

Kvanttihyppymenetelmän käyttö spin-kubittien tilamanipulaatioiden tarkkuuden analyysissä

Kandidaatintutkielma, 4.6.2021

Tekijä:

PYRY RUNKO

Ohjaaja:

TERO HEIKKILÄ

KALLE KANSANEN



JYVÄSKYLÄN YLIOPISTO
FYSIKAN LAITOS

© 2021 Pyry Runko

Julkaisu on tekijänoikeussäännösten alainen. Teosta voi lukea ja tulostaa henkilökohtaista käyttöä varten. Käyttö kaupallisiin tarkoituksiin on kielletty. This publication is copyrighted. You may download, display and print it for Your own personal use. Commercial use is prohibited.

Tiivistelmä

Runko, Pyry

Kvanttihilppymenetelmän käyttö spin-kubitien tilamanipulaatioiden tarkkuuden analyysissä

Kandidaatintutkielma

Fysiikan laitos, Jyväskylän yliopisto, 2021, 32 sivua

Tässä kandidaatintutkielmassa tarkastelen numeerisesti spin-kubitin tilamanipulaation tarkkuutta erityisesti kvanttilippymenetelmää käyttäen. Käsittelem manipulaatiota, jossa muuttuvan magneettikentän taajuus tuodaan adiabaattisesti resonanssiin staattiseen magneettikenttään asetetun spin-kubitin kanssa. Tilamanipulaation tarkkuuden määritän yksinkertaisessa tapauksessa numeerisesti. Esittelen kvanttilippymenetelmän algoritmin ja mallinnan kvanttilippymenetelmällä ajatun systeemin saapumista termiseen tasapainoon ympäristönsä kanssa. Eristetyille systeemille manipulaation aiheuttaman tilasiirtymän todennäköisyys on verrannollinen ajokentän ja staattisen kentän vahvuuksien suhteen C_0/B neliöön, kun suhde on suuruusluokkaa 10^{-2} .

Avainsanat: Kubitti, spin, kvanttilippyy, kvanttimekaniikka

Abstract

Runko, Pyry

Using the quantum jump method in fidelity analysis of state manipulations on spin qubits

Bachelor's thesis

Department of Physics, University of Jyväskylä, 2021, 32 pages.

In this bachelor's thesis I investigate numerically the fidelity of a manipulated spin-qubit using the quantum jump method. In particular, I consider an oscillating magnetic field whose frequency is varied and brought into resonance with a spin qubit set in a static magnetic field. I evaluate the fidelity of this manipulation in a simple case numerically. I explain the algorithm used in the quantum jump method and using this algorithm I model a manipulated spin-qubit system reaching thermal equilibrium with its environment. I find the probability for a state transition caused by this manipulation to be proportional to the square of the ratio of the drive field and static field strengths C_0/B , when the ratio is of the order 10^{-2} .

Keywords: Qubit, spin, quantum jump, quantum mechanics

Esipuhe

Aloitin yliopisto-opintoni syksyllä 2016 Jyväskylän yliopiston informaatioteknologian tiedekunnassa. Pääaineeni oli tietotekniikka, jota opiskelin noin kaksi vuotta, kunnes päätin vaihtaa yliopiston sisällä pääaineeni fysiikkaan. Fysiikan opiskelu on tyydyttänyt tiedonjanoani selvästi enemmän, mutta nälkä silti kasvaa syödessä.

Kvanttilaskentaan liittyen on kirjoitettu useita kandidaatintutkielmia sekä fysiikan että tietotekniikan opiskelijoiden toimesta. Tämä ei minulle ole kovin yllättävää, sillä kvanttimekaniikka ja sen sovellukset olivat ainakin minulle lukiofysiikan kiinnostavimpia aiheita ja niiden käsittely oli siellä vähäistä. Kvanttimekaniikkaa opiskelevilta kuitenkin vaaditaan kärsivällisyyttä, kun kvanttimekaniikan sisältöä ei pysty ankkuroimaan aiempaan tietoon samaan tapaan kuin vaikkapa klassista mekaniikkaa.

Opiskellessani fysiikkaa viimeisen kolmen vuoden aikana kiinnostukseni kvanttimekaniikkaan on kasvanut. Viime vuonna kesätöiden ohella vietin osan vapaa-ajastani Massachusetts Institute of Technologyn avoimen kurssimateriaalin parissa valmistautuen tulevan lukuvuoden kvanttimekaniikan kursseille. Osoittautui, että tuon syksyn kurssit käsittelivät pääosin niitä aiheita, joihin olin kesän aikana tutustunut. Mielinkiintoni aiheeseen ei tietenkään ollut tyydytty, mutta sain tärkeää harjoitusta erityisesti kvanttimekaniikkaan liittyvässä matematiikassa.

Kandidaatintutkielman aiheen valinnan ollessa ajankohtainen olin rajannut vaihtoehtoni kahteen alueeseen: tiiviin aineen fysiikka ja kvanttiväridynamiikka. Fysiikan laitoksemme kvanttiväridynamiikan tutkimusryhmän sivuilla on mainio lista mahdollisia opinnäytetöiden aiheita, joihin olin ajoissa tutustunut, ja fysiikan laitoksen aulassa ilmoitustauluun oli kiinnitettynä lista mahdollisista aiheista tiiviin aineen teorian tutkimusryhmässä. Ryhmän johtaja, professori Tero Heikkilä, mainitsi erään aiheen, jota tuolla listalla ei ollut. Aiheessa yhdistyi useampi minua kiinnostava avainsana, joihin halusin tutustua tarkemmin, näistä päällimmäisenä *kubitti* ja *kvanttihyppy*.

Kubitti. Olin kuullut puhetta kvanttietokoneista ja kubiteista informaatioteknologian laitoksella. Parhaiten minulle jäi mieleen erään professorin skeptisyys

tuollaisten koneiden todellisesta merkityksestä laskennallisten tieteiden saralla. Kuivittelin myös kvanttilaskennan olevan jotain, mihin minun ymmärrykseni ei tulisi riittämään. Nyt tiedän, että kvanttifysiikkaa voi oppia, vaikka sitä ei ymmärrä. Vähäisimmälle ymmärrykselle kvanttimekaniikan kursseilta minulle jäi kenties se, jota usein kutsutaan aaltofunktion romahtamiseksi. Ei vähiten siksi, että olin aikaisemmin kuullut Hugh Everettin monimaailmatulkinnasta. Romahdus. Kvanttihyppy. Kuulostaa jännältä.

Tutkielmani ei ole sisällöltään niin rikas, kuin olisin toivonut, vaikka aiheessa itessään on paljon mahdollisuuksia. Tämän tutkielman aikana olen oman tietämykseni lisäksi päässyt kehittämään taitojani erityisesti ohjelmoinnissa. Olen myös saanut lisää intoa matematiikan opiskeluun. Tutkielman parissa huomasin, että matemaattiset taitoni eivät täysin vastaa odotuksiani, vaikka tutkintooni kuuluvat matematiikan kurssit alkoivat loppua kohden tuntua liian helpoilta.

Kiitokset ohjaajilleni Terolle ja Kallelle kiinnostavasta aiheesta ja keskusteluista. Kiitos myös perheelleni ja ystäväilleni, jotka kannustivat minua kandidaattiopintojeni aikana.

Jyväskylässä 4.6.2021

Pyry Runko

Sisällys

Tiivistelmä	3
Abstract	5
Esipuhe	7
1 Johdanto	11
2 Teoreettinen tausta	13
2.1 Spin	13
2.2 Spin-kubitin toteutus	15
2.3 Adiabaattinen teoria	16
2.4 Kvanttihyppymenetelmä	17
2.5 Pyörivä koordinaatisto	19
3 Tulokset	21
3.1 Eristetty spin-kubitti	21
3.2 Lämpökylvyn kytkentä	25
4 Päätäntö	29
Lähteet	30

1 Johdanto

Tässä tutkielmassa tutustun yksinkertaisen avoimen kvanttisysteemin tarkasteluun kvanttihyppymenetelmän avulla. Tutkin kvanttimekaanisen kaksitilasysteemin eli kubitin käyttäytymistä yksinkertaisessa manipulaatiossa, ja tavoitteeni on selvittää tämän manipulaation tarkkuus kubitin tilaa tutkimalla. Manipulaation tarkkuudella tässä tarkoitan todennäköisyyttä, jolla systeemi löydetään halutusta tilasta manipulaation jälkeen. Kvanttimekaanisen systeemin tila voi muuttua tilasiirtymissä, joita kutsutaan myös kvanttihyppyiksi.

Kubitti eli kvanttibitti on klassisen bitin kvanttimekaaninen vastine. Sanaa kubitti voidaan käyttää synonyyminä kvanttimekaaniselle kaksitilasysteemille. Informaatio-teorian näkökulmasta kubitti voidaan käsittää eräänä kvantti-informaation yksikkönä. Kubitti voi olla esimerkiksi elektroni, jonka spinin z -komponentiksi on mitattavissa positiivinen tai negatiivinen arvo. Kubitin toteutus voi perustua myös vaikkapa fotonien polarisaatioon tai suprajohtaviin piireihin. Kubitin fysikaalinen toteutus ei ole niinkään merkityksellinen. Olennaista on, että kyseessä on hyvin määritelty kvanttisysteemi, jonka kahta alinta energiatilaa voidaan manipuloida hallitusti siten, että ylempät tilat eivät virity.

Kubitin ominaisuus olla kahden kantatilan muodostamassa superpositiotilassa, löysästi muotoiltuna siis kahdessa eri tilassa yhtä aikaa, on kvanttilaskennan kulmakivi. Toinen kubiteille olennainen ominaisuus on lomittuminen. Kahden kubitin sanotaan olevan lomittuneita, jos kubittiparin tilaa ei voida esittää yksittäisten kubittien tilojen tulona. Monen kubitin systeemin mahdollisista tiloista suurin osa on lomittuneita tiloja.

Spin-kubitissa systeemin sisältämä informaatio on oleellisesti sidottu hiukkasen spiniin. Varatuilla hiukkasilla, kuten atomiytimillä ja elektroneilla spin ilmenee magneettisena momenttina. Tällaisia spin-kubitteja voidaan manipuloida ulkoisella magneettikentällä. Magneettisia momentteja hyödynnetään myös klassisessa laskennassa tiedon säilömiseen kiintolevyillä.

Kvanttihyppy on nopea [1] muutos kvanttimekaanisessa systeemissä. Kvanttihyppy syntyvät vuorovaikutuksesta toisen systeemin kanssa. Esimerkiksi yksittäinen vety-

atomi on kytketty ympäristöönsä sähkömagneettisen kentän kautta, jolloin atomin elektroni voi vastaanottaa ja luovuttaa energiaa fotoneina. Atomi voi näin virittyä ylemmälle elektroniselle viritystilalle ja tuo viritystila voi purkautua. Kaasun atomien viritystilojen purkautumisia voi luonnossa nähdä pimeänä yönä revontulien loistona.

Yksi tapa tarkastella teoreettisesti tällaisen ympäristöön kytketyn eli avoimen kvanttisysteemin kehitystä tunnetaan kvanttihyppymenetelmänä. Tätä kutsutaan myös Monte Carlo -aaltofunktiotekniikaksi, sillä se hyödyntää satunnaisluvuilla lasketuista tuloksista muodostettuja keskiarvoja, joista systeemin aaltofunktion eli tilan aikakehitys voidaan määrittää. Kvanttihyppymenetelmä on tiheysmatriisille ekvivalentti tapa käsitellä avointa kvanttisysteemiä laskennallisesti [2]. En kuitenkaan tarkastele tiheysmatriiseja tässä tutkielmassa.

Kubittien ja ympäristön vuorovaikutuksen ymmärtäminen on oleellista kvanttietokoneiden kehityksessä. David DiVincenzo [3] on määritellyt kvanttilaskennalle viisi kriteeriä, jotka toimivan kvanttitietokoneen on toteutettava. Yksi DiVincenzon kriteereistä on laskennan alustaminen. Alustaminen on ikään kuin kubitin muistin pyyhkimistä. Kun kubittia manipuloidaan koherentisti, sen superpositiotilat säilyvät, ja yleisesti kubitin tila nykyhetkellä riippuu sen historiasta. Alustaminen voidaan tehdä esimerkiksi perustillalle siten, että kubitti tuodaan vuorovaikutukseen kylmän ympäristön kanssa, jolloin mahdolliset superpositiotilat tuhoutuvat.

Tämän tutkielman tarkoituksena on tutustua kvanttihyppymenetelmään analysoimalla kubitin tilasiirtymiä adiabaattisessa manipulaatiossa, kun kubitti vuorovaikuttaa myös ympäristönsä kanssa. Tutkielmani nojaa pitkälti Hekkingin ja Pekolan artikkeliin [2], jossa kvanttihyppymenetelmän teoriaa sovelletaan ajettuun kubittiin, sekä Laughtin ym. artikkeliin [4], jossa on tutkittu kokeellisesti piihin upotettua spin-kubittia.

2 Teoreettinen tausta

2.1 Spin

Ei-relativistinen kvanttimekaaninen systeemi toteuttaa Schrödingerin yhtälön

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) = H\Psi(t), \quad (1)$$

missä $\Psi(t)$ on systeemin aaltofunktio ja H on systeemin Hamiltonin operaattori. Kun systeemin Hamiltonin operaattori ei riipu ajasta, sen ominaistilojen aikakehitys on $\Psi_n(t) = e^{-iE_n t/\hbar} \Psi_n(0)$, missä E_n on ominaistilan $\Psi_n(t)$ energia. Energiat voidaan ratkaista ominaisarvoyhtälöstä $H\Psi_n(t) = E_n \Psi_n(t)$.

Formaalissa kvanttimekaniikassa systeemin tiloja kuvataan vektoreilla, jotka kuuluvat niin kutsuttuun Hilbertin avaruuteen. Tämä on kompleksinen sisätuloavaruus. Vektoreille käytetään usein Paul Diracin [5] bra-ket notaatiota.

Klassisen bitin tilaa 1 vastaavaa kubitin tilaa merkitään ket-vektorilla $|1\rangle$ tai $|e\rangle$ (excited) ja tilaa 0 vastaa ket $|0\rangle$ tai $|g\rangle$ (ground). Kirjaimia e ja g käytetään, kun kubitin tilat vastaavat jonkin fyysisen systeemin viritys- ja perustiloja. Nämä ket-vektorit muodostavat kubitin tilojen kannan. Käytäntönä on valita vektoreiksi

$$|e\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{ja} \quad |g\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (2)$$

Tilat $|e\rangle$ ja $|g\rangle$ ovat normitetut, eli niiden sisätulo $\langle \cdot | \cdot \rangle$ itsensä kanssa on yksi. Tilat ovat myös ortogonaaliset, sillä niiden välinen sisätulo on nolla. Normitettujen ja keskenään ortogonaalisten vektorien joukkoa kutsutaan ortonormaaliksi joukoksi. Mielivaltaisessa tilassa olevaa kubittia vastaava ket-vektori $|\Psi\rangle$ voidaan superpositio-periaatteen nojalla kirjoittaa muodossa

$$|\Psi\rangle = \alpha |e\rangle + \beta |g\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}, \quad (3)$$

missä α ja β ovat kompleksilukuja. Kubitin mahdollisia tiloja ovat siis kaikki ortogo-

naalisten kantatilojen $|e\rangle$ ja $|g\rangle$ superpositiot.

Jokaista ket-vektoria (3) vastaa bra-vektori $\langle\Psi|$, joka on ket-vektorin Hermiten konjugaatti, eli transpoosi, jossa kompleksiluvut korvataan kompleksikonjugaateilla

$$\langle\Psi| \equiv |\Psi\rangle^\dagger = \alpha^* |e\rangle^\dagger + \beta^* |g\rangle^\dagger = [\alpha^* \quad \beta^*], \quad (4)$$

missä α^* ja β^* ovat lukujen α ja β kompleksikonjugaatit. Kompleksikonjugaatissa imaginääriosan merkki on vaihdettu. Sisätulo $\langle a|b\rangle$ voidaan mieltää bra- ja ket-vektoreiden väliseksi matriisituloksi $\langle a| |b\rangle$.

Yleinen tila (3) toteuttaa normitusehdon $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = \langle\Psi|\Psi\rangle = 1$. Tämä vaatimus seuraa kvanttimekaniikan todennäköisyystulkinnasta, jonka mukaan tilan (3) kertoimet α ja β antavat todennäköisyydet mitata systeemi kussakin kantatilassa¹. Tämä todennäköisyys voidaan laskea sisätulon avulla. Todennäköisyys mitata kubitti (3) tilassa $|e\rangle$ on $\langle e|\Psi\rangle^2 = |\alpha|^2$ ja vastaavasti tilalle $|g\rangle$.

Klassisessa mekaniikassa varatun hiukkasen magneettisen momentin ajatellaan olevan seurausta hiukkasen pyörimismäärästä. Kvanttimekaniikassa jokaisella alkeishiukkasella on luontainen pyörimismäärän tavoin käyttäytyvä ominaisuus, jota kutsutaan spiniksi.

Vuonna 1922 Otto Stern ja Walter Gerlach [6] osoittivat atomien magneettisen momentin olevan kvantisoitunut. Tämän he tekivät lähettämällä hopea-atomeja epähomogeenisen magneettikentän läpi, jolloin mittauksessa atomien magneettiselle momentille saatiin kaksi mahdollista arvoa. Tämä on seurausta hopea-atomien elektronikonfiguraatiosta, jossa atomin magneettinen momentti on oleellisesti seurausta pelkästään atomin uloimman elektronin spinistä. Spinkvanttiluvun s omaavan systeemin spinin z -komponentiksi voi mittauksessa saada yhden $2s + 1$ mahdollisesta arvosta. Elektronin spinkvanttiluku on tällöin $s = \frac{1}{2}$.

Hiukkasen magneettinen momentti on [7, s. 651]

$$\vec{\mu} = g \frac{q}{2m} \vec{S} = \gamma \vec{S}, \quad (5)$$

missä g on hiukkaselle ominainen vakio, q hiukkasen varaus, m hiukkasen massa ja \vec{S} hiukkasen spin. Vakio γ on hiukkasen magneettisen momentin ja spinin suhde, jota kutsutaan gyromagneettiseksi suhteeksi. Elektronille tämä on $\gamma_e/2\pi \approx 28 \text{ GHz/T}$.

Varatun hiukkasen energia homogeenisessä magneettikentässä \vec{B} on [7, s. 658]

¹Kunhan kantatilat $|e\rangle$ ja $|g\rangle$ ovat jonkin mitattavan suureen ominaistiloja.

$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$, missä $\vec{\mu}$ on hiukkasen magneettinen momentti (5). Tätä kuvaava Hamiltonin operaattori voidaan kirjoittaa spin-operaattorin $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$ avulla muodossa $H = -\gamma B S_z$, kun magneettikenttä on z -akselin suuntainen. Alimman energian tila on siis se, jossa magneettinen momentti ja magneettikenttä ovat samansuuntaiset. Vastaavasti suurimman energian tilalla momentti ja kenttä ovat vastakkaisuuntaiset. Kun spinin mittausta tehdään magneettikentän suuntaisen akselin suhteen, mahdollisia mittaustuloksia ovat vain nämä kaksi.

Operaattorin S_z ominaisarvoina ovat spinin mittauksessa saatavat arvot $\pm \frac{\hbar}{2}$. Kun operaattorin kantatiloja merkitään vektoreilla $|e\rangle$ ja $|g\rangle$, sen matriisiesitys on

$$S_z = \begin{bmatrix} \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_z, \quad (6)$$

jossa σ_z on niin kutsuttu Paulin matriisi. Paulin matriisit ovat

$$\sigma_0 = I = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (7)$$

Tiloille (2) on lisäksi olemassa nosto- ja laskuoperaattorit

$$\sigma_+ = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_- = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (8)$$

joille $\sigma_+ |g\rangle = |e\rangle$ ja $\sigma_- |e\rangle = |g\rangle$. Matriisi σ_x on näiden nosto- ja laskuoperaattoreiden summa. Tämän vuoksi x -akselin suuntainen magneettikenttä $B\hat{x}$ voi aiheuttaa siirtymää z -suuntaisten spin-tilojen välillä.

2.2 Spin-kubitin toteutus

Yksi tapa spin-kubitin toteutukselle on lisätä puolijohhteeseen elektronin luovuttava atomi. Tällaisen systeemin etuja ovat skaalattavuus ja yhteensopivuus arkipäiväisen puolijohdeteknologian kanssa [8].

Tässä työssä tutkin erään kokeellisen ryhmän rakentamaa systeemiä [4], jossa piihin upotettu fosforiatomi luovuttaa yhden elektronin ympäristöönsä. Tämän elektronin spiniä voidaan manipuloida ulkoisella kentällä, jolloin ajokentän fotonit kytkeytyvät elektronin spiniin, muodostaen uuden systeemin [4]. Tätä kutsutaan spinin "pukemiseksi".

Asetelma on seuraavanlainen. Yksittäinen elektroni on asetettu staattiseen homogeeniseen z -akselin suuntaiseen magneettikenttään B_z . Lisäksi elektroniin kohdistetaan muuttuva magneettikenttä eli ajokenttä, joka on kohtisuoraan staattista kenttää vastaan. Klassiselle magneettikentälle tätä systeemiä kuvaava Hamiltonin operaattori on [4]

$$H(t) = \frac{B\hbar}{2}\sigma_z + C_0\hbar\cos(\omega t)\sigma_x, \quad (9)$$

missä $B\hbar = \gamma_e B_z \hbar$ on ajamattoman systeemin energiatilojen ero, C_0/γ_e on ajokentän amplitudi ja ω on ajokentän kulmataajuus.

Spin-kubitti voidaan kokeissa kytkeä toiseen systeemiin, esimerkiksi mekaaniseen värähtelijään [9]. Tämän aikaansaamiseksi ajokentän taajuus ω tuodaan hitaasti lähelle kubitin taajuuden arvoa B . Taajuus on tällöin ajasta riippuva. Tässä työssä oletan taajuuden olevan muotoa $\omega(t) = B(1 - \exp(-t/\tau))$, missä τ on vakio. Tällöin $\omega \approx B$, kun $t \gg \tau$. Taajuuden muutos on kubitin sisäisessä aikaskaalassa hidasta, kun $\tau \gg 1/B$.

Ajamalla spin-kubittia tällaisella magneettikentällä saadaan aikaiseksi niin kutsuttu Rabi-oskillaatio, jossa kubitin (3) kantatilojen kertoimet α ja β oskilloivat. Ajokentällä voidaan näin luoda superpositiotiloja tietyn mittaisten pulssien avulla. Kvanttilaskennassa tällaista superposition luovaa operaatiota kutustaan Walshin ja Hadamardin portiksi.

2.3 Adiabaattinen teoria

Kun Hamiltonin operaattori riippuu ajasta, systeemille on olemassa ortonormitettu joukko hetkellisiä energian ominaistiloja $\{|\Psi_1(t)\rangle, \dots, |\Psi_N(t)\rangle\}$ kaikilla ajanhetkillä t . Nämä toteuttavat Schrödingerin yhtälön (1) ajanhetkeä vastaavalla Hamiltonilaisella $H(t)$. Hetkellisten ominaistilojen $|\Psi_n\rangle$ avulla voidaan kirjoittaa yleinen hetkellinen tila

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^N k_n(t)e^{i\theta_n(t)} |\Psi_n(t)\rangle, \quad (10)$$

missä $k_n(t)$ on ajasta riippuva kompleksinen kerroin, $\theta_n(t) \equiv -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt'$, on niin kutsuttu dynaaminen vaihe ja $E_n(t)$ on hetkellisen tilan $|\Psi(t)_n\rangle$ energia. Tälle normitusehto kaikilla t on $\sum |k_n(t)|^2 = 1$.

Tekijä $e^{i\theta_n}$ muistuttaa läheisesti ajasta riippumattoman Hamiltonilaisen ominaistilan aikakehitystä, ja yhtälö (10) pätee myös ajasta riippumattomalle Hamiltoni-

laiselle. Tällöin $k_n(t)$ ei riipu ajasta ja dynaaminen vaihe on $\theta_n(t) = -E_n t/\hbar$.

Schrödingerin yhtälöstä (1) voidaan johtaa [10, s. 328-330] yleisen tilan (10) kertoimille differentiaaliyhtälö²

$$\dot{k}_n(t) = -k_n(t) \langle \Psi_n | \frac{d}{dt} | \Psi_n \rangle - \sum_{n \neq m} k_m(t) e^{i[\theta_m(t) - \theta_n(t)]} \frac{\langle \Psi_n | \frac{\partial H}{\partial t} | \Psi_m \rangle}{E_m(t) - E_n(t)}, \quad (11)$$

olettaen, että energiatilat eivät ole degeneroituneita, eli $E_n \neq E_m$, jos $n \neq m$. Tekijä $\langle \Psi_n | \frac{\partial H}{\partial t} | \Psi_m \rangle$ kuvaa Hamiltonilaisen aikariippuvuuden aiheuttamia tilasiirtymiä.

Adiabaattisessa approksimaatiossa oletetaan, että systeemin Hamiltonin operaattori muuttuu ajassa riittävän hitaasti, jotta se voidaan jättää huomiotta, siis $\frac{\partial H}{\partial t} \approx 0$. Näin saadaan yhtälöstä (11) yksinkertaisesti $\dot{k}_n(t) = -k_n(t) \langle \Psi_n | \dot{\Psi}_n \rangle$. Tämän differentiaaliyhtälön ratkaisu on

$$k_n(t') = k_n(0) e^{-\int_0^{t'} \langle \Psi_n | \dot{\Psi}_n \rangle dt}. \quad (12)$$

Eksponentissa esiintyvä sisätulo on täysin imaginäärinen kaikilla t [10, s. 330], joten vain yleisen tilan (10) vaiheet muuttuvat. Tällöin, jos systeemi on hetkellä t_0 hetkellisellä ominaistilalla $|\Psi_n(t_0)\rangle$, se pysyy kaikkina ajanhetkinä vastaavalla hetkellisellä ominaistilalla $|\Psi_n(t)\rangle$. Tämä tulos tunnetaan adiabaattisena teoreemana. Lisäksi, jos vektorin $|\Psi_n(t)\rangle$ komponentit ovat reaalisia, sisätulo $\langle \Psi_n | \dot{\Psi}_n \rangle$ on tilan $|\Psi_n\rangle$ normin aikaderivaatta ja siten nolla kaikilla t . Tällöin yhtälön (11) ensimmäinen termi katoaa.

2.4 Kvanttihyppymenetelmä

Adiabaattisessa approksimaatiossa oletetaan, että systeemi ei manipulaation seurauksena siirry energiatilalta toiselle. Todellisessa tapauksessa manipulaatiot tehdään vain sen verran hitaasti, että tilasiirtymät ovat riittävän epätodennäköisiä. Toisaalta todellisessa mittauksessa systeemi vuorovaikuttaa ympäristönsä kanssa, mikä voi myös aiheuttaa tilasiirtymiä.

Eryteisesti termodynaamisessa tasapainossa todennäköisyys löytää systeemi tilalta, jonka energia on E_n , on Boltzmannin jakaumasta

$$p_n = \frac{e^{-E_n/k_B T}}{Z}, \quad (13)$$

²Käytän kokonaisaikaderivaatalle $\frac{d}{dt}k$ merkintää \dot{k} .

missä k_B on Boltzmannin vakio, T on systeemin lämpötila ja $Z = \sum_n e^{-E_n/k_B T}$ on systeemin partitiofunktio.

Ympäristön kanssa vuorovaikuttava eli siihen kytketty kvanttisysteemi voi siirtyä äkillisesti tilalta toiselle. Tämä hyppy voi tapahtua esimerkiksi energiatilojen välillä fotonin emission tai absorption seurauksena. Kvanttimekaniikan hengessä nämä emissiot ja absorptiot ovat satunnaisia. Kvanttihyppyjä on kuitenkin onnistuttu kokeellisesti manipuloimaan [11].

Tällaista systeemiä voidaan simuloida kvanttihyppymenetelmällä. Menetelmän algoritmi on seuraava [2]. Olkoon systeemi alkuhetkellä tilassa $|\Psi(t_0)\rangle = \alpha(t_0)|e\rangle + \beta(t_0)|g\rangle$. Olkoon lisäksi $\Gamma_\downarrow|\alpha(t)|^2 dt$ ja $\Gamma_\uparrow|\beta(t)|^2 dt$ systeemin todennäköisyydet emittoida ja absorboida fotonit aikavälillä $[t, t + dt]$. Tällöin todennäköisyys sille, että kumpi tahansa tapahtuu, on näiden summa $P dt$.

Arvotaan nyt satunnaisluku $\epsilon_1 \in \mathbb{R}$ väliltä $[0, 1]$. Jos $\epsilon_1 \leq P dt$, kvanttihyppy tapahtuu, ja systeemi siirtyy toiselle kantatiloistaan. Arvotaan sitten toinen satunnaisluku $\epsilon_2 \in \mathbb{R}$ väliltä $[0, 1]$. Jos $\epsilon_2 \leq \Gamma_\uparrow|\beta(t)|^2/P$, systeemi hyppää viritystilalle $|\Psi(t + dt)\rangle = |e\rangle$, toisin sanoen $\beta(t_0 + dt) = 1$ ja $\alpha(t_0 + dt) = 0$. Jos näin ei ole, on $\epsilon_2 < \Gamma_\downarrow|\alpha(t)|^2/P$ ja systeemi hyppää perustilalle $|\Psi(t + dt)\rangle = |g\rangle$. Kvanttihyppy siis poistaa hetkellisen tilan superposition.

Kvanttihyppymenetelmän avulla voidaan myös johtaa hyppyjen välistä aikakehitystä kuvaava yhtälö. Hamiltonin operaattorin (9) kuvaaman systeemin tavallista aikakehitystä on muokattava, sillä kvanttihyppy tuovat lisäehtoja todennäköisyyden säilymiselle. Toisin sanoen kvanttihyppy muuttavat tilojen normitusehtoa. Tämän jälkeen niin kutsutussa vuorovaikutuskuvassa, eli tietyssä pyörivässä koordinaatistossa, saadaan hyppyjen väliselle dynamiikalle differentiaaliyhtälöpari [2], jonka matriisimuoto on

$$\begin{bmatrix} \dot{\alpha}(t) \\ \dot{\beta}(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\Delta\Gamma|\alpha(t)|^2/2 & -i\hbar e^{iBt}C(t) \\ -i\hbar e^{-iBt}C(t) & \Delta\Gamma|\beta(t)|^2/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{bmatrix} \equiv A(t) \begin{bmatrix} \alpha(t) \\ \beta(t) \end{bmatrix}, \quad (14)$$

jossa $\Delta\Gamma = \Gamma_\downarrow - \Gamma_\uparrow$, kerroin e^{-iBt} on dynaaminen vaihe ja $C(t) = C_0\hbar \cos(\omega t)$ on ajava voima.

Jos satunnaisluku $\epsilon_1 > P dt$ kvanttihyppyä ei tapahdu, ja systeemin tila ajan dt jälkeen saadaan Eulerin menetelmällä yhtälöstä $|\Psi(t_0 + dt)\rangle = (I + A(t_0))|\Psi(t_0)\rangle$. Nyt systeemin mahdollinen aikakehitys on määritelty ja algoritmia voidaan toistaa kaikille ajanhetkille $t > t_0$.

Kvanttimekaniikan tilastollisen luonteen vuoksi ympäristöön hallitsemattomasti kytketyn fysikaalisen systeemin mallintamiseksi ei riitä vain yksi laskenta halutulla aikavälillä. Algoritmia on toistettava useita kertoja, jolloin näistä laskennoista saatua keskiarvoa voidaan verrata kokeellisesti määritettyihin keskiarvoihin. Menetelmään sisältyy myös tilastollista hajontaa, joka syntyy satunnaislukujen käytöstä. Odotusarvot systeemille saadaan eksaktisti, kun laskennan toistojen määrä lähestyy ääretöntä.

Emissio- ja absorptiotahdit (engl. rates) Γ_{\downarrow} ja Γ_{\uparrow} esiintyvät niin kutsussa mestariyhtälössä ja niitä vastaavat tietyt korrelaatiofunktiot. Tässä työssä kuitenkin valitsen toisen näistä vaatimalla vain, että systeemin relaksaatioaika on riittävän pitkä, siis $1/B \ll \tau \ll 1/(\Gamma_{\uparrow} + \Gamma_{\downarrow})$. Toisen parametreista määritän niiden suhteesta $\Gamma_{\uparrow}/\Gamma_{\downarrow} = e^{\Delta E/k_B T}$, missä energiatilojen ero $\Delta E = B\hbar$. Ajetulle systeemille energiaero on tilojen hetkellisten energioiden erotus $2\Omega(t)\hbar = \sqrt{B^2 + 4C_0^2 \cos(\omega t)}\hbar$. Kun $C_0 \ll B$, on hetkellisten energiatilojen erotus kuitenkin $2\Omega(t)\hbar \approx B\hbar$. Suhde $\Gamma_{\uparrow}/\Gamma_{\downarrow}$ vastaa energiatilojen erotuksen Boltzmannin tekijää, olettaen, että ympäristö pysyy termodynaamisessa tasapainossa.

2.5 Pyörivä koordinaatisto

Unitaarisen matriisin U Hermiten konjugaatti on sen käänteismatriisi, eli $U^\dagger = U^{-1}$. Kaikki unitaariset 2×2 -matriisit voidaan kirjoittaa muodossa $U = \exp(iS)$, missä S on hermiittinen 2×2 -matriisi, eli $S = a\sigma_x + b\sigma_y + c\sigma_z + dI$, kun $a, b, c, d \in \mathbb{R}$. Erityisesti koordinaatiston kiertäminen voidaan suorittaa matriisilla, jossa S on kiertoakselia vastaava Paulin matriisi (7). Kvanttilaskennassa kaikki kubiteille suoritettavat koherentit operaatiot voidaan kirjoittaa unitaarisina matriiseina.

Hamiltonilaisen (9) systeemiä voidaan tutkia laboratoriokoordinaatiston sijaan pyörivässä koordinaatistossa. Tällöin tila $|\phi(t)\rangle$ saadaan laboratoriokoordinaatiston tilasta $|\psi(t)\rangle$ muunnoksella $U(t) = \exp(-i\omega\sigma_z t/2)$, siis $|\phi(t)\rangle = U|\psi(t)\rangle$. Tila $|\phi(t)\rangle$ toteuttaa Schrödingerin yhtälön (1), jossa Hamiltonin operaattori on $\tilde{H} = UHU^\dagger + i\dot{U}U^\dagger$.

Kun taajuus $\omega = B$, tällä muunnoksella voidaan yhtälön (9) systeemille kirjoittaa efektiivinen Hamiltonin operaattori

$$\tilde{H} = \frac{C_0\hbar}{2} \left[\sigma_x + e^{2iBt}\sigma_{\downarrow} + e^{-2iBt}\sigma_{\uparrow} \right]. \quad (15)$$

Tästä saadaan ajasta riippumaton diagonaalinen matriisi pyörivän aallon approksimaation (RWA) avulla. Tässä approksimaatiossa nopeasti pyörivät³ termit $e^{\pm 2iBt}$ jätetään huomiotta. Kertoimien keskiarvo on nolla ajanjaksoilla, joiden suuruusluokka on $1/B$. Tämä approksimaatio antaa likimääräisen ajasta riippumattoman Hamiltonin operaattorin $\tilde{H}_{\text{RWA}} = \frac{C_0\hbar}{2}\sigma_x$, jonka ominaisarvot ovat $C_0\hbar/2$. Pyörivässä koordinaatistossa siis kubitin energiatilojen erotusta vastaava taajuus C_0 määräytyy ajokentän amplitudista.

³Kompleksiluvun $e^{i\omega t}$ vektoriesitys kompleksitasossa pyörii origon ympäri kulmanopeudella ω .

3 Tulokset

Tutkin numeerisesti kubitin tarkkuuden käyttäytymistä ajan funktiona yhtälön (9) kuvailemassa systeemissä. Aluksi tarkastelen eristettyä systeemiä lyhyesti analyytisesti ja tämän jälkeen Mathematica-ohjelmiston avulla. Näiden jälkeen tarkastelen ympäristön kanssa vuorovaikuttavaa systeemiä Hekkingin ja Pekolan [2] esittelemän kvanttihyppymenetelmän algoritmin avulla.

Käyttämäni analyytinen tarkastelutapa systeemin dynamiikkaa kuvailevalle differentiaaliyhtälölle tuottaa numeeriseen laskentaan siirryttäessä ratkaisun hajautumisen. Mathematica-ohjelmistolla systeemin käytös saadaan laskettua suoraan valmiilla metodeilla. Tämän tarkastelun perusteella totean, että kubitin keskimääräinen epätarkkuus adiabaattisessa manipulaatiossa on verrannollinen ajokentän ja staattisen kentän suhteen C_0/B neliöön, kun tuo suhde on suuruusluokkaa 10^{-2} . Havaitsen kubitin alkutilan todennäköisyydessä yhden merkittävän pudotuksen manipulaation aikana. Tämän pudotuksen jälkeen todennäköisyys jää oskilloimaan amplitudilla, joka riippuu ajokentän vahvuudesta.

Esitän toteuttamani kvanttihyppymenetelmän algoritmin tuottaman kuvaajan yksittäiselle simulaatiolle. Kvanttihyppymenetelmää voidaan käyttää mallintamaan systeemin saapumista termiseen tasapainoon ympäristön kanssa simulaatioiden ensemblekeskiarvon kautta. Myös tällöin todennäköisyyksissä havaitaan oskillaatiota.

3.1 Eristetty spin-kubitti

Tarkastellaan edellä kuvattua ympäristöstään eristettyä spin-kubittisysteemiä. Ajanhetkellä $t = 0$ kantatilat ovat σ_z matriisin ominaistilat (2). Kun $t > 0$, systeemiin kohdistuu staattisen magneettikentän lisäksi muuttuva x -akselin suuntainen ajokenttä. Sen Hamiltonin operaattori on (9).

Olkoon $\hbar = 1$, ja merkitään $C(t) = C_0 \cos(\omega t)$ ja $\Omega(t) = \frac{1}{2}\sqrt{B^2 + 4C(t)^2}$. Tällöin operaattorin (9) karakteristisesta yhtälöstä $\det(EI - H) = 0$ saadaan sen ominaisar-

voiksi $E(t) = \pm\Omega(t)/2$ ja ominaisvektoreiksi

$$\Psi_1 = N_+ \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{2\Omega - B}{2C} \end{bmatrix} \quad \Psi_0 = N_- \begin{bmatrix} -1 \\ \frac{2\Omega + B}{2C} \end{bmatrix}, \quad (16)$$

joiden normitusvakiot ovat

$$N_{\pm} = \left(2 + \frac{B(B \mp 2\Omega)}{2C^2} \right)^{-1/2}. \quad (17)$$

Sijoittamalla yhtälöön (11) $c_{\pm} = k_{\pm} e^{\mp i\theta/2}$, missä $\theta = \int_0^t \Omega(t') dt'$ on dynaaminen vaihe, saadaan differentiaaliyhtälöpari, joka on matriisiyhtälönä

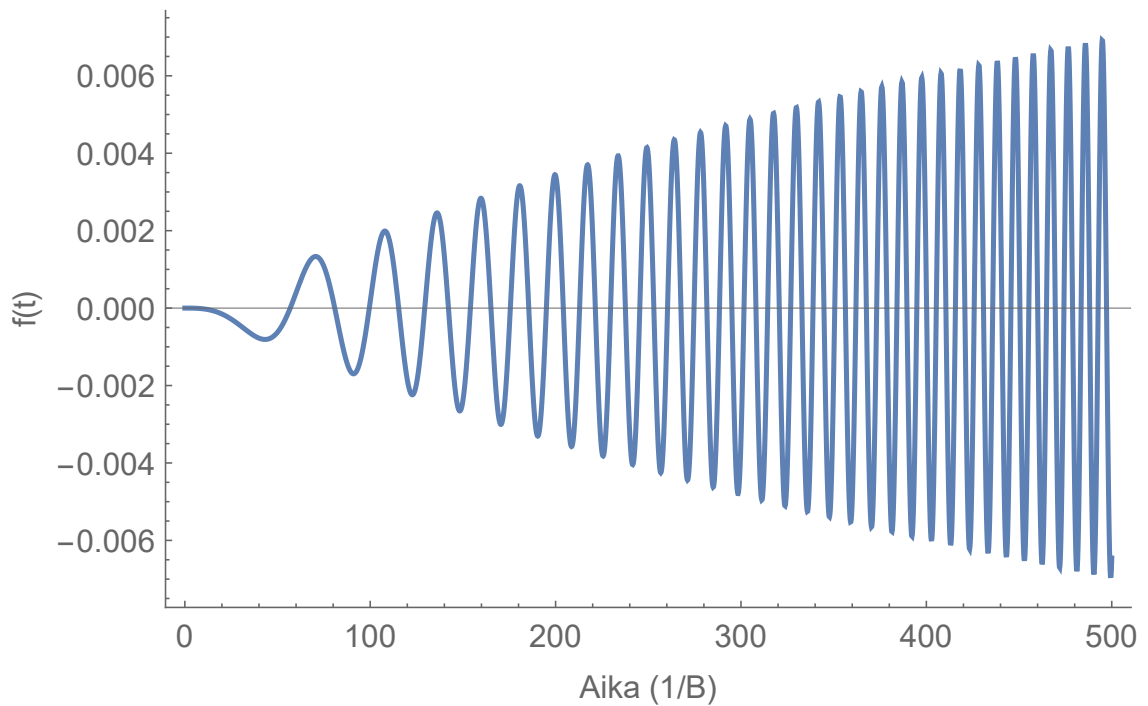
$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} c_+ \\ c_- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\Omega}{2} i & \frac{2B\dot{C}}{C^2} \\ -\frac{2B\dot{C}}{C^2} & -\frac{\Omega}{2} i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_+ \\ c_- \end{bmatrix}. \quad (18)$$

Vaihetekijä $e^{\mp i\theta/2}$ ei muuta kertoimien antamaa todennäköisyyttä: $|k_{\pm}|^2 = |c_{\pm}|^2$. Yhtälön ristitermit $\pm 2B\dot{C}/C^2$ eivät häviä rajalla $t \rightarrow \infty$, sillä systeemin Hamiltonin operaattori riippuu eksplisiittisesti ajasta. Tämä yhtälöpari ei suoraan ratkea numeerisesti integroimalla esimerkiksi toteuttamalla neljännen kertaluvun Runge–Kutta-algoritmeilla. Tällaisen ratkaisun normi ei säily yhtälössä esiintyvien $1/\cos(t)$ -termien vuoksi, sillä nämä lähestyvät jaksollisesti ääretöntä.

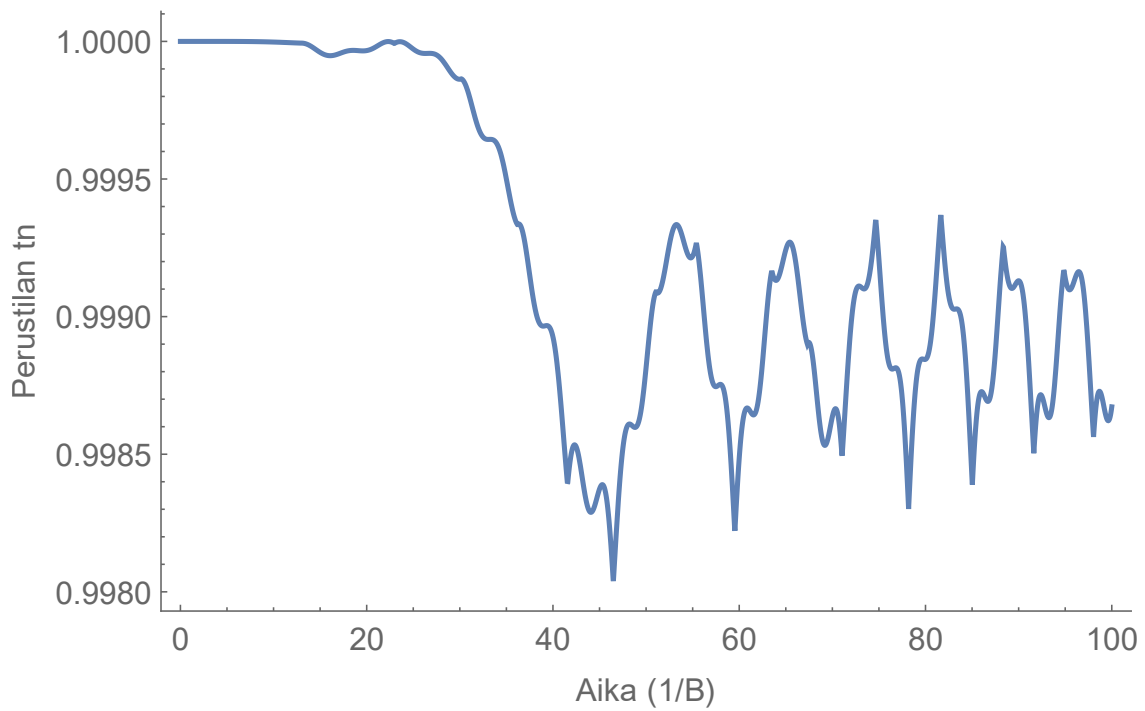
Hamiltonilaisen (9) hetkelliset ominaistilat voidaan ratkaista myös valmiilla numeerisilla metodeilla. Käytän eristetyn systeemin aikakehityksen tarkasteluun Mathematica-ohjelmistoa. Mathematican metodi Eigensystem palauttaa syötetyn matriisin ominaisarvot ja vektorit. Nämä voidaan sijoittaa yhtälöön (11) ja ratkaista NDSolve metodilla.

NDSolve-metodin antamat ratkaisut systeemin dynamiikalle eivät ole jatkuvasti derivoituvia. Tosin sanoen ratkaisujen todennäköisyysvirta ei ole jatkuva. Toisin kuin yhtälössä (18), tällä menetelmällä ratkaistuna Hamiltonilaisen (9) aikaderivaatan sisältämä termi näyttää kuitenkin olevan jatkuva ja sileä funktio. Tämä on kuvattu kuviossa 1.

Parametri τ määrää, kuinka nopeasti yhtälön (11) $\frac{\partial H}{\partial t}$ termi saavuttaa lopullisen tilan $f(t) \rightarrow -C_0 \sin(Bt)$. Tämä termi on kuvattu kuviossa 1. Kun C_0/B on pieni,



Kuvio 1. Adiabaattisen teorian antamassa differentiaaliyhtälössä (11) esiintyvä kerroin $f(t) = \langle \Psi_g(t) | \frac{\partial}{\partial t} H | \Psi_e(t) \rangle / (E_e(t) - E_g(t))$ ajan funktiona. $\Psi_{g/e}(t)$ on systeemin hetkellinen perustila/viritystila. Funktio on sinimuotoinen, mutta sen amplitudi ja taajuus muuttuvat lähestyen arvoja C_0 ja B vastaavasti. Laskennan parametrit ovat $C_0/B = 10^{-2}$ ja $\tau B = 10^3$.



Kuvio 2. Hetkellisen perustilan $\Psi_g(t)$ todennäköisyys Hamiltonilaiselle (9) ajan funktiona. Laskennan parametrit ovat $C_0/B = 10^{-2}$, $\tau B = 10^2$ ja alkuhetkellä systeemi on Hamiltonilaisen $H(0)$ perustilalla. Ajalla $t \gg \tau$ tilan todennäköisyys jää oskilloimaan arvon 0,999 ympärille amplitudilla $A \sim 10^{-4}$.

kubitin tila ei merkittävästi muutu. Esimerkiksi arvoilla $C_0/B = 10^{-2}$ ja $\tau B = 10^3$, kun kubitti on aluksi perustilallaan, kuvioista 2 nähdään, että viritystilan todennäköisyys on manipulaation jälkeen suuruusluokkaa 10^{-3} . Heilahdusten amplitudi kasvaa ajokentän amplitudin C_0/B mukana. Tämän lisäksi alueella, jossa $C_0/B \sim 10^{-2}$, havaitsin kubitin epätarkkuuden olevan verrannollinen paramterin C_0/B neliöön.

Kun $t \gg \tau$, eli $\omega \approx B$, sisätulo $|\langle \Psi_g(t) | U^\dagger(t) | \Psi_g^{rwa} \rangle|^2$ eksaktien hetkellisten perustilojen ja pyörivän aallon approksimaation antaman tilojen välillä ei ole normitettu ja oskilloi. Approksimaatio näyttää siis tuottavan merkittävän vaihe-eron eksaktiin ominaistilaan verrattuna. Tämä vaihe-ero saadaan määritettyä yhtälön (15) termien $\sigma_{\uparrow/\downarrow}$ kertoimista.

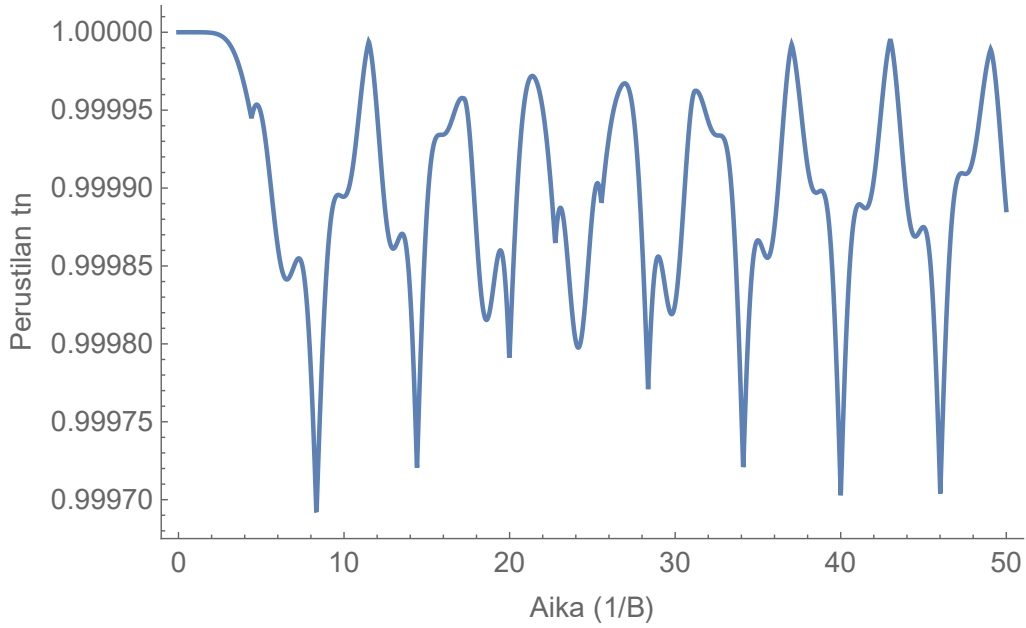
Kuvioissa 3 on esitetty kubitin perustilan todennäköisyyden aikakehitys, kun parametri τ on kuvioon 2 verrattuna yhtä kertaluokkaa pienempi (3a) ja yhtä kertaluokkaa suurempi (3b). Näiden perusteella kubitin tarkkuus pienenee lineaarisesti parametrin τB funktiona alueella $10 \leq \tau B \leq 1000$.

3.2 Lämpökylvyn kytkentä

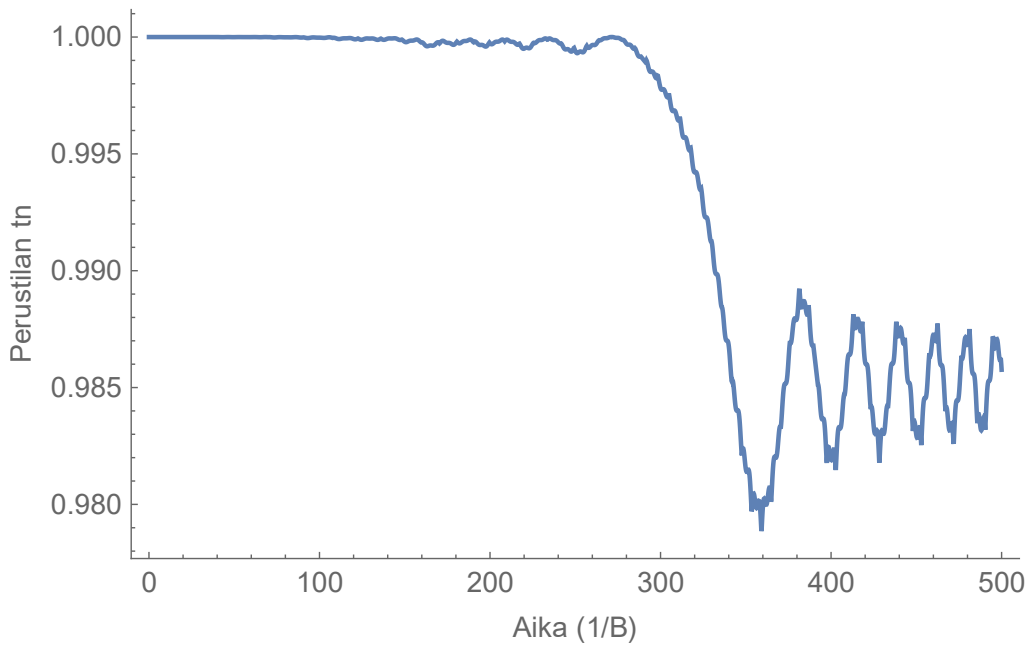
Kuviossa 4 on esitetty laskenta kvanttihyppymenetelmää käyttäen. Ajamaton systeemi on joka ajanhetkellä yksikäsitteisesti jollain kantatilallaan, mutta systeemin ajo muodostaa superpositiotiloja hyppyjen välillä.

Kvanttihyppymenetelmän algoritmissa todennäköisyys hypätä viritystilalle (perustilalle) on verrannollinen todennäköisyyteen löytää systeemi perustilalta (viritystilalta). Tällöin todennäköisyys hypätä takaisin tilalle, josta systeemi on ajautumassa pois, on huomattavasti pienempi kuin todennäköisyys hypätä tilalle, johon systeemi on siirtymässä. Kuviossa 4 ei missään vaiheessa tapahdu hyppyä sille tilalle, jonka todennäköisyys hypyn hetkellä on suurempi.

Yksi yksinkertainen avoimen systeemin mallinnus, jonka voi toteuttaa kvanttihyppymenetelmää käyttäen on termalisaatio eli systeemin saapuminen termiseen tasapainoon. Tämä on esitetty kuviossa 5, jossa systeemi alkaa perustilalta, mutta siirtyy lämmön vaikutuksesta tilanteeseen, jossa molemmat tilat ovat yhtä todennäköiset.

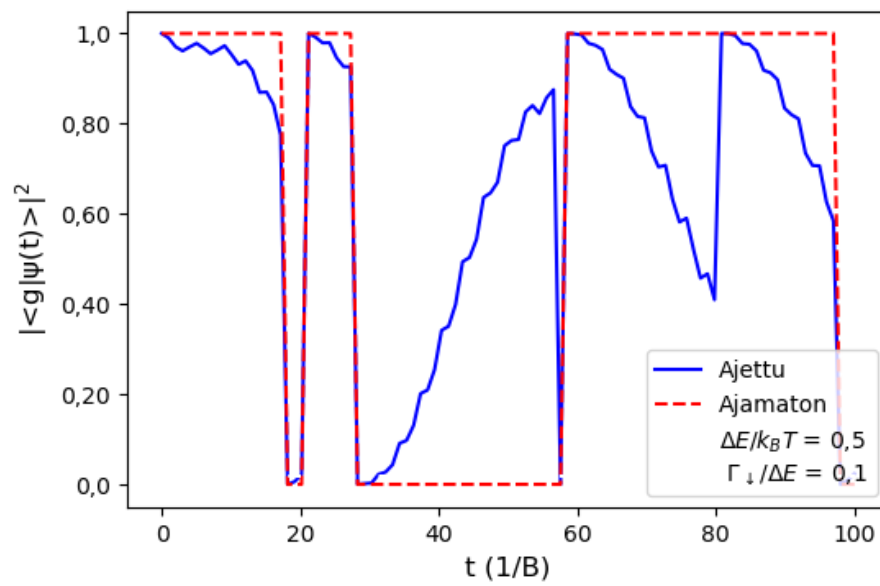


(a) Hetkellisen perustilan $\Psi_g(t)$ todennäköisyys, kun $\tau B = 10$.

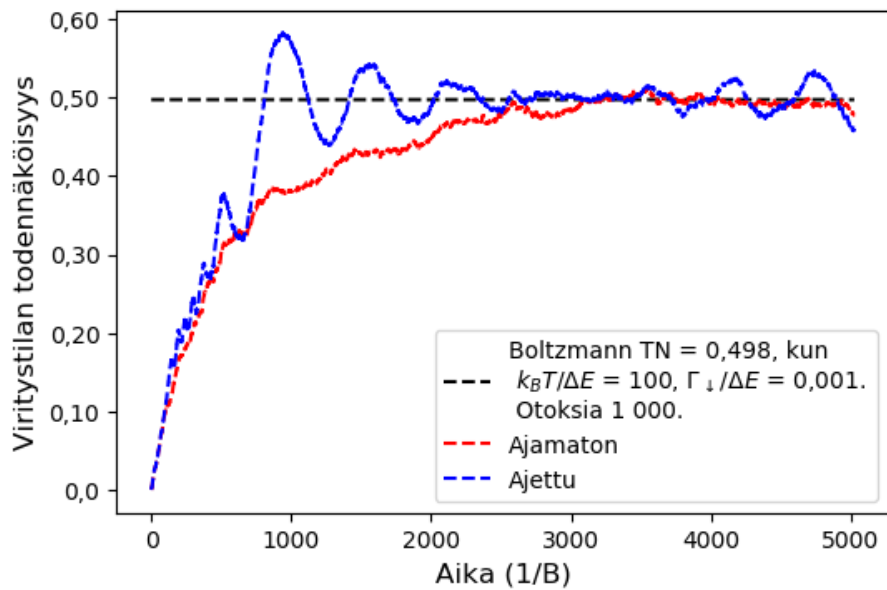


(b) Hetkellisen perustilan $\Psi_g(t)$ todennäköisyys, kun $\tau B = 1000$.

Kuvio 3. Hetkellisen perustilan todennäköisyydet ajan funktiona kahdella eri parametrin τ arvolla. Vertaamalla näitä keskenään ja kuvioon 2 nähdään, että pudottamalla parametrin τ arvoa yhtä kertaluokkaa alemmas, kubitin tilasiirtymän keskimääräinen todennäköisyys on myös yhtä kertaluokkaa pienempi. Ajokentän vahvuus on $C_0/B = 10^{-2}$, ja alkuhetkellä systeemi on Hamiltonilaisen $H(0)$ perustilalla.



Kuvio 4. Kvanttihyppysimulaatio ajetulle ja ajamattomalle systeemille. Systemin määrittelee Hamiltonin operaattori (9), ja ajokentän parametrit ovat $\frac{C_0}{B} = 10^{-1}$ ja $\tau B = 10^1$. Perus- ja viritystilojen $|g\rangle$ ja $|e\rangle$ energiaero on $\Delta E(t) \approx B\hbar$. Kuvaaajan arvot vastaavat todennäköisyyksiä mitata systeemi tilassa, jossa spin on ulkoisen magneettikentän B_z suuntainen.



Kuvio 5. Esimerkki kvanttihyppymenetelmän käytöstä termalisaation simulointiin. Kuvassa on laskettu todennäköisyys mitata systeemi tilassa $|e\rangle$, jossa spin on ulkoista vakiokenttää B_z vastaan. Keskiarvo on laskettu tuhannesta simulaatiosta sekä ajettulle että ajamattomalle systeemille. Ajon amplitudi on $C_0/B = 10^{-1}$ ja relaksaatioaika on $1/(\Gamma_{\uparrow} + \Gamma_{\downarrow}) \approx 500 1/B$. Korkeassa lämpötilassa $k_B T/(\Delta E) = 100$ termodynaamisessa tasapainossa viritystilan todennäköisyys on Boltzmannin jakaumasta $p_e \approx 0,5$.

4 Päätäntö

Työn tuloksena olen saanut joitakin kvalitatiivisia tuloksia spin-kubitien tilamanipulaatioiden tarkkuudesta hyödyntäen artikkelissa [2] esiteltyä kvanttihyppymenetelmän algoritmia.

Spin-kubitin manipulaatiossa on eriteltävissä muutamia ilmeisiä tapoja, joilla kubitin sisältämä informaatio tuhoutuu. Ensimmäinen näistä on systeemin liian voimakas ajaminen, jossa siis ajokentän amplitudia C_0/B kasvatetaan liian suureksi. Tällöin kuviossa 2 nähtävä ensimmäinen todennäköisyyden pudotus kasvaa huomattavan suureksi, ja systeemi voi oskilloida oleellisesti kantatilalta toiselle. Toisaalta, kuten kuviosta 5 nähdään, on kubitin sisältämä informaatio helposti tuhottavissa kytkemällä se voimakkaasti ympäristöönsä.

Adiabaattisen teoreeman mukaan systeemissä ei tapahdu tilasiirtymiä hetkelliseltä ominaistilalta toiselle, kunhan systeemiin kohdistuvat muutokset ovat tarpeeksi hitaita. Tämän perusteella voisi arvata, että parametrin $B\tau$ pienentäminen vähentää manipulaation tarkkuutta, koska tällöin ajokentän taajuus tuodaan nopeammin resonanssiin systeemin kanssa. Tässä esittämät tulokseni näyttivät kuitenkin päinvastaisia. En tässä vaiheessa osaa selittää, mistä tämä johtuu, joten tämän huolellisempi tutkiminen olisi mielenkiintoista.

Kvanttihyppymenetelmää käyttäen voitaisiin myös tutkia ajatun systeemin efektiivistä lämpötilaa. Laboratoriokoordinaatistossa energiatilojen ero on $\Delta E_{lab} \approx B\hbar$, kun ajokenttä on riittävän pieni. Toisaalta muunnoksella $U = \exp(-iB\sigma_z t/2)$ saadaan pyörivässä koordinaatistossa energiatilojen eroksi $\Delta E_{rot} \approx C_0\hbar$. Termisessä tasapainossa systeemin viritys- ja perustilojen todennäköisyyksien suhde on Boltzmannin jakaumasta $p_e/p_g = \exp(\Delta E/k_B T)$, joten systeemille voidaan määritellä efektiivinen lämpötila

$$T_{eff} = \frac{\Delta E}{k_B \ln(p_e/p_g)}, \quad (19)$$

missä ΔE riippuu käytetystä koordinaatistosta. Jos tilojen todennäköisyyksien suhde ei riipu käytettävästä koordinaatistosta, simulaatiosta saadaan myös pyörivässä koordinaatistossa Boltzmannin jakaumasta $p_e/p_g = \exp(\Delta E_{lab}/k_B T)$. Tällöin voidaan

yhtälön (19) mukaan todeta systeemin efektiivisen lämpötilan olevan $T_{eff} \approx TC_0/B$. Siis, kun $C_0 \ll B$, pyörivässä koordinaatistossa efektiivinen lämpötila olisi pienempi kuin laboratoriokoordinaatistossa mitattu lämpötila.

Kvanttihyppyt ovat olleet tärkeä osa kvanttimekaniikan kehitystä, sillä niitä on tutkittu empiirisesti jo 1800-luvun lopulla. Johannes Rydberg [12] tutki useiden alkuaineiden emissiospektrejä, jotka syntyvät, kun atomien elektroniset viritystilat purkautuvat emittoiden fotoneja.

Kvanttihyppymenetelmä, sellaisena kuin sitä tässä työssä on käsitelty, on alkanut kehittymään vasta noin sata vuotta myöhemmin [13, 14]. Noin kymmenen vuotta siten Hekking ja Pekola [2] esittivät tavan käsitellä ajetun systeemin termodynamiikkaa kvanttihyppymenetelmää käyttäen. Usean kvanttihyppysimulaation huomioiminen muistuttaa Richard Feynmanin kehittämää kvanttimekaniikan polkuintegraalimuotoilua [15], jossa hiukkasen todellinen polku lasketaan kaikkien mahdollisten polkujen summana.

Erityisen kiinnostava alue kvanttisysteemien tutkimuksessa on makroskooppisten systeemien kvanttitilat. Makroskooppiset kvanttisysteemit ovat olleet esillä viime vuosikymmeninä esimerkiksi mekaanisten värähtelijöiden [9] ja optisten kaviteettien tutkimuksissa [16]. Tuoreessa tutkimuksessa [17] kaksi värähtelevää mikrokokoluokan alumiinikalvoa saatiin yhdessä suprajohtavien piirien kanssa muodostamaan lomittunut makroskooppinen systeemi.

Tämän tutkielman kautta olen tutustunut kvanttihyppymenetelmään tapana mallintaa kvanttimekaniista systeemiä. Sain tämän työn aikana myös syventyä minua kiinnostavaan fysiikkaan ja kvantti-informaatioteoriaan.

Lähteet

- [1] L. de la Peña, A. Cetto ja A. Valdés-Hernández. "How fast is a quantum jump?" *Physics Letters A* 384.34, 126880 (2020). DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2020.126880>.
- [2] F. W. J. Hekking ja J. P. Pekola. "Quantum Jump Approach for Work and Dissipation in a Two-Level System". *Phys. Rev. Lett.* 111, 093602 (2013). DOI: [10.1103/PhysRevLett.111.093602](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.111.093602).
- [3] D. P. DiVincenzo. "The Physical Implementation of Quantum Computation". *Fortschritte der Physik* 48.9-11 (2000), s. 771–783. DOI: [https://doi.org/10.1002/1521-3978\(200009\)48:9/11<771::AID-PROP771>3.0.CO;2-E](https://doi.org/10.1002/1521-3978(200009)48:9/11<771::AID-PROP771>3.0.CO;2-E).
- [4] A. Laucht ym. "A dressed spin qubit in silicon". *Nature Nanotechnology* 12 (1 2017), s. 61–66. DOI: [10.1038/nnano.2016.178](https://doi.org/10.1038/nnano.2016.178).
- [5] P. A. M. Dirac. "A new notation for quantum mechanics". *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 35.3 (1939), s. 416–418. DOI: [10.1017/S0305004100021162](https://doi.org/10.1017/S0305004100021162).
- [6] W. Gerlach ja O. Stern. "Der experimentelle Nachweis der Richtungsquantelung im Magnetfeld". *Zeitschrift für Physik* 9 (1 1922), s. 349–352. DOI: [10.1007/BF01326983](https://doi.org/10.1007/BF01326983).
- [7] P. J. Mohr, B. N. Taylor ja D. B. Newell. "CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2006". *Rev. Mod. Phys.* 80 (2 2008), s. 633–730. DOI: [10.1103/RevModPhys.80.633](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.80.633).
- [8] J. Jing ja L.-A. Wu. "Decoherence and control of a qubit in spin baths: an exact master equation study". *Sci Rep* 8 (1 2018), s. 1471. DOI: [10.1038/s41598-018-19977-9](https://doi.org/10.1038/s41598-018-19977-9).
- [9] P. Rabl ym. "Strong magnetic coupling between an electronic spin qubit and a mechanical resonator". *Phys. Rev. B* 79, 041302 (4 2009). DOI: [10.1103/PhysRevB.79.041302](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.041302).

- [10] J. Sakurai ja J. Napolitano. *Modern Quantum Mechanics*. 3. painos. Cambridge: Cambridge University Press, 2021. URL: <https://ebookcentral.proquest.com> (viitattu 08.04.2021).
- [11] Z. K. Mineev ym. "To catch and reverse a quantum jump mid-flight". *Nature* 570 (2019), s. 200–204. URL: <https://doi.org/10.1038/s41586-019-1287-z>.
- [12] J. Rydberg. "Researches sur la constitution des spectres d'émission des éléments chimiques". *Kongliga Svenska Vetenskaps-Akademiens Handlingar* 23 (1889), s. 1–177. URL: <https://hdl.handle.net/2027/mdp.39015039478303?urlappend=%3Bseq=253> (viitattu 10.05.2021).
- [13] M. B. Plenio ja P. L. Knight. "The quantum-jump approach to dissipative dynamics in quantum optics". *Rev. Mod. Phys.* 70 (1998), s. 101–144. DOI: 10.1103/RevModPhys.70.101.
- [14] J. Dalibard, Y. Castin ja K. Mølmer. "Wave-function approach to dissipative processes in quantum optics". *Phys. Rev. Lett.* 68 (1992), s. 580–583. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.68.580>.
- [15] R. P. Feynman. "A space-time approach to quantum mechanics". *Rev. Mod. Phys.* 20 (1948), s. 367–387. URL: <https://authors.library.caltech.edu/47756/1/FEYrmp48.pdf> (viitattu 10.05.2021).
- [16] C. Metzger ja K. Karrai. "Cavity cooling of a microlever". *Nature* 432 (2004), s. 1002–1005. DOI: <https://doi.org/10.1038/nature03118>.
- [17] L. Mercier de Lépinay ym. "Quantum mechanics-free subsystem with mechanical oscillators". *Science* 372 (2021), s. 625–629. DOI: 10.1126/science.abf5389. URL: <https://science.sciencemag.org/content/372/6542/625>.
- [18] M. Nakahara, T. Ohmi ja M. Salomaa. *Quantum computing : From linear algebra to physical realizations*. 1. painos. New York: Taylor & Francis, 2008. URL: <https://ebookcentral.proquest.com> (viitattu 08.04.2021).