo stato di un sistema di spin alternative alla risonanza magnetica. Il punto di partenza è sempre l'Hamiltoniano utilizzato nella descrizione della risonanza magnetica, nella RWA, questa volta nella forma dipendente dal tempo:

$$H(t) = \frac{i\hbar}{2} \begin{pmatrix} \Delta(t) & \Omega(t) \\ \Omega(t) & -\Delta(t) \end{pmatrix}.$$

Si passa quindi al sistema di riferimento dipendente dal tempo definito nella dimostrazione del teorema adiabatico, che corrisponde a riferire la rappresentazione dello stato agli autovettori istantanei di $H(t)$, i cosiddetti *stati adiabatici*:

$$\begin{aligned} |\phi_+(t)\rangle &= |+_z\rangle \sin \theta(t) + |-_z\rangle \cos \theta(t) \\ |\phi_-(t)\rangle &= |+_z\rangle \cos \theta(t) - |-_z\rangle \sin \theta(t), \end{aligned} \quad (5.30)$$

con $\theta(t) = \frac{1}{2} \arctan \left(\frac{\Omega(t)}{\Delta(t)} \right)$. Gli autovalori corrispondenti sono:

$$E_{\pm}(t) = \hbar \varepsilon_{\pm}(t) = \frac{1}{2} \hbar \left[\Delta(t) \pm \sqrt{\Delta^2(t) + \Omega^2(t)} \right]. \quad (5.31)$$

Quando l'evoluzione può essere approssimata da quella adiabatica, *la probabilità di transizione tra gli stati adiabatici è trascurabile*. L'approssimazione per questo sistema diventa plausibile, in conseguenza della condizione 5.29, se: :

$$|\langle \dot{\phi}_+(t) | \phi_-(t) \rangle| \ll |\varepsilon_+ - \varepsilon_-|,$$

o, esplicitamente:

$$\frac{1}{2} |\dot{\Omega}\Delta - \Omega\dot{\Delta}| \ll \left((\Omega^2 + \Delta^2)^{\frac{3}{2}} \right).$$

Si richiede quindi un impulso sufficientemente "liscio", tempi di interazione lunghi e Ω o Δ grandi. Se tali condizioni sono soddisfatte, lo stato si mantiene nello stato adiabatico di partenza ed evolve con esso, in funzione di $\theta(t)$.

Esaminiamo ora due situazioni rappresentative del possibile comportamento dei sistemi in relazione al modo in cui variano nel tempo $\Omega(t)$ e $\Delta(t)$.

Caso “no-crossing” Supponiamo di mantenere il *detuning* $\Delta(t) = \Delta_0$, costante. In tal caso, supponendo che $\Omega(t)$ vari in maniera continua, e che, per t che tende a t_0 o t_1 , $\Omega(t) \rightarrow 0$. Allora, durante la sua azione, $\Omega(t)$ allontana i livelli energetici dei due autostati adiabatici, fino a farli ritornare all’energia iniziale per t che tende a t_1 (basta ricordare l’espressione degli autovalori energetici 5.31). Il teorema adiabatico afferma che, alla fine dell’evoluzione, il sistema si ritroverà nello stato di partenza.

Caso “crossing-level” Supponiamo invece che $\Delta(t)$ parta da un valore negativo e lentamente evolva fino ad un valore positivo, entrambi grandi in valore assoluto rispetto a Ω , che supporremo costante. In questo caso, durante l’evoluzione, la differenza tra le energie degli stati adiabatici esibisce un minimo per $\Delta(t) = 0$ ⁷.

In corrispondenza di quel minimo, per gli autostati nella base “*diabatica*”, $\{|\pm_z\rangle\}$, si verifica un *energy-crossing*, cioè gli autostati hanno in quel punto gli stessi autovalori energetici e successivamente si scambiano: lo stato che fino a quel momento aveva energia minore passa, con continuità, ad un livello energetico superiore all’altro. Per le ipotesi fatte, si ha che:

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \frac{\Delta(t)}{\Omega(t)} = \pm\infty,$$

facendo evolvere $\theta(t)$ da $\frac{\pi}{2}$ a 0, in senso orario. Allora asintoticamente si hanno le seguenti evoluzioni:

$$\begin{aligned} |+_z\rangle &\longrightarrow |\phi_+(t)\rangle \longrightarrow |-_z\rangle \\ -|-_z\rangle &\longrightarrow |\phi_-(t)\rangle \longrightarrow |+_z\rangle; \end{aligned}$$

si ha così un’inversione dello stato iniziale, a meno di un fattore di fase.

Questo tipo di transizione è nota come *adiabatic passage*; già a questo livello si intuisce che è meno sensibile ad errori sulla valutazione dell’esatta

⁷Se $\Omega(t)$, invece che essere costante, fosse descritta da un’“impulso” centrato in t_0 (massimo in t_0 , crescente prima, decrescente dopo) i minimi sarebbero due, uno prima e uno dopo t_0 .

frequenza di risonanza rispetto al Rabi-cycling visto in precedenza, in quanto variando il detuning si riesce a “spazzare” un ampio spettro di frequenze. Altre metodologie più complesse sono state studiate utilizzando più fotoni a frequenze diverse, inducendo con alcuni di questi variazioni sui livelli energetici e ovviando così alla difficoltà nell’ottenere modulazioni della frequenza dei fotoni sull’ordine dei nanosecondi (si vedano, ad esempio, [31],[33] e [34]).

Appendice A

Note sulla rappresentazione di rotazioni

Nella descrizione di sistemi di spin è importante avere alcune nozioni di base riguardo la teoria del momento angolare, di cui richiameremo alcune idee di base in questa breve appendice. Inoltre, le rotazioni di Eulero sono fondamentali nella costruzione di porte universali a partire da porte logiche semplici, su uno o due qubit, mentre i gruppi $SU(2)$ e $SO(3)$ e il loro isomorfismo locale sono gli insiemi naturali per porre un problema di controllo ottimo del propagatore (si veda §3.1.2).

A.1 Rotazioni nello spazio di stato

Nello spazio euclideo tridimensionale (\mathbb{R}^3), le rotazioni sono descritte da matrici ortogonali 3×3 . Ad esempio, una rotazione di ϕ attorno all'asse z ha la forma:

$$R_z(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.1})$$

In generale, rotazioni intorno ad assi diversi non commutano, mentre commutano rotazioni intorno allo stesso asse. Prendiamo in considerazione una rotazione infinitesima $R_z(\varepsilon)$ attorno all'asse z , che risulta, espandendo in

serie la A.1 e trascurando i termini in ε di ordine superiore al secondo :

$$R_z(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad (\text{A.2})$$

se scriviamo l'espressione analoga per le rotazioni infinitesime intorno agli altri due assi, si può vedere che $R_x(\varepsilon), R_y(\varepsilon)$ e $R_z(\varepsilon)$ non commutano se si considerano i termini del secondo ordine, ma commutano se consideriamo solo quelli relativi al prim'ordine. Ignorando i termini di ordine superiore a ε^2 si trova la seguente regola di commutazione:

$$R_x(\varepsilon)R_y(\varepsilon) - R_y(\varepsilon)R_x(\varepsilon) = R_z(\varepsilon^2) - I. \quad (\text{A.3})$$

Nella meccanica classica le proprietà di sistema fisico non sono, in generale, invarianti rispetto a rotazioni nello spazio euclideo. Cerchiamo una descrizione delle rotazioni nel formalismo della meccanica quantistica: data una rotazione R vogliamo associare un operatore nello spazio di stato tale che:

$$|\alpha\rangle_R = \mathcal{D}(R)|\alpha\rangle,$$

indicando con $|\alpha\rangle$ e $|\alpha\rangle_R$ lo stato del sistema rispettivamente prima e dopo la rotazione¹.

Analogamente a quanto fatto per l'evoluzione temporale, consideriamo una rotazione infinitesima di $d\phi$ intorno ad un asse arbitrario in \mathbb{R}^3 , identificato dal versore (vettore a norma unitaria) \vec{n} . Abbiamo già osservato che, scegliendo $\mathcal{D}(\vec{n}, d\phi) := \mathcal{D}(R_{\vec{n}}(d\phi))$ nella forma:

$$\mathcal{D}(\vec{n}, d\phi) = I - i \left(\frac{\vec{J} \cdot \vec{n}}{\hbar} \right) d\phi, \quad (\text{A.4})$$

con $\vec{J}\vec{n} = \sum_{k=x,y,z} J_k \cdot n_k$, l'operatore di rotazione risulta unitario e tende all'identità per $d\phi$ che tende a zero se ogni J_k è un'operatore hermitiano. Definiamo *operatore del momento angolare* l'operatore J_k per cui $\mathcal{D}(\vec{n}, d\phi)$,

¹La dimensione di $\mathcal{D}(R)$ dipende dalla dimensione dello spazio di stato.

definito come nella A.4, rappresenta l'operatore di rotazione infinitesima attorno all'asse k . Richiediamo che $\mathcal{D}(R)$ abbia le stesse proprietà di gruppo di R , cioè che:

- l'identità sia l'elemento neutro:

$$\mathcal{D}(R)I = \mathcal{D}(R);$$

- l'insieme delle $\mathcal{D}(R)$ sia chiuso rispetto alla composizione:

$$\mathcal{D}(R_1)\mathcal{D}(R_2) = \mathcal{D}(R_3),$$

dove $R_1R_2 = R_3$;

- esista l'inversa:

$$\mathcal{D}^{-1}(R)\mathcal{D}(R) = I;$$

- valga la proprietà associativa per la composizione:

$$\mathcal{D}(R_1) [\mathcal{D}(R_2)\mathcal{D}(R_3)] = [\mathcal{D}(R_1)\mathcal{D}(R_2)] \mathcal{D}(R_3) = \mathcal{D}(R_1)\mathcal{D}(R_2)\mathcal{D}(R_3).$$

Torniamo ora alla relazione A.3: per gli operatori di rotazione, svolgendo i calcoli, si ottiene:

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z,$$

. Ripetendo il procedimento per gli altri assi, si può generalizzare a:

$$[J_i, J_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} J_k.$$

Per i sistemi a spin $\frac{1}{2}$, descritti quindi da uno spazio di Hilbert bidimensionale, tale relazione di commutazione è soddisfatta dagli operatori S_k :

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle-| + |- \rangle\langle+|); \\ S_y &= \frac{i\hbar}{2}(-|+\rangle\langle-| + |- \rangle\langle+|); \\ S_z &= \frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle-| - |- \rangle\langle+|), \end{aligned}$$

dove $|+\rangle, |- \rangle$ indicano gli stati di base ortogonali a spin "up" e "down" rispetto ad una definita direzione. Allora una rotazione di ϕ attorno all'asse z , ad esempio, si ottiene tramite l'operatore:

$$\mathcal{D}(z, \phi) = e^{-\frac{iS_z\phi}{\hbar}}.$$

A.2 Il formalismo di Pauli

Operazioni sugli stati di sistemi a spin $\frac{1}{2}$ possono essere descritte convenientemente nel formalismo degli *spinori* di Pauli. Associando ai vettori di base $|+\rangle \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $|-\rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, otteniamo una rappresentazione in \mathbb{C}^2 per cui un qualunque stato $|\alpha\rangle$, viene espresso come:

$$|\alpha\rangle \doteq \begin{pmatrix} \langle +|\alpha\rangle \\ \langle -|\alpha\rangle \end{pmatrix}.$$

Un vettore di stato in tale forma è anche detto *spinoro* a due componenti.

In questa rappresentazione gli operatori S_i , con $i = x, y, z$, corrispondono alle *matrici di Pauli*, moltiplicate per $\frac{\hbar}{2}$:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.5})$$

$$\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

$$\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.7})$$

Per tali matrici valgono le seguenti proprietà:

- $\sigma_i^2 = I$;
- $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}$, $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$;
- $\sigma_i^\dagger = \sigma_i$;
- $\det(\sigma_i) = -1$;
- $\text{Tr}(\sigma_i) = 0$.

In tale formalismo gli operatori di rotazione sono nella forma:

$$\mathcal{D}(\vec{n}, \phi) = e^{-\frac{i\vec{S}\cdot\vec{n}\phi}{\hbar}} \doteq e^{-\frac{i\vec{\sigma}\cdot\vec{n}\phi}{2}},$$

dove $\vec{\sigma} \cdot \vec{n} = \sum_{k=1,2,3} \sigma_k n_k = \begin{pmatrix} n_3 & n_1 - in_2 \\ n_1 + in_2 & -n_3 \end{pmatrix}$, e $n_1 = n_x, n_2 = n_y, n_3 = n_z$.

Inoltre, espandendo in serie e trascurando i termini di ordine superiore si ottiene:

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i\vec{\sigma} \cdot \vec{n} \phi}{2}} &\simeq I \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) - i\vec{\sigma} \cdot \vec{n} \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \\ &= \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) - in_z \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & (-in_x - n_y) \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \\ (-in_x + n_y) \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) + in_x \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \end{pmatrix}, \quad (\text{A.8}) \end{aligned}$$

osservando che:

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{n})^n = \begin{cases} I, & \text{se } n \text{ pari,} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{n}, & \text{se } n \text{ dispari.} \end{cases}$$

A.3 SU(2) ed SO(3)

Per caratterizzare una rotazione servono tre parametri reali: l'angolo polare e l'angolo azimuthale di \vec{n} , l'asse di rotazione, e l'angolo di rotazione ϕ . Potrebbe sembrare naturale rappresentare le rotazioni come vettori in \mathbb{R}^3 , in cui la direzione ed il verso sono indicati da \vec{n} stesso e l'intensità è data da ϕ , ma la combinazione di siffatti vettori non avrebbe alcun senso.

Si preferisce allora la rappresentazione delle rotazioni come matrici ortogonali. Una matrice 3×3 ha nove parametri, ma la condizione di ortogonalità $R^\dagger R = I$ restringe a 3 i parametri liberi, rendendola adatte allo scopo.

Le matrici ortogonali con l'operazione *prodotto* formano un gruppo, denominato SO(3):

- Il prodotto di due matrici appartenenti ad SO(3) è ancora in SO(3):

$$(R_1 R_2)(R_1 R_2)^\dagger = R_1 R_2 R_2^\dagger R_1^\dagger = I;$$

- il prodotto è associativo;
- la matrice identica corrisponde ad una rotazione nulla, ed è l'elemento neutro del prodotto;

- R^{-1} , tale che $R^{-1}R = I$ è ancora membro di $SO(3)$ e corrisponde alla rotazione in senso opposto attorno allo stesso asse.

Abbiamo d'altronde visto come caratterizzare una rotazione in \mathbb{C}^2 come una matrice 2×2 , unitaria e unimodulare (determinante uguale ad uno). Le matrici unimodulari si possono rappresentare nella forma:

$$U(a, b) = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix},$$

con $a, b \in \mathbb{C}$ e $|a|^2 + |b|^2 = 1$. I parametri a e b sono noti come parametri di Cayley-Klein; tali matrici, dotate del prodotto definito da:

$$U(a_1, b_1)U(a_2, b_2) = U(a_1a_2 - b_1b_2^*, a_1b_2 + a_2^*b_1^*), \quad (\text{A.9})$$

formano un gruppo, denominato $SU(2)$.

La corrispondenza tra $SO(3)$ e $SU(2)$ è solo localmente isomorfa, in quanto ad $U(a, b)$ e $U(-a, -b)$ corrispondono la stessa matrice in $SO(3)$. Per passare da una rappresentazione all'altra si possono utilizzare le seguenti relazioni, riferite ad una matrice in $SU(2)$ nella forma di Cayley-Klein in $SO(3)$ nella forma della A.8:

$$\begin{aligned} \text{Re}(a) &= \cos\left(\frac{\phi}{2}\right), \\ \text{Im}(a) &= -n_z \sin\left(\frac{\phi}{2}\right), \\ \text{Re}(b) &= -n_y \sin\left(\frac{\phi}{2}\right), \\ \text{Im}(b) &= -n_x \sin\left(\frac{\phi}{2}\right). \end{aligned}$$

A.4 Rotazioni di Eulero

Nell'ambito della meccanica classica è stato mostrato che una rotazione arbitraria (di un corpo rigido) può essere ottenuta come composizione di tre rotazioni semplici, detti rotazioni di Eulero, specificate da tre angoli α, β, γ ,

noti appunto come *angoli di Eulero*. Normalmente si usa scomporre una qualunque rotazione come:

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_{z'}(\gamma)R_{y'}(\beta)R_z(\alpha), \quad (\text{A.10})$$

con y' e z' gli assi y e z , solidali con il corpo rigido, dopo la prima rotazione. Quest'approccio è però sconveniente, avendo già sviluppato espressioni semplici per gli operatori di rotazione rispetto ad assi solidali allo spazio. Fortunatamente, si possono riscrivere:

$$R_{y'}(\beta) = R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z^{-1}(\alpha)$$

e

$$R_{z'}(\gamma) = R_{y'}(\beta)R_z(\gamma)R_{y'}^{-1}(\beta);$$

allora l'espressione di $R(\alpha, \beta, \gamma)$ si può trasformare come segue:

$$\begin{aligned} R(\alpha, \beta, \gamma) &= R_{y'}(\beta)R_z(\gamma)R_{y'}^{-1}(\beta)R_{y'}(\beta)R_z(\alpha) \\ &= R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z^{-1}(\alpha)R_z(\gamma)R_z(\alpha) \\ &= R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma) \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Dunque, ogni operatore di rotazione può essere scritto come:

$$\mathcal{D}(\alpha, \beta, \gamma) = \mathcal{D}(z, \alpha)\mathcal{D}(y, \beta)\mathcal{D}(z, \gamma),$$

e si può ottenere la seguente espressione generale come matrice 2×2 :

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\alpha, \beta, \gamma) &= e^{-\frac{i\sigma_3\alpha}{2}} e^{-\frac{i\sigma_2\beta}{2}} e^{-\frac{i\sigma_3\gamma}{2}} \\ &= \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\alpha}{2}} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i\alpha}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\frac{\beta}{2}) & -\sin(\frac{\beta}{2}) \\ \sin(\frac{\beta}{2}) & \cos(\frac{\beta}{2}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\gamma}{2}} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i\gamma}{2}} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} e^{-\frac{i(\gamma+\alpha)}{2}} \cos(\frac{\beta}{2}) & -e^{-\frac{i(\gamma-\alpha)}{2}} \sin(\frac{\beta}{2}) \\ e^{-\frac{i(\gamma-\alpha)}{2}} \sin(\frac{\beta}{2}) & e^{\frac{i(\gamma+\alpha)}{2}} \cos(\frac{\beta}{2}) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Bibliografia

- [1] D. Aharonov and M. Ben-Or. Fault-tolerant quantum computation with constant error rate. *e-print: arXiv:quant-ph/9906129 v1*, 1999.
- [2] D. Aharonov, A. Kitaev, and N. Nisan. Quantum circuits with mixed states. *e-print: arXiv:quant-ph/9806029v1*, 1998.
- [3] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloe. *Quantum Mechanics*. Wiley & Sons, 1977.
- [4] D.G. Cory, T.F. Havel, and alt. Nmr based quantum information processing: achievements and prospects. *Fortschr.Phys.*, 48:875–907.
- [5] D. D’Alessandro. Topological properties of reachable sets and the control of quantum bits. *Systems & control letters*, 41:213–221, 2000.
- [6] D. D’Alessandro and F. Albertini. Notions of controllability for quantum mechanical systems. *e-print: arXiv:quantum-ph/0106128 v1*, 2001.
- [7] D. D’Alessandro and M. Dahleh. Optimal control of two level quantum system. *IEEE Transaction on Automatic Control*, 46(6):866–876, 2001.
- [8] D. D’Alessandro and V. Dobrovitski. Control of a two level open quantum system. Available at D. D’Alessandro Home Page.
- [9] D. P. DiVincenzo. Quantum computation. *Science*, 270:255–261, October 1995.
- [10] J. C. Doyle, A. B. Francis, and A. R. Tannenbaum. *Feedback Control Theory*. Macmillan Publishing Company, 1992.

- [11] E. Fornasini and G. Marchesini. *Appunti di teoria dei sistemi*. Libreria Progetto, 1994.
- [12] L.P.Yatsenko, S. Guerin, and H.R. Jauslin. Optimization of population transfer by adiabatic passage. *Physical Review A*, 63:031403–1,4, 2001.
- [13] M. Mehring and V. A. Weberrun. *Object-oriented magnetic resonance*, chapter 14. Academic press, 2001.
- [14] E. Onofri and C. Destri. *Istituzioni di Fisica Teorica*. La Nuova Italia Scientifica, 1996.
- [15] M. Oskin, F.T. Chong, and I.L. Chuang. A practical architecture for reliable quantum computers. *IEEE press*, pages 79–87.
- [16] M. Pavon and S. Pinzoni. *Lezioni di Controlli Automatici*. Libreria Progetto, second edition, 1995.
- [17] J. Preskill. Quantum information lecture notes. Available at: www.theory.caltech.edu/~preskill/ph229.
- [18] G. Raccanelli. Controllo di sistemi di spin. Tesi di Laurea, 2001. Università di Padova, Facoltà di ingegneria.
- [19] W. Rudin. *Functional Analysis*. Mc. Graw-Hill, 1973.
- [20] W. Rudin. *Analisi Reale e Complessa*. Boringhieri, 1978.
- [21] W. Rudin. *Principi di analisi matematica*. McGrawHill, second edition, 1996.
- [22] J.J. Sakurai. *Modern quantum Mechanics*. Addison-Wesley, revised edition, 1994.
- [23] G. Sartori. *Lezioni di Meccanica Quantistica*. libreria Cortina, 1998.
- [24] B. Schumacher. Sending entanglement through noisy quantum channels. *e-print: arXiv:quant-ph/9604023v1*, 1996.

- [25] P. Shor, A. Barenco, D. DiVincenzo, C.H. Bennet, and al. Elementary gates for quantum computation. *e-print: arXiv:quant-ph/9503016v1*, 1995.
- [26] P. W. Shor. Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer. *Proceedings of the 35th Annual Symposium on Foundation of Computer Science*, pages 124–134, 1994.
- [27] S. Thomas, S. Guerin, and H.R. Jauslin. Optimization of population transfer by adiabatic passage. *Physical Review A*, 65:023409–1,5, 2002.
- [28] L. Viola. Quantum control via encoded dynamical decoupling. *Physical Review A*, (66), July 2002.
- [29] L. Viola and E. Knill. Robust dynamical decoupling with bounded controls. *submitted to print*, 2002.
- [30] L. Viola, E. Knill, and S. Lloyd. Dynamical decoupling of open quantum system. *Physical Review Letters*, 82(12):2417–2421.
- [31] N.V. Vitanov, T. Halfmann, B.W. Shore, and K. Bergmann. Laser-induced population transfer by adiabatic passage techniques. *Annu.Rev.Phys.Chem.*, 52:763–809, 2001.
- [32] N.V. Vitanov and K.A. Suominem. Nonlinear level crossing models. *e-print: arXiv:quant-ph/9811065 v1*, 1998.
- [33] L.P. Yatsenko, S. Guerin, and H.R. Jauslin. On the topology of adiabatic passage. *e-print: arXiv:quant-ph/0107065 v1*, 2001.
- [34] L.P. Yatsenko, S. Guerin, R. Unayan, and H.R. Jauslin. Adiabatic creation of entangled states by a bichromatic field designed from the topology of the dressed eigenenergies. *e-print: arXiv:quant-ph/0203026 v1*, 2002.