

České vysoké učení technické v Praze
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

Katedra fyziky
Obor: Matematické inženýrství



Kvantové procházky s více částicemi

Quantum walk with more particles

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Vypracoval: David Čapek
Vedoucí práce: doc. Ing. Martin Štefaňák, Ph.D.
Rok: 2023



Katedra: fyziky

Akademický rok: 2021/2022

ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

Student: David Čapek

Studijní program: Aplikace přírodních věd

Obor: Matematické inženýrství, zaměření Matematická fyzika

Název práce: Kvantové procházky s více částicemi
(česky)

Název práce: Quantum walk with more particles
(anglicky)

Pokyny pro vypracování:

- 1) Kvantová procházka jedné částice s mincí na konečných grafech a nekonečných sítích, analytické metody používané k jejich studiu - Fourierova transformace, limitní rozdělení
- 2) Kvantová procházka dvou neinteragujících částic, vztah k procházce jedné částice, vliv provázání v počátečním stavu na pravděpodobnostní rozdělení, vliv nerozlišitelnosti
- 3) Kvantová procházka dvou interagujících částic, možná analytická řešení
- 4) Diskuze vlivu měření jedné částice na dynamiku zbývajících částic

Doporučená literatura:

- [1] K. Kadian, S. Garhwal, A. Kumar: Quantum walk and its application domains: A systematic review. *Comput. Science Rev.* 41, 100419 (2021)
- [2] M. Štefaňák et al.: Directional correlations in quantum walks with two particles, *New J. Phys.* 13, 033029 (2011)
- [3] A. Ahlbrecht et al.: Molecular binding in interacting quantum walks, *New J. Phys.* 14, 073050 (2012)
- [4] A. Schreiber et al.: A 2D Quantum Walk Simulation of Two-Particle Dynamics, *Science* 336, 55 (2012)
- [5] A. Bisio et al.: Solutions of a Two-Particle Interacting Quantum Walk. *Entropy* 20, 435 (2018)
- [6] Y.-C. Jeong et al.: Experimental realization of a delayed-choice quantum walk. *Nature Comm.* 4, 2471 (2013)

Jméno a pracoviště vedoucího bakalářské práce:

doc. Ing. Martin Štefaňák, Ph.D.

Katedra fyziky, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT v Praze

Datum zadání bakalářské práce: 20.10.2021

Termín odevzdání bakalářské práce: 07.07.2022

Doba platnosti zadání je dva roky od data zadání.


.....
garant oboru


.....
vedoucí katedry




.....
děkan

V Praze dne 20.10.2021



PROHLÁŠENÍ

Já, níže podepsaný

Jméno a příjmení studenta: David Čapek

Osobní číslo: 494780

Název studijního programu (oboru): Aplikace přírodních věd (Matematické inženýrství)

prohlašuji, že jsem bakalářskou práci s názvem:

Kvantové procházky s více částicemi

vypracoval samostatně a uvedl veškeré použité informační zdroje v souladu s Metodickým pokynem o dodržování etických principů při přípravě vysokoškolských závěrečných prací.

V Praze dne 4.1.2023

.....
Čapek

podpis

Název práce:

Kvantové procházky s více částicemi

Autor: David Čapek

Studijní program: Aplikace přírodních věd

Obor: Matematické inženýrství, zaměření Matematická fyzika

Druh práce: Bakalářská práce

Vedoucí práce: doc. Ing. Martin Štefaňák, Ph.D.
Katedra Fyziky, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská,
České vysoké učení technické v Praze

Abstrakt: Tato práce se zabývá kvantovou procházkou, což je kvantový protějšek modelu náhodné procházky. V textu je zavedena kvantová procházka s jednou a dvěma částicemi v diskrétním čase na přímce s kvantovými částicemi pohybujícími se po diskrétních pozicích. S pomocí analytických metod Fourierovy analýzy a Slabé limity pak zkoumáme pravděpodobnostní rozdělení nalezení částic na jednotlivých pozicích. Dále pak v práci pojednáváme o dynamice systému interagujících částic a zaměřujeme se na bodové interakce. Výpočtem spektra evolučního operátoru nalezneme vázané stavy částic, jejichž časový vývoj lze považovat za podobný kvantové procházce molekuly. V práci také pojednáváme o experimentech s odloženou volbou. Konstruuje zde model kvantové procházky jedné částice na mřížce s odloženou volbou stavu mince. Předpovědi našeho modelu se blíže shodují s výsledky experimentálního provedení, podle kterého byl model sestaven.

Klíčová slova: Kvantová procházka, Fourierova analýza, Slabá limita, Interakce částic, Odložená volba

Title:

Quantum walk with more particles

Author: David Čapek

Abstract: The thesis deals with quantum walk which is the quantum counterpart of the random walk model. The quantum walk is here implemented with one and two particles that are propagating in discrete time steps and on discrete positions on 1D lattice. With help of Fourier analysis and Weak limit we examine the probability distribution of finding particles on individual positions. Furthermore, we discuss the dynamics of a system with interacting particles with focus on point interactions. By calculating the spectrum of the evolution operator, we find bound particle states, whose time evolution can be likened to the time evolution of molecules. We also discuss delayed choice experiments and construct a model of quantum walk of one particle on a 2D lattice with delayed choice of coin state. The theoretical predictions this model offers align well with results from the experimental setup this model was based on.

Key words: Quantum walk, Fourier analysis, Weak limit, Interacting particles, Delayed choice

Poděkování

Děkuji doc. Ing. Martinu Štefaňákovi, Ph.D. za vedení mé bakalářské práce, za ochotu a za věnovaný čas.

David Čapek

Obsah

Úvod	1
1 Kvantová procházka	3
1.1 Klasická náhodná procházka	3
1.2 Zavedení kvantové procházky	4
1.3 Počáteční pozorování	5
1.4 Fourierova analýza	6
1.5 Metoda Slabé limity	9
1.6 Vliv počátečního stavu mince	13
2 Kvantová procházka dvou částic	15
2.1 Zavedení procházky na mřížce	15
2.2 Fourierova analýza pro procházku na mřížce	18
2.3 Slabá limita částice na mřížce	21
2.4 Změna báze mince na mřížce	22
2.5 Vliv provázání	25
2.6 Vliv nerozlišitelnosti	26
2.6.1 Fermiony	27
2.6.2 Bosony	27
3 Interakce částic	29
3.1 δ -interakce	29
3.2 Poznatky z numerické simulace interakce	30
3.3 Hledání spektra interakčního evolučního operátoru	31
3.3.1 Analytické řešení vázaných stavů	31
3.3.2 Spojité spektrum evolučního operátoru - numerické odvození	32
4 Kvantová procházka s odloženou volbou	35
4.1 Úvod do konceptu odložené volby	35
4.2 Simulace experimentálního provedení	37
Závěr	41
Bibliografie	43

Úvod

Už dlouho je známo, že kvantová mechanika vysvětluje mnohé fyzikální jevy, které klasická fyzika objasnit nedokáže. S přínosem kvantové mechaniky v datové vědě je ale široká veřejnost méně obeznámena. Přitom výsledkem této *kvantizace* je kromě jiného zrychlení mnoha algoritmů otevírající cestu novým výpočetním technologiím a modelům. Což je ve „věku informace“ důležitá inovace. Jedním z modelů matematické informatiky, které mají kvantový protějšek, je náhodná procházka. Tento model je základem mnoha algoritmů v matematice a výpočetní vědě. Zkoumání jeho kvantové obdoby, tedy kvantové procházky, vede k novým meziorbovým uplatněním. Superpozice a interference umožňují chování nepozorované v klasickém případě. Různé varianty kvantové procházky tak našly využití například při hledání izomorfismů grafů, při zkoumání vázaných stavů molekul, a jako základ mnoha algoritmů v kvantové informaci až exponenciálně rychlejších oproti klasickým protějškům. [1, 2, 3]

V této práci se zaměříme na variantu kvantové procházky v diskretním čase, kde se kvantová částice přesouvá po diskretních pozicích. Nejprve ji v první kapitole zkonstruujeme na přímce. V tomto případě bude mít kvantová částice dvoudimenzionální vnitřní stupeň volnosti, a aby byl její časový vývoj unitární, bude jeden krok zprostředkováván operátorem mince následovaným posunem po přímce. Dále se budeme zabývat analytickými metodami Fourierovy analýzy a Slabé limity, které nám umožní zkoumat pravděpodobnostní rozdělení procházky.

V druhé kapitole pojednáme o kvantové procházce dvou částic. Ta bude mít čtyřdimenzionální prostor vnitřních stavů. Procházka tak bude netriviálním rozšířením předchozí varianty díky provázaným stavům částic. I pro tento systém provedeme Fourierovu analýzu a ukážeme výsledky Slabé limity. Zmíníme se také o vlivu nerozlišitelnosti částic na dynamiku systému.

Systém dále budeme modifikovat přidáním interakce mezi částicemi. Budeme zde uvažovat δ -interakci, kdy na sebe částice působí pouze nacházejí-li se na stejné pozici na přímce. Z analytického řešení časového vývoje předpovíme vznik vázaných stavů částic, kdy pomocí využití symetrií procházky se pokusíme nalézt vlastních hodnot evolučního operátoru. Provedeme také numerické odvození spojitého spektra evolučního operátoru.

V poslední kapitole nejprve na konkrétních experimentech představíme princip odložené volby (delayed choice) a vysvětlíme jejich výsledky. Poté podle experimentálního provedení zkonstruujeme kvantovou procházku s odloženou volbou. Ověříme pak náš systém porovnáním numerické simulace s výsledky studie [4].

Kapitola 1

Kvantová procházka

Cílem této kapitoly je seznámit čtenáře s modelem kvantové procházky. To lze nejjednodušeji učinit pomocí popsání klasické náhodné procházky a nahrazením klasické částice za kvantovou přejít ke kvantové procházce. Obě procházky zavedeme na nekonečné přímce s diskrétními možnými pozicemi a diskrétními časovými kroky. Hlavními zdroji této kapitoly jsou [5] a [6].

1.1 Klasická náhodná procházka

Nejjednodušší varianta tohoto modelu je náhodná procházka po přímce v diskrétním čase. V tomto případě částice putuje po diskrétních, stejně vzdálených pozicích (bodech) na přímce (tedy na 1D mřížce). V diskrétních časových krocích se může posunout o jednu pozici doleva, nebo doprava se stejnou pravděpodobností $p = \frac{1}{2}$ (jedná se tedy o vyváženou procházku). Konvenčně pozice (body) na přímce označíme indexy $x \in \mathbb{Z}$. Částice je v čase $t = 0$ umístěna v bodě $x = 0$. Pravděpodobnost výskytu částice v bodě m v čase t značíme $p(x, t)$. Tato pravděpodobnost je složena z poloviny pravděpodobnosti výskytu částice v $x - 1$ a poloviny pravděpodobnosti výskytu v $x + 1$ v předchozím kroku

$$p(x, t) = \frac{1}{2}p(x - 1, t - 1) + \frac{1}{2}p(x + 1, t - 1). \quad (1.1)$$

S počáteční podmínkou: $p(0, 0) = 1$, je pak řešení vztahu pro $p(x, t)$

$$p(x, t) = \frac{1}{2^t} \binom{t}{\frac{x+t}{2}}. \quad (1.2)$$

Je vidět, že aby byla pravděpodobnost nenulová, musí mít poloha stejnou sudost či lichost jako počet kroků. Částice se po sudém počtu kroků nemůže vyskytovat na liché pozici. Klasická procházka je tedy bipartitní. Pro velký počet kroků lze vztah 1.2 odhadnout Gaussovým rozdělením

$$p(x, t) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} e^{-\frac{x^2}{2t}}. \quad (1.3)$$

Z čehož můžeme lehce vyčíst, že střední hodnota polohy částice je 0 a střední kvadratická odchylka $\Delta x = \sqrt{t}$.

1.2 Zavedení kvantové procházky

Kvantová procházka na přímce se liší od klasické tím, že místo stochasticky se pohybující částice uvažujeme kvantovou částici a její unitární, časově diskretní vývoj stavu. Částici je po měření možné najít na některé z pozic $x \in \mathbb{Z}$, jejichž stavové vektory označíme $|x\rangle$. Hilbertův prostor tvořený z báze těchto ortonormálních vektorů označíme \mathcal{H}_P - prostor pozic.

$$\mathcal{H}_P = \text{Span}\{|x\rangle | x \in \mathbb{Z}\} = \ell^2(\mathbb{C}), \quad \langle x|y\rangle = \delta_{xy}$$

Na rozdíl od klasické částice, při časovém vývoji kvantové částice neprobíhá výběr jedné z okolních pozic, ale přechod stavu částice do superpozice okolních stavů

$$|x\rangle \rightarrow |x-1\rangle + |x+1\rangle.$$

Tento časový vývoj ale není unitární. Například vektor $|x+2\rangle$ by pak po 1 kroku přešel do superpozice $|x+1\rangle + |x+3\rangle$ a nové stavy by pak měly nenulové překrytí

$$\langle x|x+2\rangle = 0 \rightarrow (\langle x-1| + \langle x+1|)(|x+1\rangle + |x+3\rangle) = 1 \neq 0.$$

Obvyklý postup zachování unitarity je uvažovat částici s vnitřním stupněm volnosti zvaný mince [7]. V případě částice na přímce má mince 2 ortonormální stavové vektory $|L\rangle$ a $|R\rangle$ tvořící prostor mince $\mathcal{H}_C = \text{Span}\{|L\rangle, |R\rangle\} = \mathbb{C}^2$, kde $(|L\rangle, |R\rangle)$ je standardní báze. Stav částice je pak popsán kombinací vektorů z celkového prostoru

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_P \otimes \mathcal{H}_C = \ell^2(\mathbb{C}) \otimes \mathbb{C}^2. \quad (1.4)$$

Pro netriviální časový vývoj částice na ni působí nejdříve operátor mince \hat{C} na prostoru mince (hod mincí), poté je transformace pozice určena stavem mince po hod. Tato část časového vývoje je zprostředkována posunovacím operátorem \hat{S}

$$\hat{S} = \sum_{x=-\infty}^{\infty} (|x-1\rangle\langle x| \otimes |L\rangle\langle L| + |x+1\rangle\langle x| \otimes |R\rangle\langle R|).$$

Operátor mince \hat{C} může být libovolný unitární operátor na \mathcal{H}_C . Pro podobnost s klasickou náhodnou procházkou je třeba volit minci jejíž působení je nezávislé na čase i pozici stavu částice. Pro účely této práce volíme jednoparametrickou minci, která je definovaná jejím následujícím působením na bazické vektory

$$0 < \rho < 1: \quad \hat{C}(\rho)|L\rangle = \rho|L\rangle + \sqrt{1-\rho^2}|R\rangle, \quad \hat{C}(\rho)|R\rangle = \sqrt{1-\rho^2}|L\rangle - \rho|R\rangle.$$

Ve standardní bázi pak operátoru mince odpovídá matice

$$C(\rho) = \begin{pmatrix} \rho & \sqrt{1-\rho^2} \\ \sqrt{1-\rho^2} & -\rho \end{pmatrix}. \quad (1.5)$$

Speciální případ pro $\rho = \frac{1}{\sqrt{2}}$ se nazývá Hadamardova mince. Při kroku této mince je pravděpodobnost posunu doleva a doprava stejná (mince je vyvážená).

Unitární evoluční operátor jednoho kroku pak má tvar

$$\hat{U} = \hat{S} (\hat{I}_P \otimes \hat{C}(\rho)).$$

Uvažujme počáteční stav kvantové částice

$$|\psi(0)\rangle = |0\rangle \otimes |\psi_C\rangle, \quad (1.6)$$

kde je počáteční stav mince rozložen do báze prostoru mince: $|\psi_C\rangle = \psi_L|L\rangle + \psi_R|R\rangle$ s normalizační podmínkou pro amplitudy pravděpodobností: $|\psi_L|^2 + |\psi_R|^2 = 1$.

Aplikací unitárního operátoru evoluce t -krát pak získáme stav částice po t krocích

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}^t |\psi(0)\rangle. \quad (1.7)$$

Ket stavového vektoru po t krocích $|\psi(t)\rangle$ můžeme rozepsat do superpozice pravděpodobnostních amplitud $\psi_L(x, t)$, respektive $\psi_R(x, t)$, které určují pravděpodobnost nalezení částice po měření po t krocích procházky na pozici x se stavem mince $|L\rangle$, respektive $|R\rangle$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{x=-\infty}^{\infty} (\psi_L(x, t)|x\rangle|L\rangle + \psi_R(x, t)|x\rangle|R\rangle). \quad (1.8)$$

Vektor pravděpodobnostních amplitud nalezení částice po t krocích na pozici x pak je

$$\psi(x, t) = \begin{pmatrix} \psi_L(x, t) \\ \psi_R(x, t) \end{pmatrix}.$$

Pojmenování $\psi(x, t)$ a $\psi_{L/R}(x, t)$ je oprávněno následujícím vztahem pro pravděpodobnost $p(x, t)$ nalezení částice po t krocích na pozici x , který plyne ze základních postulátů kvantové mechaniky. Ty najdeme např. v [8].

$$p(x, t) = \sum_{j=L,R} |\langle x | \langle j | \psi(t) \rangle|^2$$

Což se po dosazení (1.8) zjednoduší na

$$p(x, t) = \|\psi(x, t)\|^2 = |\psi_L(x, t)|^2 + |\psi_R(x, t)|^2.$$

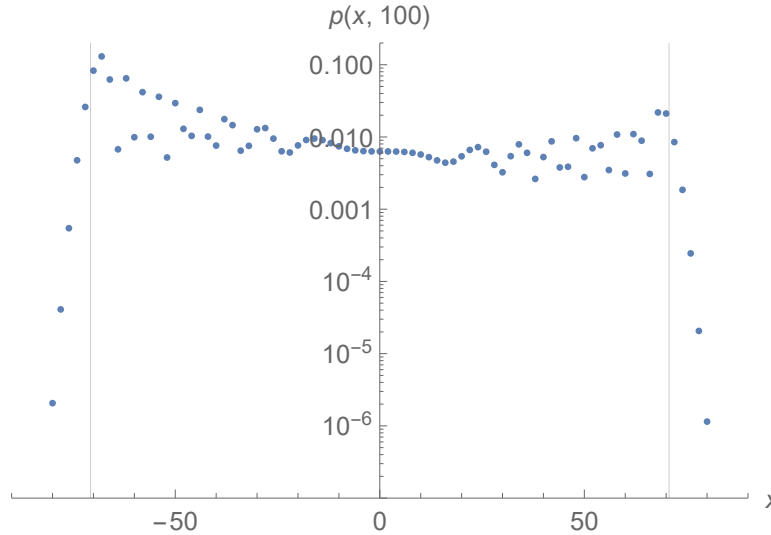
Protože jsou $\psi_{L/R}(x, t)$ nulové, pokud x a t nemají stejnou sudost či lichost, je takto zavedená kvantová procházka bipartitní podobně jako klasická náhodná procházka.

1.3 Počáteční pozorování

V této sekci na základě numerických simulací kvantové procházky na přímce s diskrétními kroky učiníme základní pozorování o časovém vývoji jejího pravděpodobnostního rozdělení. Některé tyto vlastnosti poté ověříme v dalších podkapitolách.

Na Obr:1.1 je typické zobrazení pravděpodobnostního rozdělení Hadamardovy procházky na přímce s počátečním stavem $|\psi_C\rangle = |L\rangle$ po 100 krocích. Aby šly zajímavé vlastnosti lépe rozeznat, používáme logaritmické měřítko. Z obrázku lze pozorovat následující chování pravděpodobnosti nalezení částice. Ve střední oblasti se pravděpodobnost moc nemění a je skoro konstantní. Na obou stranách se v určitém místě prudce zvyšuje a tvoří tzv. "peaky". Poté velmi rychle klesá k nule.

Lepší přehled poskytuje metoda Aproximace stacionární fáze, kterou se v rámci této práce nebudeme zabývat, jen shrneme její závěry odvozené v [5]. Analýzou integrálů tvořících řešení rovnice časového vývoje (1.19) a nalezením stacionárních bodů fáze tato metoda odhaduje chování pravděpodobnosti ve třech oblastech, které



Obrázek 1.1: Graf pravděpodobnosti nalezení částice v bodě x po 100 krocích Hadamardovy procházky na logaritmickém měřítku. Důležité jsou především peaky na pozicích $x = \pm \rho t$, vyznačených svislou čarou.

se mění spolu s počtem kroků a závisí na parametru operátoru mince.

Pro $|x| \leq \rho t$ se pravděpodobnost chová jako $p(x, t) \approx c t^{-1}$. Což je pro $x = 0$ ukázáno na Obr:1.2. Pro $|x| \approx \rho t$ nabývá pravděpodobnost peaků a můžeme ji odhadnout funkcí $p(x, t) = c t^{-\frac{2}{3}}$. To je zobrazeno na Obr:1.3. Z tohoto je patrné, že peaky se od sebe každým krokem vzdalují "rychlostí" ρ . A nakonec pravděpodobnost vně peaků, pro $|x| \geq \rho t$. Z metody Aproximace stacionární fáze vyplývá, že zde pravděpodobnost klesá exponenciálně $p(x, t) \approx c e^{-d t}$. Toto vystihuje Obr:1.4.

1.4 Fourierova analýza

Pomocí metody Fourierovy analýzy dle postupu v [9] a [5] nyní vyřešíme časový vývoj (1.7) pro procházku s jednoparametrickou mincí (1.5). Tuto metodu lze použít díky translační invarianci kvantové procházky po přímce. Fourierovou transformací získáme diagonalizovatelnou matici evolučního operátoru. Z vlastních vektorů a čísel této matice popíšeme časový průběh procházky v hybnostní reprezentaci a zpětnou Fourierovou transformací získáme řešení časové rovnice.

Rozdělením operátoru mince (1.5) na matice

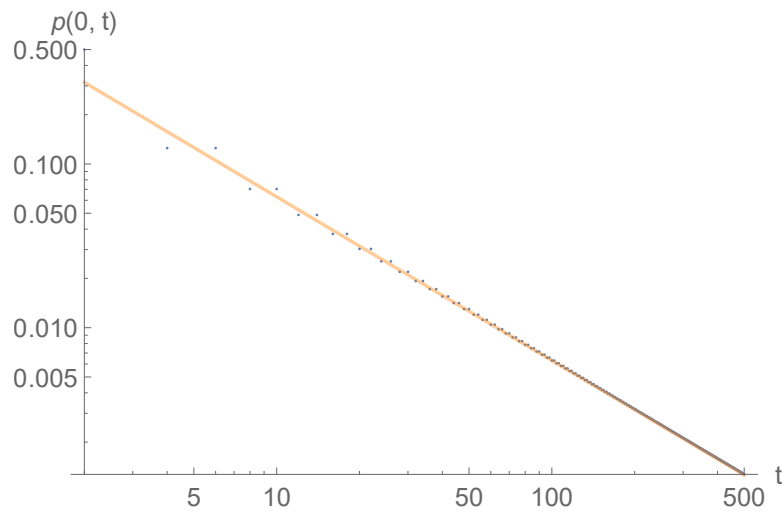
$$C_L(\rho) = \begin{pmatrix} \rho & \sqrt{1-\rho^2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad C_R(\rho) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \sqrt{1-\rho^2} & -\rho \end{pmatrix},$$

můžeme přepsat rovnici časového vývoje na systém rovnic

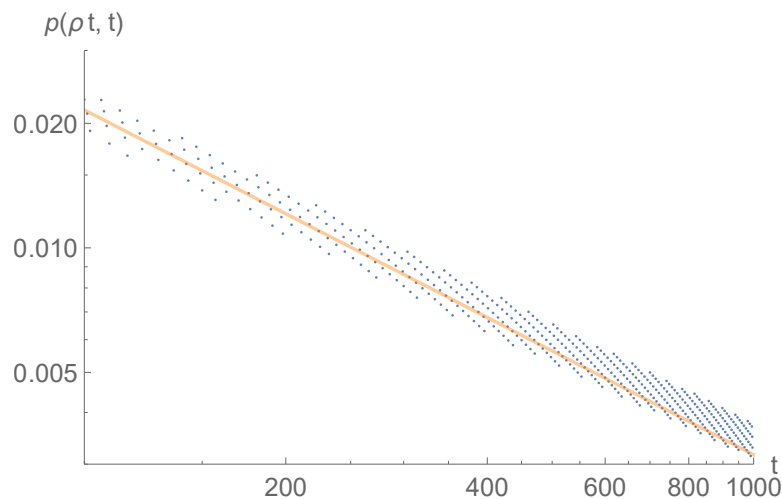
$$\forall x \in \mathbb{Z}, \quad \psi(x, t) = C_L(\rho)\psi(x+1, t-1) + C_R(\rho)\psi(x-1, t-1). \quad (1.9)$$

Které jsou podobné rovnici pro pravděpodobnost výskytu klasické částice v dané pozici (1.1), ale počítají s amplitudami pravděpodobností.

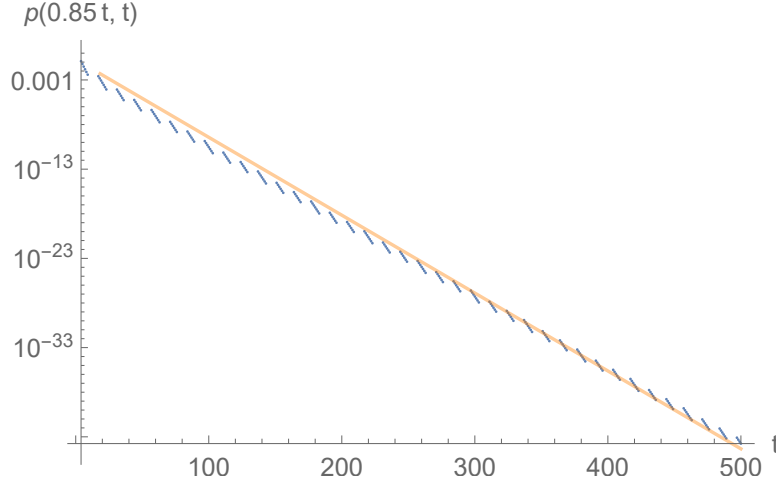
Pro účely tohoto postupu definujeme Fourierovu transformaci \hat{F} jako isometrii mezi Hilbertovým prostorem stavu částice (1.4) a Hilbertovým prostorem dvojic kvadraticky integrovatelných komplexních funkcí na jednotkové kružnici $L^2((0, 2\pi), dk) \otimes \mathbb{C}^2$.



Obrázek 1.2: Numerická aproximace pravděpodobnosti nalezení částice v počátku po t krocích $p(0, t)$. Pro zobrazení asymptotického chování jsou na grafu data v obou osách zobrazena v logaritmické stupnici. Oranžovou čarou je pak vyznačen odhad podle Aproximace stacionární fáze $p(x, t) \approx c t^{-1}$.



Obrázek 1.3: Numerická aproximace pravděpodobnosti nalezení částice na pozici $x \approx \rho t$ po t krocích $p(\rho t, t)$. Opět jsou osy grafu v logaritmickém měřítku pro lepší vizualizaci dat. Oranžovou čarou je pak vyznačen odhad podle Aproximace stacionární fáze $p(x, t) = c t^{-\frac{2}{3}}$.



Obrázek 1.4: Numerická aproximace pravděpodobnosti nalezení částice na pozici $x \approx 0.85t$ po t krocích. Což je pro zde zobrazenou Hadamardovu procházku vně peaků. Na tomto grafu používáme logarimetrické měřítko pro hodnoty pravděpodobností výskytu. Oranžovou čarou je pak vyznačen odhad podle Aproximace stacionární fáze $p(x, t) \approx c e^{-d t}$.

Mějme $\psi \in l^2(\mathbb{C}) \otimes \mathbb{C}^2$, kde $\psi = \{\psi(x)\}_{x=-\infty}^{\infty}$, $\psi(x) \in \mathbb{C}^2$, $\sum_x \|\psi(x)\|^2 < \infty$. Pak je Fourierova transformace ψ definovaná vztahem

$$\tilde{\psi}(k) = (\hat{F}\psi)(k) = \sum_{x=-\infty}^{\infty} e^{ixk} \psi(x).$$

Vynásobením (1.9) e^{ixk} a sečtením přes všechna x získáme

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(k, t) &= e^{-ik} C_L(\rho) \tilde{\psi}(k, t-1) + e^{ik} C_R(\rho) \tilde{\psi}(k, t-1) \\ &= D(k) C(\rho) \tilde{\psi}(k, t-1) \end{aligned} \quad (1.10)$$

$$= \tilde{U}(k, \rho) \tilde{\psi}(k, t-1). \quad (1.11)$$

Zde je matice $\tilde{U}(k, \rho)$ transformací evolučního operátoru \hat{U}

$$\tilde{U}(k, \rho) = \begin{pmatrix} e^{-ik} \rho & e^{-ik} \sqrt{1-\rho^2} \\ e^{ik} \sqrt{1-\rho^2} & e^{ik} \rho \end{pmatrix}, \quad \rho \in (0, 1). \quad (1.12)$$

Počáteční stav (1.6) se transformuje na vektor nezávislý na k

$$\tilde{\psi}(k, 0) = \sum_{x=-\infty}^{\infty} e^{ixk} \psi(x, 0) = e^{i0k} \begin{pmatrix} \psi_L(0, 0) \\ \psi_R(0, 0) \end{pmatrix} = \psi_C.$$

Ze vztahu (1.11) můžeme opakovanou aplikací evolučního operátoru zjistit celkový vývoj z počátečního stavu

$$\tilde{\psi}(k, t) = \tilde{U}^t(k, \rho) \tilde{\psi}(k, 0). \quad (1.13)$$

Diagonalizováním matice $\tilde{U}(k, \rho)$ získáme řešení této rovnice. Z diagonalizace obdržíme vlastní čísla

$$\lambda_1(k) = e^{-i\omega(k)}, \quad \lambda_2(k) = -e^{i\omega(k)}, \quad (1.14)$$

kde fáze $\omega(k)$ je dána vztahem

$$\omega(k) = \arcsin(\rho \sin(k)), \quad \rho \in (0, 1).$$

A jejich vlastní vektory jsou

$$\begin{aligned} v_1(k) &= \frac{1}{n_1(k)} \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{\rho e^{i(k-\omega(k))}}{\sqrt{1-\rho^2}} \end{pmatrix} \\ v_2(k) &= \frac{1}{n_2(k)} \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{\rho e^{i(k+\omega(k))}}{\sqrt{1-\rho^2}} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (1.15)$$

kde normalizační faktor $n_{1/2}(k)$ je

$$n_{1/2}(k) = \sqrt{\frac{2 \mp 2\rho \cos(k \mp \omega(k))}{1 - \rho^2}}.$$

Z těchto výrazů pak můžeme získat řešení rovnice časového vývoje kvantové procházky ve Fourierově transformaci (v p -reprezentaci) (1.13)

$$\tilde{\psi}(k, t) = \begin{pmatrix} v_1(k) & v_2(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1(k) & 0 \\ 0 & \lambda_2(k) \end{pmatrix}^t \begin{pmatrix} v_1(k) \\ v_2(k) \end{pmatrix} \tilde{\psi}(k, 0) \quad (1.16)$$

$$= e^{-i\omega(k)t} v_1(k) f_1(k) + (-1)^t e^{i\omega(k)t} v_2(k) f_2(k), \quad (1.17)$$

kde $f_{1/2}(k, \rho)$ je skalární součin

$$f_{1/2}(k) = \left(v_{1/2}(k), \tilde{\psi}(k, 0) \right).$$

Inverzní Fourierovou transformací, kterou definujeme jako

$$\psi(x) = (\hat{F}^{-1} \tilde{\psi})(x) = \int_0^{2\pi} \frac{dk}{2\pi} e^{-ixk} \tilde{\psi}(k), \quad (1.18)$$

obdržíme řešení rovnice časového vývoje v x -reprezentaci

$$\psi(x, t) = I_1(x, t) + (-1)^t I_2(x, t), \quad (1.19)$$

ve kterém mají integrály $I_{1/2}(x, t)$ tvar

$$I_{1/2}(x, t) = \int_0^{2\pi} \frac{dk}{2\pi} e^{-ixk \mp i\omega(k, \rho)t} v_{1/2}(k) f_{1/2}(k). \quad (1.20)$$

1.5 Metoda Slabé limity

Nyní pomocí postupu z [5] aproximujeme pravděpodobnostní rozdělení $p(x, t)$ jednoparametrické kvantové procházky využitím teorému slabé limity. Který je formulován v [10].

Jak ukážeme, momenty přeškálované pozice - pseudorychlosti: $\frac{x}{t}$ slabě konvergují pro velký počet kroků $t \rightarrow +\infty$ k náhodné proměnné v . Po nalezení tvaru limity hustoty v (pravděpodobnostní rozdělení v) ji použijeme k aproximaci $p(x, t)$.

Vztah pro n -tý moment pseudorychlosti je

$$\left\langle \left(\frac{x}{t} \right)^n \right\rangle = \frac{1}{t^n} \langle \hat{X}^n \rangle = \frac{1}{t^n} \langle \psi(t) | \hat{X}^n | \psi(t) \rangle. \quad (1.21)$$

Zde operátor polohy \hat{X} působí na stavový vektor $\psi(t)$ způsobem

$$\hat{X}|\psi(t)\rangle = \sum_{x=-\infty}^{\infty} x (\psi_L(x,t)|x\rangle|L\rangle + \psi_R(x,t)|x\rangle|R\rangle).$$

Použitím Fourierovy transformace přepíšeme a zjednodušíme rovnici. Tím se operátor polohy změní na diferenciální operátor (operátor polohy v hybnostní reprezentaci): $\hat{F}\hat{X}\hat{F}^{-1} = i\frac{d}{dk}$ a stavový vektor $|\psi(t)\rangle$ na $|\tilde{\psi}(t)\rangle$, kde $\tilde{\psi}(t)$ je řešením rovnice časového vývoje v p -reprezentaci (1.16). Výsledkem je následující rovnice

$$\left\langle \left(\frac{x}{t} \right)^n \right\rangle = \frac{1}{t^n} \langle \tilde{\psi}(t) | \hat{F} \hat{X}^n \hat{F}^{-1} | \tilde{\psi}(t) \rangle = \frac{1}{t^n} \int_0^{2\pi} \frac{dk}{2\pi} \tilde{\psi}^\dagger(k,t) \left(i \frac{d}{dk} \right)^n \tilde{\psi}(k,t). \quad (1.22)$$

Derivací $\tilde{\psi}(k,t)$ v integrandu v něm vzniknou jen 2 členy s nejvyšším, n -tým řádem času

$$\begin{aligned} \left(i \frac{d}{dk} \right)^n \tilde{\psi}(k,t) &= \\ &= \left(\frac{d\omega(k)}{dk} \right)^n \left(e^{-i\omega(k)t} v_1(k) f_1(k) + (-1)^{t+n} e^{i\omega(k)t} v_2(k) f_2(k) \right) t^n + O(t^{n-1}). \end{aligned} \quad (1.23)$$

Protože vlastní vektory $v_{1/2}(k)$ evolučního operátoru ve Fourierově obraze tvoří orthonormální soubor, nabude integrand tvaru

$$\frac{1}{2\pi} \tilde{\psi}^\dagger(k,t) \left(i \frac{d}{dk} \right)^n \tilde{\psi}(k,t) = \frac{t^n}{2\pi} \left(\frac{d\omega(k)}{dk} \right)^n (|f_1(k)|^2 + (-1)^n |f_2(k)|^2) + O(t^{n-1}).$$

Vztah pro n -tý moment pseudorychlosti je tedy

$$\left\langle \left(\frac{x}{t} \right)^n \right\rangle = \int_0^{2\pi} \frac{dk}{2\pi} \left(\frac{d\omega(k)}{dk} \right)^n (|f_1(k)|^2 + (-1)^n |f_2(k)|^2) + O(t^{-1}). \quad (1.24)$$

Z tvaru vlastních vektorů (1.15) spočítáme

$$\begin{aligned} |f_1(k)|^2 + |f_2(k)|^2 &= 1 \\ |f_1(k)|^2 - |f_2(k)|^2 &= \frac{(\rho(|\psi_L|^2 - |\psi_R|^2) + \sqrt{1-\rho^2}(\psi_R\bar{\psi}_L + \psi_L\bar{\psi}_R)) \cos k}{\sqrt{1-\rho^2 \sin^2 k}} \\ &+ \frac{\text{Im}(\psi_R\bar{\psi}_L + \psi_L\bar{\psi}_R) \sqrt{1-\rho^2} \sin k}{\sqrt{1-\rho^2 \sin^2 k}}. \end{aligned} \quad (1.25)$$

Pro zjednodušení integrálu substitucí zvolíme vhodnou proměnnou $v \in (-\rho, \rho)$

$$v = \frac{d\omega(k)}{dk} = \frac{\rho \cos k}{\sqrt{1-\rho^2 \sin^2(k)}}.$$

Z čehož odvodíme

$$dk = \frac{\sqrt{1 - \rho^2} dv}{(1 - v^2)\sqrt{\rho^2 - v^2}}.$$

Po substituci najdeme momenty pseudorychlosti pro $t \rightarrow \infty$. Z tvaru (1.24) a (1.25) odvodíme sudé asymptotické momenty

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \left\langle \left(\frac{x}{t} \right)^{2n} \right\rangle = \int_{-\rho}^{\rho} \frac{v^{2n} \sqrt{1 - \rho^2}}{\pi(1 - v^2)\sqrt{\rho^2 - v^2}} dv.$$

A liché asymptotické momenty

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \left\langle \left(\frac{x}{t} \right)^{2n+1} \right\rangle = - \int_{-\rho}^{\rho} \frac{v^{2n+2} \left(|\psi_L|^2 - |\psi_R|^2 + \sqrt{\frac{1}{\rho^2} - 1} (\bar{\psi}_L \psi_R + \bar{\psi}_R \psi_L) \right) \sqrt{1 - \rho^2}}{\pi(1 - v^2)\sqrt{\rho^2 - v^2}} dv.$$

Díky symetrickému intervalu můžeme momenty zapsat v jednom integrálu

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \left\langle \left(\frac{x}{t} \right)^n \right\rangle = \int_{-\rho}^{\rho} v^n \sqrt{1 - \rho^2} \frac{1 - v \left(|\psi_L|^2 - |\psi_R|^2 + \sqrt{\frac{1}{\rho^2} - 1} (\bar{\psi}_L \psi_R + \bar{\psi}_R \psi_L) \right)}{\pi(1 - v^2)\sqrt{\rho^2 - v^2}} dv. \quad (1.26)$$

Z teorie teorému slabé limity [10] tak pro $t \rightarrow \infty$ pseudorychlost $\frac{x}{t}$ slabě konverguje k náhodné veličině v . Asymptotické momenty (1.26) použijeme v metodě momentů a zjistíme tak limitu hustoty $\omega(v)$, tedy pravděpodobnostní rozdělení v . Tato limita hustoty bude jednoznačně určena kvůli omezenému rozsahu proměnné v .

$$\omega(v) = \frac{\mathcal{M}(\psi_L, \psi_R, v) \sqrt{1 - \rho^2}}{\pi(1 - v^2)\sqrt{\rho^2 - v^2}} \quad (1.27)$$

$$\mathcal{M}(\psi_L, \psi_R, v) = 1 - v \left(|\psi_L|^2 - |\psi_R|^2 + \sqrt{\frac{1}{\rho^2} - 1} (\bar{\psi}_L \psi_R + \bar{\psi}_R \psi_L) \right), \quad (1.28)$$

kde je $\mathcal{M}(\psi_L, \psi_R, v)$ označení váhové funkce obsahující veškerou závislost $\omega(v)$ na počátečním stavu.

Vzápětí využijeme limitu hustoty pro odhad pravděpodobnostního rozdělení kvantové procházky. Pro tyto účely je vhodné si uvědomit, že $\omega(v)$ je správně normalizovaná

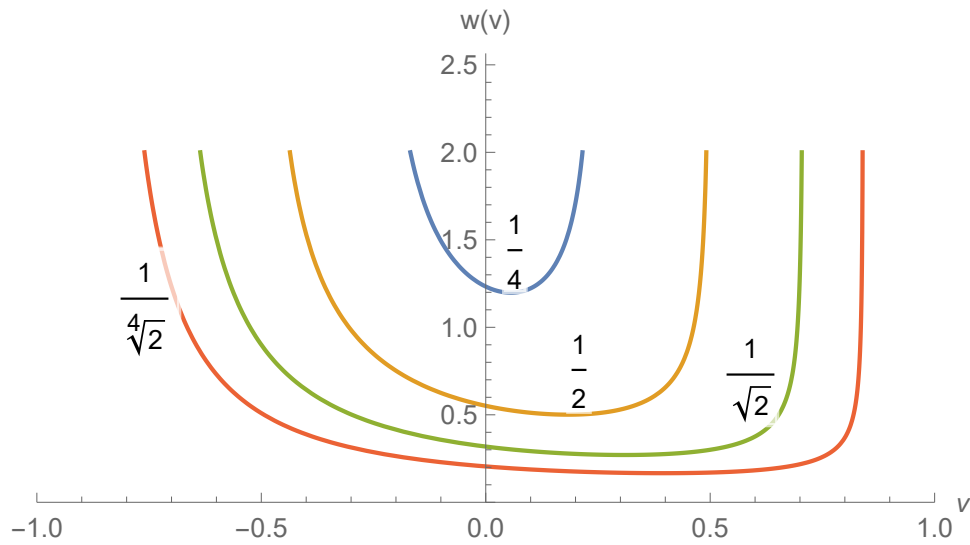
$$\int_{-\rho}^{\rho} w(v) dv = 1, \quad \forall \psi_C, \forall \rho \in (0, 1).$$

Pravděpodobnostní rozdělení pro kvantovou procházku jedné částice s jednoparametrickou mincí $C(\rho)$ aproximujeme funkcí

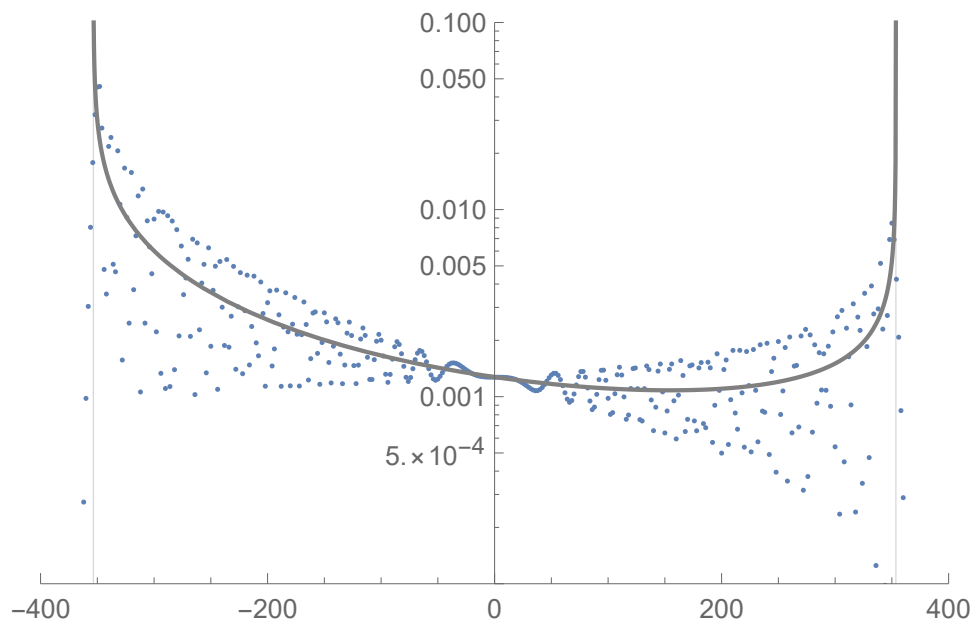
$$p(x, t) = \frac{2}{t} \omega \left(\frac{x}{t} \right), \quad (1.29)$$

kde je 2 v koeficientu díky bipartitě kvantové procházky. V každém kroku je totiž jen v polovině možných pozic na přímce pravděpodobnost nenulová.

Z definičního vztahu $w(v)$ (1.27) je zřejmé, že pro $v = \pm \rho$ limita hustoty diverguje, jak je vidět na Obr:1.5. Což znamená, že $w(\frac{x}{t})$ diverguje pro $x = \pm \rho t$. Toto chování odpovídá "peakům" pravděpodobnosti $p(x, t)$.



Obrázek 1.5: Limita hustoty $w(v)$ pro procházku s $\rho = \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{4\sqrt{2}}$ pro počáteční stav $|\psi\rangle = |L\rangle$. $w(v)$ diverguje pro $v \rightarrow \pm\rho$.



Obrázek 1.6: Demonstrace aproximace kvantové procházky pomocí limity hustoty. Na obrázku je numerická simulace pravděpodobnostního rozdělení Hadamardovy procházky na přímce po 500 krocích s počátečním stavem mince $|\psi_C\rangle = |L\rangle$. Šedou je vyznačena aproximace pomocí limity hustoty $\omega(v)$ podle (1.29). Ta diverguje pro $x = -\rho t, \rho t$ - hodnoty vyznačené svislými čarami. Za těmito hodnotami pravděpodobnostní rozdělení klesá exponenciálně (Obr:1.4).

1.6 Vliv počátečního stavu mince

Zatím jsme se nevěnovali vlivu volby počátečního stavu mince. Cíl tohoto oddílu bude proto prozkoumat vliv volby $|\psi_C\rangle$ na tvar pravděpodobnostního rozdělení. Podle postupu v [11] tak pomocí vhodné volby báze prostoru mince zjednodušíme váhovou funkci $\mathcal{M}(\psi_L, \psi_R, v)$. Z jejího nového tvaru pak bude snazší vyvodit pozorování o závislosti tvaru rozdělení pravděpodobnosti kvantové procházky na přímce na počátečním stavu mince.

Váhová funkce $\mathcal{M}(\psi_L, \psi_R, v)$ závisí na ψ_L a ψ_R , což jsou amplitudy pravděpodobnosti počátečního stavu mince v bázi $(|L\rangle, |R\rangle)$ prostoru mince. Zvolme si jinou bázi. Ukáže se, že vhodnou volbou je báze tvořená vlastními vektory operátoru mince $\hat{C}(\rho)$. Označíme je $|\chi^+\rangle$ a $|\chi^-\rangle$, protože jim přísluší vlastní hodnoty $+1$ a -1 . V původní bázi je můžeme vyjádřit jako

$$|\chi^+\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt{1+\rho}|L\rangle + \frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt{1-\rho}|R\rangle, \quad |\chi^-\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt{1-\rho}|L\rangle - \frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt{1+\rho}|R\rangle$$

Pokud uvažujeme počáteční stav mince v nové bázi jako

$$|\psi_C\rangle = h^+|\chi^+\rangle + h^-|\chi^-\rangle, \quad (1.30)$$

kde amplitudy h^+, h^- splňují normalizační podmínku $|h^+|^2 + |h^-|^2 = 1$, matice přechodu P pak má tvar

$$P = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{1+\rho} & \sqrt{1-\rho} \\ \sqrt{1-\rho} & -\sqrt{1+\rho} \end{pmatrix}.$$

Původní amplitudy ze standardní báze jsou tudíž převedeny na

$$\begin{aligned} \psi_L &= \frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt{1+\rho}h^+ + \frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt{1-\rho}h^- \\ \psi_R &= \frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt{1-\rho}h^+ - \frac{\sqrt{2}}{2}\sqrt{1+\rho}h^- . \end{aligned} \quad (1.31)$$

Toto vyjádření dosadíme do váhové funkce, získáme tím značné zjednodušení

$$\mathcal{M}(h^+, h^-, v) = 1 - \frac{v}{\rho} (2|h^+|^2 - 1). \quad (1.32)$$

Z toho můžeme vyvodit pozorování o vlivu počátečního stavu mince na tvar pravděpodobnostního rozdělení. Lze ihned vidět, že váhová funkce závisí pouze na $|h^+|^2$, tedy na pravděpodobnosti toho, že počáteční stav mince bude vlastní vektor operátoru mince $|\chi^+\rangle$.

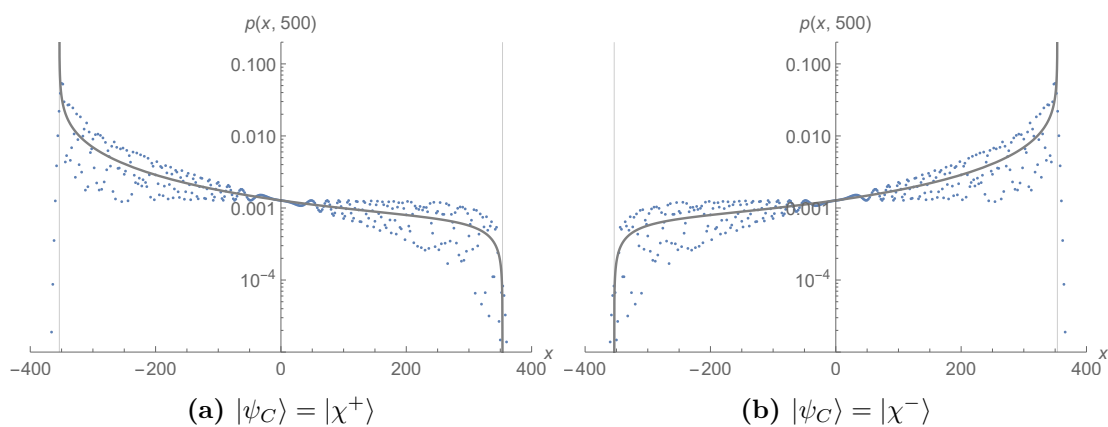
Jak jsme už zmínili, limita hustoty $\omega(v)$ diverguje pro $v = \pm\rho$ a tvoří tak peaky pravděpodobnostního rozdělení. Pro volbu $h^+ = 1, h^- = 0$ pak nabývá $\mathcal{M}(h^+, h^-, v)$ tvaru

$$\mathcal{M}(1, 0, v) = 1 - \frac{v}{\rho}.$$

Limita hustoty pak má tvar

$$\omega(v) = \frac{(1 - \frac{v}{\rho})\sqrt{1 - \rho^2}}{\pi(1 - v^2)\sqrt{\rho^2 - v^2}}.$$

Lehce si můžeme ověřit, že zatímco pro $v \rightarrow -\rho$ limita hustoty stále diverguje, pro $v \rightarrow \rho$ jde k nule kvůli rychlejšímu poklesu čitatele. To má za následek nahrazení pravého peaku poklesem limity hustoty až na nulu, což můžeme vidět vykreslené na Obr:1.7. Pro opačnou volbu $h^+ = 0$ a $h^- = 1$ bude výsledek přesně obrácený.



Obrázek 1.7: Numerická simulace pravděpodobnostního rozdělení Hadamardovy procházky na přímce po 500 krocích s vlastními vektory operátoru mince za počáteční stavy. Je vidět vymizení jednoho peaku, což popisuje i aproximace pomocí limity hustoty $\omega(v)$ vyznačená šedě.

Kapitola 2

Kvantová procházka dvou částic

Obsahem této kapitoly je procházka dvou částic na přímce. Složený systém dvou částic je obohacen oproti procházce z minulé kapitoly o provázané stavy společné mince a umožňuje tak odlišné a zajímavé chování pravděpodobnostního rozdělení, užitečného pro aplikace kvantové procházky. V této práci se omezíme na procházku tvořenou tenzorovým součinem dvou jedno-dimenzionálních procházek. Využijeme izomorfismu procházky dvou částic s jednou částicí procházející se na mřížce. Na tuto dvou-dimenzionální procházku můžeme totiž aplikovat s jen malými změnami metody z minulé kapitoly a výsledky poté převést na dvou-částicový pohled. Což nám pomůže při následném zkoumání vlivu provázanosti jejich stavů mince a jejich interakce. V této kapitole je čerpáno hlavně z [11] a [12].

2.1 Zavedení procházky na mřížce

Dvou-dimenzionální procházku s Hilbertovým prostorem možných stavů částice \mathcal{H}_2 zde zavedeme tenzorovým součinem dvou procházek na přímce

$$\mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1, \quad \text{kde } \mathcal{H}_1 = \ell^2(\mathbb{C}) \otimes \mathbb{C}^2 = \text{Span}(|m\rangle; m \in \mathbb{Z}) \otimes \text{Span}(|L\rangle, |R\rangle).$$

Což lze také přepsat jako

$$\mathcal{H}_2 = \text{Span}(|m, n\rangle; m, n \in \mathbb{Z}) \otimes \text{Span}(|LL\rangle, |LR\rangle, |RL\rangle, |RR\rangle). \quad (2.1)$$

Kde kety $|m, n\rangle$ označují pozici na mřížce, tedy souřadnice uzlů mřížky, a $|LL\rangle, |LR\rangle, |RL\rangle, |RR\rangle$ jsou bazické kety prostoru mince.

\mathcal{H}_2 je také Hilbertův prostor procházky dvou rozlišitelných částic po přímce. V tom případě jsou m a n pozice první a druhé částice na přímce a $|LL\rangle, |LR\rangle \dots$ jsou bazické stavy společného prostoru mince. Při dalším postupu se budeme soustředit na dvou-dimenzionální procházku a budeme komentovat jen důležité souvislosti s dvou-částicovou procházkou na přímce.

Evoluční operátor jednoho kroku vytvoříme opět tenzorovým součinem dvou operátorů z jedno-dimenzionální procházky

$$\hat{U}_2 = \hat{U}_1 \otimes \hat{U}_1 = \hat{S} \otimes \hat{S} \left(I \otimes \left(\hat{C}(\rho) \otimes \hat{C}(\rho) \right) \right).$$

Operátor mince můžeme označit $\hat{C}_2(\rho)$ a podle pravidel tenzorového součinu matic

je to opět jednoparametrická matice, tentokrát z $\mathbb{R}^{4,4}$

$$C_2(\rho) = C(\rho) \otimes C(\rho) = \begin{pmatrix} \rho^2 & \rho\sqrt{1-\rho^2} & \rho\sqrt{1-\rho^2} & 1-\rho^2 \\ \rho\sqrt{1-\rho^2} & -\rho^2 & 1-\rho^2 & -\rho\sqrt{1-\rho^2} \\ \rho\sqrt{1-\rho^2} & 1-\rho^2 & -\rho^2 & -\rho\sqrt{1-\rho^2} \\ 1-\rho^2 & -\rho\sqrt{1-\rho^2} & -\rho\sqrt{1-\rho^2} & \rho^2 \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

A posunovací operátor má tvar

$$\begin{aligned} \hat{S}_2 &= \hat{S} \otimes \hat{S} \\ &= \sum_{m,n=-\infty}^{\infty} |m-1, n-1\rangle\langle m, n| \otimes |LL\rangle\langle LL| + |m-1, n+1\rangle\langle m, n| \otimes |LR\rangle\langle LR| \\ &\quad + |m+1, n-1\rangle\langle m, n| \otimes |RL\rangle\langle RL| + |m+1, n+1\rangle\langle m, n| \otimes |RR\rangle\langle RR|. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Jak můžeme vidět z tvaru posunovacího operátoru, částice se vždy posune jak v horizontálním, tak ve vertikálním směru. Pohybuje se tedy po diagonálách mřížky. Ekvivalentně se jedná o pohyb dvou rozlišitelných částic o jednu pozici na přímce.

Podobně jako u procházky jedné částice na přímce uvažujeme částici lokalizovanou v počátku před začátkem časového vývoje. Určíme proto počáteční stav částice jako

$$|\psi(0)\rangle = |0, 0\rangle \otimes |\psi_C\rangle. \quad (2.4)$$

Kde $|\psi_C\rangle = \psi_{LL}|LL\rangle + \psi_{LR}|LR\rangle + \psi_{RL}|RL\rangle + \psi_{RR}|RR\rangle$ je počáteční stav "mince", jehož amplitudy pravděpodobnosti splňují normalizační podmínku $|\psi_{LL}|^2 + |\psi_{LR}|^2 + |\psi_{RL}|^2 + |\psi_{RR}|^2 = 1$.

Toto můžeme také chápat jako počáteční stav dvou rozlišitelných částic na přímce, kde obě vychází z pozice nula. $|\psi_C\rangle$ je pak jejich obecný, společný počáteční stav mince, který lze jen v případě separovaného stavu zapsat jako tenzorový součin vektorů z jedno-částicového prostoru mince, tedy jako

$$|\psi_C\rangle = |\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle, \quad |\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle \in \mathcal{H}_C. \quad (2.5)$$

Stav částice po t krocích získáme opět opakovanou aplikací evolučního operátoru \hat{U}_2 .

$$|\psi(t)\rangle = (\hat{U}_2)^t |\psi(0)\rangle. \quad (2.6)$$

Vektor pravděpodobnostních amplitud nalezení částice po t krocích na pozici (x, y) označme

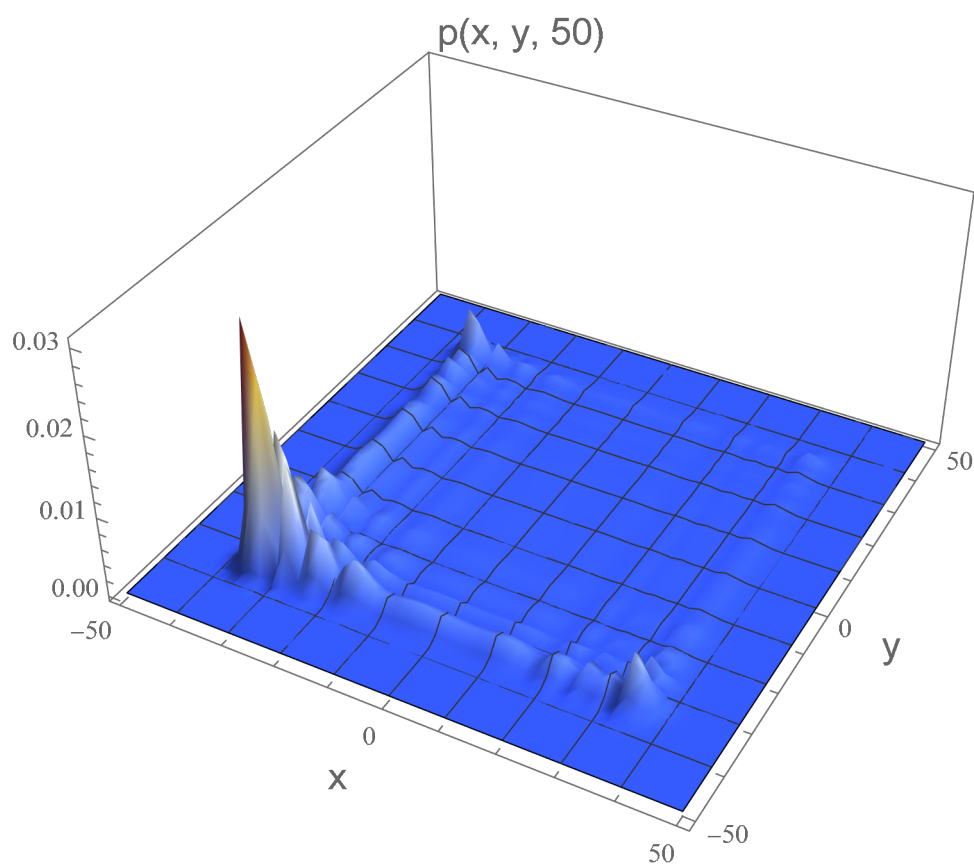
$$\psi(x, y, t) = \begin{pmatrix} \psi_{LL}(x, y, t) \\ \psi_{LR}(x, y, t) \\ \psi_{RL}(x, y, t) \\ \psi_{RR}(x, y, t) \end{pmatrix}.$$

Z jeho složek pak už můžeme získat již zmíněnou pravděpodobnost

$$p(x, y, t) = \|\psi(x, y, t)\|^2 = |\psi_{LL}(x, y, t)|^2 + |\psi_{LR}(x, y, t)|^2 + |\psi_{RL}(x, y, t)|^2 + |\psi_{RR}(x, y, t)|^2.$$

Této pravděpodobnosti lze také rozumět jako pravděpodobnosti nalezení první částice po t krocích na pozici x na přímce a nalezení druhé částice na pozici y .

Na Obr:2.1 je pro představu ukázáno pravděpodobnostní rozdělení numerické simulace procházky částice na mřížce (či procházky dvou rozlišitelných částic) s počátečním stavem $|\psi(0)\rangle = |0, 0\rangle \otimes |LL\rangle$ po 50 krocích.



Obrázek 2.1: Graf pravděpodobnostního rozdělení procházky na mřížce po 50 krocích s počátečním stavem $|\psi(0)\rangle = |0, 0\rangle \otimes |LL\rangle$. Za povšimnutí stojí peaky na pozicích, kde $|x| = |y| \approx \rho t = \frac{t}{\sqrt{2}}$.

Pokud uvažujeme separovaný počáteční stav mince $|\psi_C\rangle = |\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle$, lze počáteční stav mince zapsat jako

$$|\psi(0)\rangle = |0, \phi_1\rangle_1 \otimes |0, \phi_2\rangle_2, \quad |0, \phi_1\rangle_1, |0, \phi_2\rangle_2 \in \mathcal{H}_1. \quad (2.7)$$

Kde $|0, \phi_1\rangle_1$ je ket z Hilbertova prostoru procházky první částice po přímce a podobně pro druhou částici. Kvůli operátoru evoluce, který je tvořený tenzorovým součinem dvou evolučních operátorů jedno-částicové procházky, stav zůstává separovaný po libovolném počtu kroků. Jak ukazuje rovnice:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}_2^t |\psi(0)\rangle = \hat{U}_1^t |0, \phi_1\rangle_1 \otimes \hat{U}_1^t |0, \phi_2\rangle_2, \quad \text{kde } \hat{U}_1^t |0, \phi_i\rangle_i \in \mathcal{H}_1. \quad (2.8)$$

Pravděpodobnostní rozdělení kvantové procházky na mřížce je tak součinem dvou pravděpodobnostních rozdělení procházky na přímce

$$p(x, y, t) = p_1(x, t) \cdot p_2(y, t). \quad (2.9)$$

Kde $p_i(z, t)$ je pravděpodobnostní rozdělení procházky na přímce s počátečním stavem mince $|\phi_i\rangle$. Vlastnosti kvantové procházky na mřížce a tedy i procházky dvou částic jsou tak pro separabilní stav plně určeny procházkou jedné částice na přímce. Naopak pro provázaný počáteční stav mince pravděpodobnostní rozdělení $p(x, y, t)$ není produktem jedno-částicových pravděpodobnostních rozdělení.

Protože částice vychází z pozice $(0, 0)$ a pohybuje se jen po diagonálách, "vyhne" se všem uzlům mřížky, jejichž souřadnice nemají stejnou sudost či lichost. Pravděpodobnostní amplitudy stavu částice budou totiž na všech těchto pozicích po libovolném počtu kroků nulová.

V pozměněné podobě jako u jedno-dimenzionální procházky je dvou-dimenzionální procházka bipartitní. Po lichém počtu kroků má částice nenulové pravděpodobnostní amplitudy jen na pozicích s lichými souřadnicemi x a y a naopak.

2.2 Fourierova analýza pro procházku na mřížce

Díky translační invarianci dvou-dimenzionální kvantové procházky můžeme opět použít Fourierovu analýzu. Postup se nemění, jen je kvůli komplikovanějším výrazům vhodné použít pro nalezení vlastních vektorů a čísel výsledky (1.14),(1.15). Operátor mince $C_2(\rho)$ rozdělíme na čtyři

$$\begin{aligned} C_{LL}(\rho) &= \begin{pmatrix} \rho^2 & \rho\sqrt{1-\rho^2} & \rho\sqrt{1-\rho^2} & 1-\rho^2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & C_{RL}(\rho) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \rho\sqrt{1-\rho^2} & -\rho^2 & 1-\rho^2 & -\rho\sqrt{1-\rho^2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ C_{LR}(\rho) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \rho\sqrt{1-\rho^2} & 1-\rho^2 & -\rho^2 & -\rho\sqrt{1-\rho^2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & C_{RR}(\rho) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1-\rho^2 & -\rho\sqrt{1-\rho^2} & -\rho\sqrt{1-\rho^2} & \rho^2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Tím získáme z rovnice časového vývoje (2.6) systém rovnic

$$\begin{aligned} \psi(x, y, t) &= C_{LL}(\rho)\psi(x+1, y+1, t-1) + C_{LR}(\rho)\psi(x+1, y-1, t-1) \\ &\quad + C_{RL}(\rho)\psi(x-1, y+1, t-1) + C_{RR}(\rho)\psi(x-1, y-1, t-1), \end{aligned} \quad (2.11)$$

jejichž Fourierův obraz budeme dále zkoumat.

Fourierovu transformaci \hat{F} nyní definujeme ze stavového prostoru částice na mřížce do Hilbertova prostoru kvadraticky integrovatelných funkcí na sféře: $L^2((0, 2\pi)^2, dk_x dk_y)$. Pro vektor $\psi \in l^2(\mathbb{C}^2) \otimes \mathbb{C}^4$, kde $\psi = (\psi(x, y))$ pro $x, y \in \mathbb{R}$ a $\psi(x, y) \in \mathbb{C}^4$, $\sum_{x,y} \|\psi(x, y)\|^2 < \infty$ zavádíme Fourierovu transformaci jako

$$\tilde{\psi}(k_x, k_y) = (\hat{F}\psi)(k_x, k_y) = \sum_{x,y=-\infty}^{\infty} e^{i(xk_x+yk_y)}\psi(x, y). \quad (2.12)$$

Transformací rovnice (2.11) tak dostaneme

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(k_x, k_y, t) &= \left(e^{-i(k_x+k_y)}C_{LL}(\rho) + e^{i(-k_x+k_y)}C_{LR}(\rho) \right. \\ &\quad \left. + e^{i(k_x-k_y)}C_{RL}(\rho) + e^{i(k_x+k_y)}C_{RR}(\rho) \right) \tilde{\psi}(k_x, k_y, t-1) \\ &= D_2(k_x, k_y)C_2(\rho)\tilde{\psi}(k_x, k_y, t-1) = \tilde{U}_2(k_x, k_y, \rho)\tilde{\psi}(k_x, k_y, t-1) \end{aligned} \quad (2.13)$$

kde je matice $\tilde{U}_2(k_x, k_y, \rho)$ transformací evolučního operátoru \hat{U}

$$\tilde{U}_2(k_x, k_y, \rho) = \begin{pmatrix} e^{-i(k_x+k_y)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i(-k_x+k_y)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i(k_x-k_y)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i(k_x+k_y)} \end{pmatrix} C_2(\rho). \quad (2.14)$$

Při počáteční podmínce $\psi(x, y, 0) = 0$ pro $x \neq 0 \wedge y \neq 0$ a $\psi(0, 0, 0) = \psi_C$ se počáteční stav přetransformuje na

$$\tilde{\psi}(k_x, k_y, 0) = \sum_{x,y=-\infty}^{+\infty} e^{i(xk_x+yk_y)}\psi(0) = \psi_C = \begin{pmatrix} \psi_{LL} \\ \psi_{LR} \\ \psi_{RL} \\ \psi_{RR} \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

To znamená, že pokud aplikujeme (2.13) opakovaně, získáme vztah pro Fourierův obraz časového vývoje procházky na mřížce

$$\tilde{\psi}(k_x, k_y, t) = \tilde{U}_2^t(k_x, k_y, \rho)\psi_C, \quad (2.16)$$

který se podobá svému protějšku u procházky na přímce (1.13).

Řešení můžeme nalézt opět diagonalizováním matice \tilde{U}_2 . Přidaná dimenze procházky ale tuto úlohu činí zdlohouvou. Díky konstrukci Hilbertova prostoru možných stavů částice jako tenzorového součinu dvou prostorů procházek na přímce, můžeme vlastní vektory a čísla matice \tilde{U}_2 získat tenzorovým součinem výsledků z minulé kapitoly: (1.14) a (1.15).

Tímto způsobem dostaneme vlastní čísla

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \lambda_{1x} \cdot \lambda_{1y} = e^{-i(\omega_x+\omega_y)} & \lambda_3 &= \lambda_{2x} \cdot \lambda_{1y} = -e^{-i(\omega_x-\omega_y)} \\ \lambda_2 &= \lambda_{1x} \cdot \lambda_{2y} = -e^{i(\omega_x-\omega_y)} & \lambda_4 &= \lambda_{2x} \cdot \lambda_{2y} = e^{i(\omega_x+\omega_y)}, \end{aligned} \quad (2.17)$$

kde ω_x a ω_y označují

$$\omega_x = \arcsin(\rho \sin k_x), \quad \omega_y = \arcsin(\rho \sin k_y). \quad (2.18)$$

U nich proměnnou $k_{x/y}$ u $\omega_{x/y}$ explicitně neznačíme kvůli zkrácení zápisu. Vlastní vektory příslušející (2.17) pak jsou

$$\begin{aligned}
v_1(k_x, k_y) &= v_1(k_x) \otimes v_1(k_y) = & (2.19) \\
&= \left(\frac{1 - \rho^2}{(2 - 2\rho \cos(k_x - \omega_x))(2 - 2\rho \cos(k_y - \omega_y))} \right)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 - \rho^2} \\ -\rho + e^{i(k_y - \omega_y)} \\ -\rho + e^{i(k_x - \omega_x)} \\ \frac{\rho^2 - \rho(e^{i(k_x - \omega_x)} + e^{i(k_y - \omega_y)}) + e^{i(k_x + k_y - \omega_x - \omega_y)}}{\sqrt{1 - \rho^2}} \end{pmatrix} \\
v_2(k_x, k_y) &= v_1(k_x) \otimes v_2(k_y) = \\
&= \left(\frac{1 - \rho^2}{(2 - 2\rho \cos(k_x - \omega_x))(2 + 2\rho \cos(k_y + \omega_y))} \right)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 - \rho^2} \\ -\rho - e^{i(k_y + \omega_y)} \\ -\rho + e^{i(k_x - \omega_x)} \\ \frac{\rho^2 + \rho(-e^{i(k_x - \omega_x)} + e^{i(k_y + \omega_y)}) - e^{i(k_x + k_y - \omega_x + \omega_y)}}{\sqrt{1 - \rho^2}} \end{pmatrix} \\
v_3(k_x, k_y) &= v_2(k_x) \otimes v_1(k_y) = \\
&= \left(\frac{1 - \rho^2}{(2 + 2\rho \cos(k_x + \omega_x))(2 - 2\rho \cos(k_y - \omega_y))} \right)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 - \rho^2} \\ -\rho + e^{i(k_y - \omega_y)} \\ -\rho - e^{i(k_x + \omega_x)} \\ \frac{\rho^2 + \rho(e^{i(\omega_x + k_x)} - e^{i(k_y - \omega_y)}) - e^{i(k_x + k_y + \omega_x - \omega_y)}}{\sqrt{1 - \rho^2}} \end{pmatrix} \\
v_4(k_x, k_y) &= v_2(k_x) \otimes v_2(k_y) = \\
&= \left(\frac{1 - \rho^2}{(2 + 2\rho \cos(k_x + \omega_x))(2 + 2\rho \cos(k_y + \omega_y))} \right)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{1 - \rho^2} \\ -\rho - e^{i(k_y + \omega_y)} \\ -\rho - e^{i(k_x + \omega_x)} \\ \frac{\rho^2 + \rho(e^{i(k_x + \omega_x)} + e^{i(k_y + \omega_y)}) + e^{i(k_x + k_y + \omega_x + \omega_y)}}{\sqrt{1 - \rho^2}} \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Řešení časového vývoje kvantové procházky na mřížce ve Fourierově transformaci (2.16) obdržíme následujícím dosazením

$$\begin{aligned}
\tilde{\psi}(k_x, k_y, t) &= \begin{pmatrix} v_1(k_x, k_y) \\ v_2(k_x, k_y) \\ v_3(k_x, k_y) \\ v_4(k_x, k_y) \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} \lambda_1(k_x, k_y) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2(k_x, k_y) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3(k_x, k_y) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_4(k_x, k_y) \end{pmatrix}^t \begin{pmatrix} v_1(k_x, k_y) \\ v_2(k_x, k_y) \\ v_3(k_x, k_y) \\ v_4(k_x, k_y) \end{pmatrix} \psi_C \\
&= e^{-i(\omega_x + \omega_y)t} v_1(k_x, k_y) f_1(k_x, k_y) + (-1)^t e^{-i(\omega_x - \omega_y)t} v_2(k_x, k_y) f_2(k_x, k_y) \\
&\quad + (-1)^t e^{i(\omega_x - \omega_y)t} v_3(k_x, k_y) f_3(k_x, k_y) + e^{i(\omega_x + \omega_y)t} v_4(k_x, k_y) f_4(k_x, k_y), & (2.20)
\end{aligned}$$

kde $f_i(k_x, k_y)$ značí skalární součin $f_i(k_x, k_y) = (v_i(k_x, k_y), \psi_C)$ pro $i \in \{1, 2, 3, 4\}$.

Když pak definujeme inverzní Fourierovu transformaci vztahem

$$\psi(x, y) = (\hat{F}^{-1} \tilde{\psi})(x, y) = \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{dk_x}{2\pi} \frac{dk_y}{2\pi} e^{-i(xk_x + yk_y)} \tilde{\psi}(k_x, k_y), \quad (2.21)$$

můžeme převést řešení časového vývoje zpět do x-representace

$$\psi(x, y, t) = I_1(x, y, t) + (-1)^t I_2(x, y, t) + (-1)^t I_3(x, y, t) + I_4(x, y, t), \quad (2.22)$$

zde jsou $I_i(x, y, t)$ pro $i \in \{1, 2, 3, 4\}$ integrály

$$I_i(x, y, t) = \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{dk_x}{2\pi} \frac{dk_y}{2\pi} \xi_i v_i(k_x, k_y) f_i(k_x, k_y), \quad \text{kde} \quad \begin{aligned} \xi_1 &= e^{-i(xk_x + yk_y + \omega_x + \omega_y)t} \\ \xi_2 &= e^{-i(xk_x + yk_y + \omega_x - \omega_y)t} \\ \xi_3 &= e^{-i(xk_x + yk_y - \omega_x + \omega_y)t} \\ \xi_4 &= e^{-i(xk_x + yk_y - \omega_x - \omega_y)t}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Na tvaru řešení lze vidět velkou podobnost s případem procházky po přímce. Můžeme tedy očekávat podobné vlastnosti.

2.3 Slabá limita částice na mřížce

Použitím metody slabé limity nyní najdeme aproximaci pravděpodobnostního rozdělení procházky na mřížce. Díky již zmíněnému izomorfismu procházek bude tato aproximace i limitou rozdělení procházky dvou rozlišitelných částic na přímce. Postup je zde analogický postupu v podkapitole 1.5, znovu tedy sledujeme kroky z [5]. Pro ověření mezivýsledků bylo čerpáno také z [12].

Ve vzorci momentů pseudorychlostí $\frac{x}{t}$ a $\frac{y}{t}$

$$\left\langle \left(\frac{x}{t} \right)^n \left(\frac{y}{t} \right)^m \right\rangle = \frac{1}{t^{n+m}} \langle \hat{X}^n \hat{Y}^m \rangle = \frac{1}{t^{n+m}} \langle \psi(t) | \hat{X}^n \hat{Y}^m | \psi(t) \rangle \quad (2.24)$$

přejdeme do hybnostní reprezentace Fourierovou transformací a dosadíme za $\tilde{\psi}(k_x, k_y, t)$ z výsledku Fourierovy analýzy (2.20)

$$\begin{aligned} \left\langle \left(\frac{x}{t} \right)^n \left(\frac{y}{t} \right)^m \right\rangle &= \frac{1}{t^{n+m}} \int_0^{2\pi} \frac{dk_x}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{dk_y}{2\pi} \tilde{\psi}^\dagger(k_x, k_y, t) \left(i \frac{d}{dk_x} \right)^n \left(i \frac{d}{dk_y} \right)^m \tilde{\psi}(k_x, k_y, t) \\ &= \int_0^{2\pi} \frac{dk_x}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{dk_y}{2\pi} \left(i \frac{d\omega_x}{dk_x} \right)^n \left(i \frac{d\omega_y}{dk_y} \right)^m g(n, m) + O(t^{-1}), \end{aligned} \quad (2.25)$$

kde $g(n, m) := |f_1|^2 + (-1)^m |f_2|^2 + (-1)^n |f_3|^2 + (-1)^{n+m} |f_4|^2$ a $f_i = (v_i, \psi_C)$. Integrační proměnné zaměníme za v_x a v_y podle substitucí

$$\begin{aligned} v_x &= \frac{d\omega_x}{dk_x} = \frac{\rho \cos k_x}{\sqrt{1 - \rho^2 \sin^2 k_x}}, & v_y &= \frac{d\omega_y}{dk_y} = \frac{\rho \cos k_y}{\sqrt{1 - \rho^2 \sin^2 k_y}}, \\ dk_x &= \frac{\sqrt{1 - \rho^2} dv_x}{(1 - v_x^2) \sqrt{\rho^2 - v_x^2}}, & dy_x &= \frac{\sqrt{1 - \rho^2} dv_y}{(1 - v_y^2) \sqrt{\rho^2 - v_y^2}}, \end{aligned}$$

kde $v_x, v_y \in (-\rho, \rho)$.

Momenty mají výrazně jiné tvary podle sudosti či lichosti n a m . Což je patrné z výrazu $g(n, m)$. Po dosazení za $\psi_C = (\psi_{LL}, \psi_{LR}, \psi_{RL}, \psi_{RR})^T$ a s využitím normalizační podmínky amplitud pravděpodobnosti počátečního stavu je možné pro jednotlivé možnosti kombinací sudosti a lichosti n a m výraz $g(n, m)$ značně zjednodušit.

$$g(2n, 2m) = 1 \quad (2.26)$$

$$\begin{aligned} g(2n, 2m+1) &= -v_y \left(|\psi_{LL}|^2 - |\psi_{LR}|^2 + |\psi_{RL}|^2 - |\psi_{RR}|^2 + \frac{\sqrt{1-\rho^2}}{\rho} (\psi_{LL}\overline{\psi_{LR}} + \psi_{LR}\overline{\psi_{LL}} + \psi_{RL}\overline{\psi_{RR}} + \psi_{RR}\overline{\psi_{RL}}) \right) \\ g(2n+1, 2m) &= -v_x \left(|\psi_{LL}|^2 + |\psi_{LR}|^2 - |\psi_{RL}|^2 - |\psi_{RR}|^2 + \frac{\sqrt{1-\rho^2}}{\rho} (\psi_{LL}\overline{\psi_{RL}} + \psi_{RL}\overline{\psi_{LL}} + \psi_{LR}\overline{\psi_{RR}} + \psi_{RR}\overline{\psi_{LR}}) \right) \\ g(2n+1, 2m+1) &= v_x v_y \left(|\psi_{LL}|^2 - |\psi_{LR}|^2 - |\psi_{RL}|^2 + |\psi_{RR}|^2 + \frac{1-\rho^2}{\rho^2} (\psi_{LL}\overline{\psi_{RR}} + \psi_{RR}\overline{\psi_{LL}} + \psi_{LR}\overline{\psi_{RL}} + \psi_{RL}\overline{\psi_{LR}}) \right) \\ &\quad + v_x v_y \frac{\sqrt{1-\rho^2}}{\rho} (\psi_{LL}\overline{\psi_{LR}} + \psi_{LR}\overline{\psi_{LL}} + \psi_{LL}\overline{\psi_{RL}} + \psi_{RL}\overline{\psi_{LL}} - \psi_{LR}\overline{\psi_{RR}} - \psi_{RR}\overline{\psi_{LR}} - \psi_{RL}\overline{\psi_{RR}} - \psi_{RR}\overline{\psi_{RL}}) \end{aligned}$$

V tomto zápisu $g(n, m)$ chybí u interferenčních členů imaginární část koeficientu. Tato byla z důvodu přehlednosti zápisu vynechána, protože se vždy jedná o lichou funkci v v_x či v_y , a tak je její integrál přes symetrický interval nulový.

Ze vztahů (2.25) a (2.26) pomocí teoremu slabé limity pro dvou-dimenzionální kvantovou procházku [10] dojdeme k závěru, že pseudorychlosti $\frac{x}{t}$ a $\frac{y}{t}$ slabě konvergují při $t \rightarrow \infty$ k náhodným veličinám v_x a v_y .

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \left\langle \left(\frac{x}{t} \right)^n \left(\frac{y}{t} \right)^m \right\rangle = \int_{-\rho}^{\rho} dv_x \int_{-\rho}^{\rho} dv_y v_x^n v_y^m \frac{(1-\rho^2)\mathcal{M}(\psi_C, v_x, v_y)}{\pi^2(1-v_x^2)\sqrt{\rho^2-v_x^2}(1-v_y^2)\sqrt{\rho^2-v_y^2}}, \quad (2.27)$$

kde váhová funkce, která jediná z celého integrálu závisí na volbě počátečního stavu ψ_C má složitý tvar

$$\mathcal{M}(\psi_C, v_x, v_y) = g(2n, 2m) + g(2n, 2m+1) + g(2n+1, 2m) + g(2n+1, 2m+1). \quad (2.28)$$

Z metody momentů je určena limita hustoty $\omega(v_x, v_y)$ jako

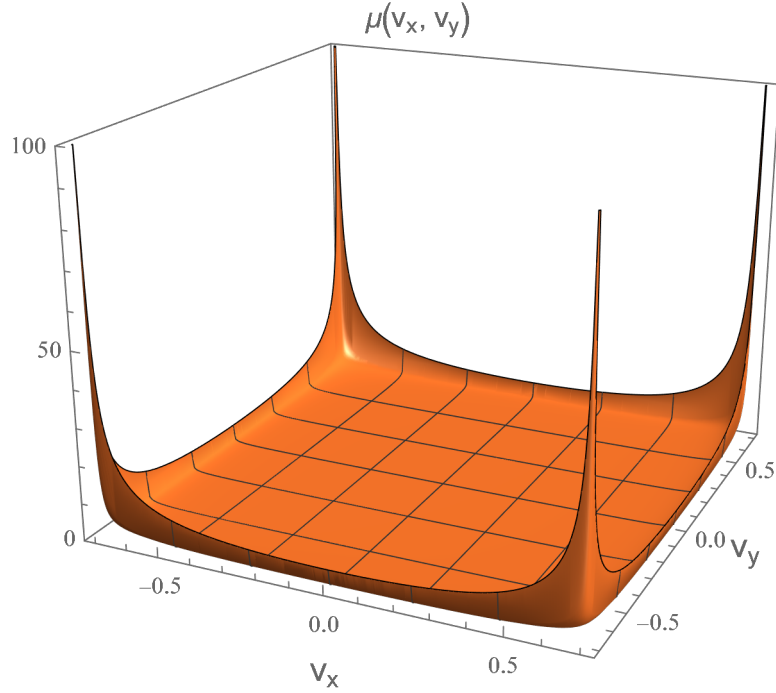
$$\omega(v_x, v_y) = \frac{(1-\rho^2)\mathcal{M}(\psi_C, v_x, v_y)}{\pi^2(1-v_x^2)\sqrt{\rho^2-v_x^2}(1-v_y^2)\sqrt{\rho^2-v_y^2}}. \quad (2.29)$$

Díky omezenému rozsahu v_x a v_y je limita hustoty určena jednoznačně. A můžeme ji použít k aproximaci kvantové procházky jedné částice na mřížce. Z vlastností $\omega(v_x, v_y)$ tak můžeme vyvozovat závěry ohledně tvaru pravděpodobnostního rozdělení kvantové procházky na mřížce. A jak bylo již zmíněno, i procházky dvou rozlišitelných částic na přímce.

Označme část limity hustoty bez váhové funkce jako $\mu(v_x, v_y)$ (takzvaná fundamentální hustota limity). Jak je vidět z tvaru jmenovatele, μ diverguje pro $v_x \rightarrow \pm\rho$ a $v_y \rightarrow \pm\rho$, což je znázorněno na Obr:2.2 pro případ $\rho = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Zde můžeme také pozorovat rychlejší divergenci, pokud v_x a v_y jdou do svých limitních hodnot zároveň - peaky v rozích grafu. Vliv váhové funkce budeme zkoumat až po jejím zjednodušení v příští sekci.

2.4 Změna báze mince na mřížce

Podobně jako na přímce i na mřížce je pravděpodobnostní rozdělení procházky silně ovlivněno počátečním stavem $\psi_C = (\psi_{LL}, \psi_{LR}, \psi_{RL}, \psi_{RR})^T$. Váhovou funkci $\mathcal{M}(\psi_C, v_x, v_y)$, která je v (2.28) zapsána v bázi $(|LL\rangle, |LR\rangle, |RL\rangle, |RR\rangle)$, lze převedením do jiné báze Hilbertova prostoru mince zjednodušit a z nového vyjádření pak



Obrázek 2.2: Graf fundamentální hustoty $\mu(v_x, v_y)$ pro hodnotu parametru $\rho = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Zároveň je to i limita hustoty pro vyváženou minci: $|\psi_C\rangle = \frac{1}{2} (|\chi^{++}\rangle + |\chi^{+-}\rangle + |\chi^{-+}\rangle + |\chi^{--}\rangle)$

určit vliv volby počátečního stavu na tvar pravděpodobnostního rozdělení kvantové procházky na mřížce. Čerpáme zde především z [12].

Opět volíme za novou bázi prostoru mince vlastní vektory $C_2(\rho)$ operátoru mince. To znamená bázi z vektorů $|\chi^{++}\rangle, |\chi^{+-}\rangle, |\chi^{-+}\rangle$ a $|\chi^{--}\rangle$, které vyjádřené ve staré bázi mají tvar

$$|\chi^{++}\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \rho \\ \sqrt{1 - \rho^2} \\ \sqrt{1 - \rho^2} \\ 1 - \rho \end{pmatrix}, |\chi^{+-}\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{1 - \rho^2} \\ -1 - \rho \\ 1 - \rho \\ -\sqrt{1 - \rho^2} \end{pmatrix}, |\chi^{-+}\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{1 - \rho^2} \\ 1 - \rho \\ -1 - \rho \\ -\sqrt{1 - \rho^2} \end{pmatrix}, |\chi^{--}\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 - \rho \\ -\sqrt{1 - \rho^2} \\ -\sqrt{1 - \rho^2} \\ 1 + \rho \end{pmatrix}.$$

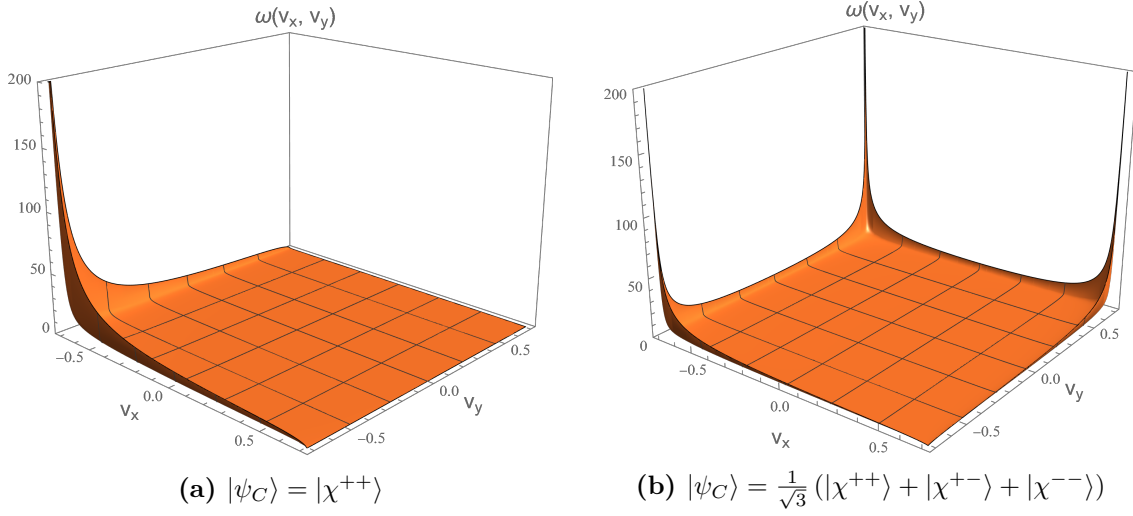
K nim zapíšeme počáteční stav mince v $x = 0$ s jinými amplitudami pravděpodobnosti

$$|\psi_C\rangle = h^{++}|\chi^{++}\rangle + h^{+-}|\chi^{+-}\rangle + h^{-+}|\chi^{-+}\rangle + h^{--}|\chi^{--}\rangle. \quad (2.30)$$

Jejich vztah k původním amplitudám pravděpodobnosti ψ_{LL}, \dots je

$$\begin{aligned} \psi_{LL} &= \frac{1}{2} \left((1 + \rho)h^{++} + \sqrt{1 - \rho^2}h^{+-} + \sqrt{1 - \rho^2}h^{-+} + (1 - \rho)h^{--} \right) \\ \psi_{LR} &= \frac{1}{2} \left(\sqrt{1 - \rho^2}h^{++} - (1 + \rho)h^{+-} + (1 - \rho)h^{-+} - \sqrt{1 - \rho^2}h^{--} \right) \\ \psi_{RL} &= \frac{1}{2} \left(\sqrt{1 - \rho^2}h^{++} + (1 - \rho)h^{+-} - (1 + \rho)h^{-+} - \sqrt{1 - \rho^2}h^{--} \right) \\ \psi_{RR} &= \frac{1}{2} \left((1 - \rho)h^{++} - \sqrt{1 - \rho^2}h^{+-} - \sqrt{1 - \rho^2}h^{-+} + (1 + \rho)h^{--} \right) \end{aligned} \quad (2.31)$$

Obrázek 2.3: Limita hustoty $\omega(v_x, v_y)$ pro $\rho = \frac{1}{\sqrt{2}}$ a různé volby počátečního stavu.



Po dosazení do váhové funkce a pár úpravách obdržíme její jednodušší tvar

$$\begin{aligned} \mathcal{M}(\psi_C, v_x, v_y) = & 1 - \frac{v_x}{\rho} (|h^{++}|^2 - |h^{+-}|^2 + |h^{-+}|^2 - |h^{--}|^2) \\ & - \frac{v_y}{\rho} (|h^{++}|^2 + |h^{+-}|^2 - |h^{-+}|^2 - |h^{--}|^2) \\ & + \frac{v_x v_y}{\rho^2} (|h^{++}|^2 - |h^{+-}|^2 - |h^{-+}|^2 + |h^{--}|^2) \end{aligned} \quad (2.32)$$

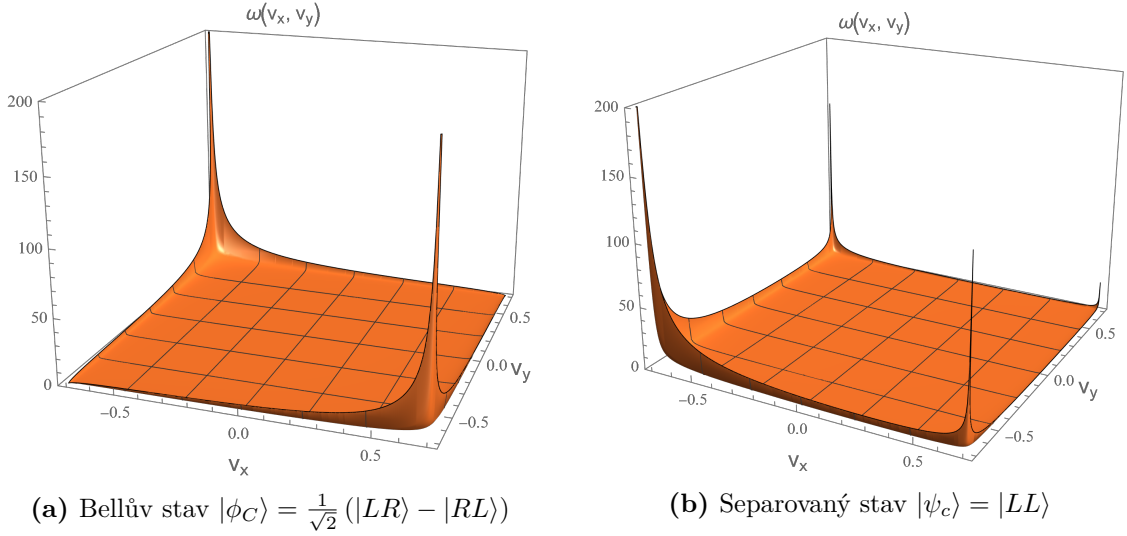
Pro různé výběry počátečního stavu ψ_C nyní ukážeme vliv váhové funkce na limitu hustoty. Pro vyváženou minci $|\psi_C\rangle = \frac{1}{2}(|\chi^{++}\rangle + |\chi^{+-}\rangle + |\chi^{-+}\rangle + |\chi^{--}\rangle)$ je \mathcal{M} nezávisle na parametru ρ rovna jedné pro všechny hodnoty v_x a v_y . Tudíž je pak limita hustoty rovna fundamentální hustotě - Obr:2.2. Pro $\psi_C = (1, 0, 0, 0)^T$ kde jediná nenulová amplituda pravděpodobnosti je h^{++} zůstane peak jen pro v_x a $v_y \rightarrow -\rho$ (zároveň). Zde pro $v_x \rightarrow \rho$ i $v_y \rightarrow \rho$ už ω nediverguje, protože v té oblasti je váhová funkce nulová - Obr:2.3a. Obecně peak vymizí pokud je příslušná amplituda pravděpodobnosti nulová. Třeba pro $\psi_C = \frac{1}{\sqrt{3}}(1, 1, 0, 1)^T$ vymizí peak pro $v_x \rightarrow \rho$, $v_y \rightarrow -\rho$ jak je vidět na Obr:2.3b. Divergence ω na "straně" grafu, tedy pro $v_x \rightarrow \rho$ či $-\rho$ a stejně pro v_y vymizí, pokud jsou volbou počátečních amplitud pravděpodobností odstraněny oba peaky na jejich koncích.

Pokud se na procházku díváme jako na procházku dvou rozlišitelných částic, má počáteční stav mince zapsaný v bázi z vlastních stavů operátoru mince tvar

$$|\psi_C\rangle = \sum_{i,j=\pm} h^{ij} |\chi^{ij}\rangle = \sum_{i,j=\pm} h^{ij} |\chi^i\rangle \otimes |\chi^j\rangle. \quad (2.33)$$

Kde $|\chi^\pm\rangle \in \mathcal{H}_C$ jsou vlastní vektory operátoru mince jedno-částicové procházky po přímce. Z limity hustoty (2.29), kde x je pozice první částice na přímce a od ní odvozená v_x (podobně pro y a druhou částici), se tak dozvíme, že po měření pozice obou částic je s největší pravděpodobností nalezneme ve vzdálenosti blízké $|x| = \rho t = |y|$ od počátku přímky. A to pro libovolný počáteční stav mince $|\psi_C\rangle$, jak je vidět z tvaru fundamentální hustoty. Například pro $|\psi_C\rangle = |\chi^{++}\rangle = |\chi^+\rangle \otimes |\chi^+\rangle$ obě částice nejpravděpodobněji nalezneme v peaku na Obr:2.3a. Tedy obě se nejpravděpodobněji budou nacházet v $x, y = -\rho t$. Jedná se tu o separovaný stav, takže z (2.9) je zde peak tvořen peaky pravděpodobnostních rozdělání procházek jedné částice, které jsou (s koeficientem $\frac{2}{t}$ zobrazeny v (1.7a).

Obrázek 2.4: Limita hustoty procházky s parametrem operátoru mince $\rho = \frac{1}{\sqrt{2}}$ a počátečním stavem:



2.5 Vliv provázání

Na rozdíl od separovaného stavu není pravděpodobnostní rozdělení kvantové procházky dvou rozlišitelných částic s provázaným stavem tvořeno rozdělením procházek jednotlivých částic. Na příkladě maximálně provázaném Bellově stavu ukážeme, jak provázání ovlivňuje tvar pravděpodobnostního rozdělení [13]. Těto vlastnosti, neexistující pro klasickou procházku, lze využít pro různé aplikace kvantové procházky.

Pro účely této práce se zaměříme na singlet, jeden z Bellových stavů

$$|\phi_C\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|LR\rangle - |RL\rangle), \quad (2.34)$$

který je ve smyslu entropie maximálně provázaný. Počáteční stav procházky dvou částic po přímce tak bude

$$|\phi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0, L\rangle_1 |0, R\rangle_2 - |0, R\rangle_1 |0, L\rangle_2), \quad (2.35)$$

I po libovolném počtu kroků bude stav složeného systému provázaný.

$$|\phi(t)\rangle = \hat{U}_2^t |\phi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{U}_1^t |0, L\rangle_1 \hat{U}_1^t |0, R\rangle_2 - \hat{U}_1^t |0, R\rangle_1 \hat{U}_1^t |0, L\rangle_2), \quad (2.36)$$

protože $\hat{U}_1 |0, L(R)\rangle_1$ bude vždy z Hilbertova prostoru procházky první částice a totéž platí pro kety částice druhé.

Pravděpodobnostní rozdělení procházky dvou částic s provázaným stavem mince nezískáme pouze z rozdělení jedno-částicové procházky. Tedy neplatí (2.9). To ukážeme na tvaru váhové funkce pro dvou-částicovou procházku $\mathcal{M}_2(\psi_C, v_x, v_y)$, která pro provázaný stav ϕ_C nebude součinem váhových funkcí jedno-částicové procházky $\mathcal{M}_1(\psi_C, v_x/y)$.

Počáteční Bellův stav ϕ_C vyjádříme v bázi vlastních vektorů mince pomocí (2.31) jako $|\phi_C\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\chi^{+-}\rangle - |\chi^{-+}\rangle)$. Váhová funkce singletu je potom

$$\mathcal{M}_2(\phi_C, v_x, v_y) = 1 - \frac{v_x v_y}{\rho^2}. \quad (2.37)$$

Což nelze faktorizovat na součin dvou funkcí \mathcal{M}_1 , jako to lze provést pro separované stavy.

Vezměme například počáteční stav $|\psi_{LL}\rangle = |LL\rangle = |L\rangle \otimes |L\rangle$. Zde má $|L\rangle$ v bázi vlastních vektorů mince \hat{C}_1 tvar $|\psi_L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sqrt{1+\rho}|\chi^+\rangle + \sqrt{1-\rho}|\chi^-\rangle)$ a váhovou funkci $\mathcal{M}_1(\psi_L, v) = v - 1$. Separovaný stav $|\psi_{LL}\rangle$ v v bázi vlastních vektorů \hat{C}_2 nabývá tvaru $|\psi_{LL}\rangle = \frac{1}{2}((1+\rho)|\chi^{++}\rangle + \sqrt{1-\rho^2}|\chi^{+-}\rangle + \sqrt{1-\rho^2}|\chi^{-+}\rangle + (1-\rho)|\chi^{--}\rangle)$ a jeho váhová funkce je

$$\mathcal{M}_2(\psi_{LL}, v_x, v_y) = (-1 + v_x)(-1 + v_y) = \mathcal{M}_1(\psi_L, v_x) \cdot \mathcal{M}_1(\psi_L, v_y), \quad (2.38)$$

což názorně ukazuje naše tvrzení.

Limita hustoty pro Bellův počáteční stav je na Obr:2.4a. Při porovnání s limitou hustoty procházky se separovaným stavem $|\psi_C\rangle = |LL\rangle$ na Obr:2.4b vidíme, že pravděpodobnost některých stavů systému, aproximovaná limitou hustoty, je mnohem větší a částice tak po měření můžeme najít v kombinaci pozic, které by pro separovaný stav byly málo pravděpodobné. Jak je tomu kupříkladu pro konfigurace, kdy se částice nacházejí na opačných stranách přímk. Naopak je velmi nepravděpodobné například, aby se po měření částice na přímce nacházely blízko sebe, což je pro separovaný stav možné.

2.6 Vliv nerozlišitelnosti

Zatím jsme v této kapitole vždy uvažovali rozlišitelné částic a jejich procházku. Vzhledem k tomu, že většina experimentálních implementací více-částicové kvantové procházky využívá dvou elektronů či fotonů, se nyní budeme zabývat procházkou nerozlišitelných částic. Zajímat nás bude především, jaký vztah procházky s rozlišitelnými a nerozlišitelnými částicemi mají.

Hlavní důsledek nerozlišitelnosti částic je invariance společného pravděpodobnostního rozdělení vůči permutaci částic $p(x, y, t) = p(y, x, t)$. Proto volíme nadále vždy $x \geq y$ v $p(x, y, t)$.

Z tvaru evolučního operátoru $\hat{U}_2 = \hat{U}_1 \otimes \hat{U}_1$ můžeme vidět, že je invariantní vzhledem k permutaci částic. Díky tomu jsou symetrické a antisymetrické podprostory \mathcal{H} během časového vývoje procházky neměnné. Tedy procházka se symetrickým počátečním stavem bude mít symetrický stav i po libovolném počtu kroků a naopak.

V této práci uvažujeme v počátečním stavu obě částice lokalizované v počátku, $(|0, 0\rangle)$. Kde druh nerozlišitelných částic určuje, jestli počáteční stav mince bude ze symetrického, či antisymetrického podprostoru \mathcal{H} .

Pokud bychom ale měli částice začínající kvantovou procházku z různých pozic, museli bychom vzít v potaz, že pro $|\psi(0)\rangle = |x, y\rangle \otimes |\psi_C\rangle$, kde $|x - y| = 2n$, jsou částice prvních n kroků rozlišitelné, protože se jejich pravděpodobnostní rozdělení nepřekrývají. Až po n krocích můžeme mluvit o procházce nerozlišitelných částic. V tomto případě je vhodnější stavový vektor dvou bosonů, či fermionů vyjádřit jako sumu jejich kreačních operátorů z formalismu druhého kvantování působících na vakuový stav ve Fockově prostoru. Z komutačních vztahů kreačních operátorů poté vyplývá podmínka symetričnosti, či antisymetričnosti stavu. Takovýto postup nalezneme v [14].

2.6.1 Fermiony

Jelikož je v počátečním stavu $|\psi(0)\rangle = |0, 0\rangle \otimes |\psi_C\rangle$ poziční část stavu symetrická a jak víme, vlnová funkce dvou fermionů je antisymetrická, musíme volit antisymetrický počáteční stav mince. Jediná možnost je singlet $|\psi_C\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|LR\rangle - |RL\rangle)$.

Díky tomuto nutnému počátečnímu stavu je pravděpodobnostní rozdělení procházky dvou fermionů totožné s pravděpodobnostním rozdělením procházky dvou rozlišitelných částic s maximálně provázaným stavem, jehož limitní rozdělení je na Obr:2.4a. Z toho lze vyčíst, že fermiony mají tendenci nacházet se po měření co nejdál od sebe na opačných stranách od počátku okolo pozic $\pm \rho t$.

2.6.2 Bosony

Ze stejných důvodů jako u fermionů volíme u procházky dvou bosonů z počátku symetrický počáteční stav mince. Tím je například Bellův stav $|\psi_C\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|LL\rangle + |RR\rangle)$. Opět je tedy pravděpodobnostní rozdělení stejné jako pro procházku dvou rozlišitelných částic na přímce, jen s jiným maximálně provázaným stavem $|\psi_C\rangle$. Tentokrát z limity hustoty můžeme zjistit, že po měření částice nejpravděpodobněji nalezneme na blízkých nebo i stejných pozicích na přímce okolo hodnoty $\pm \rho t$.

Kapitola 3

Interakce částic

V následující kapitole budeme zkoumat kvantovou procházku s interagujícími částicemi. V už zkonstruované procházce byly na sobě částice nezávislé. Interakce ale bude mít za následek změnu dynamiky procházky. Kromě jiného i vznik vázaných stavů částic, které z tohoto systému činí vhodného kandidáta pro modelování vázání atomů v molekule, tedy k aproximaci jak Coulombovy síly, tak van der Waasovy síly. Je už také známo, že kvantová procházka s interakcí částic je schopna univerzálních kvantových výpočtů, když je použita jako základ konstrukce kvantových bran v obvodu.

Podle důkazu v [15] je z prakticky všech typů interakcí nerozlišitelných částic možno odvodit univerzální kvantové výpočty. V této práci se proto zaměříme na δ -interakci, kdy spolu částice interagují jen pokud jsou na stejné pozici. Tento typ interakce je pro naše účely postačující i přes jednoduchost svého zavedení.

Hlavními zdroji této kapitoly jsou [16] a [17].

3.1 δ -interakce

Tato interakce probíhá na stavových vektorech systému se stejnými pozicemi obou částic, $x = y$. Uvažujeme interakci G na Hilbertově prostoru procházky dvou částic \mathcal{H}_2 s jedním parametrem $g \in \langle 0, 2\pi \rangle$, kterou přidáme do evolučního krokového operátoru $\hat{U}_I = \hat{U}_2 \hat{G}$.

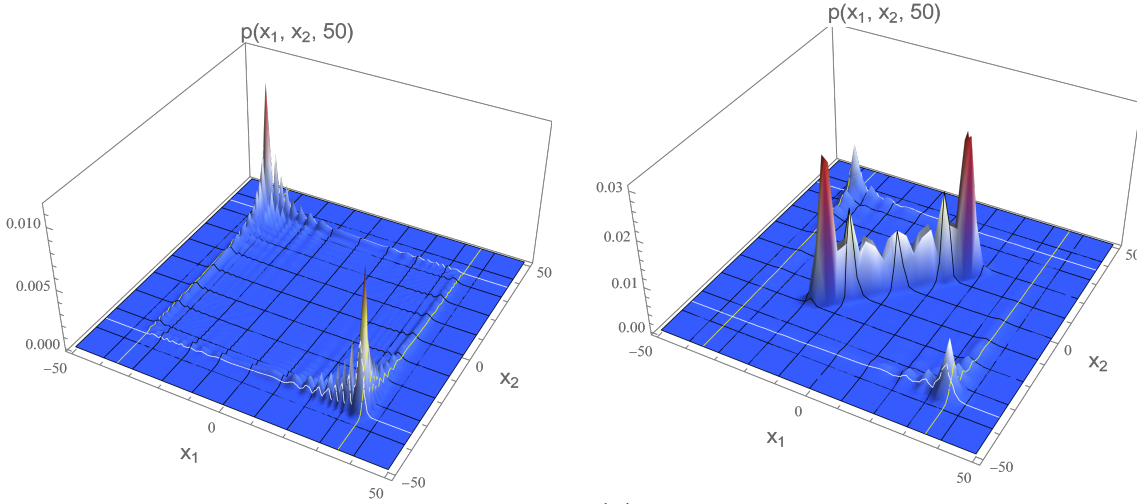
Pro jednodušší zápis převezmeme notaci z [16]. Bazické vektory Hilbertova prostoru procházky dvou neinteragujících částic budeme značit $|x_1, \alpha_1, x_2, \alpha_2\rangle$, kde x_1, x_2 jsou pozice první a druhé částice na přímce a α_1, α_2 jsou jejich stavy mince. V tomto značení bude operátor interakce

$$\hat{G}|x_1, \alpha_1, x_2, \alpha_2\rangle = \begin{cases} |x_1, \alpha_1, x_2, \alpha_2\rangle & \text{pro } x_1 \neq x_2 \\ e^{ig}|x_1, \alpha_1, x_2, \alpha_2\rangle & \text{pro } x_1 = x_2. \end{cases} \quad (3.1)$$

Interakční operátor tedy působí na srážkovém podprostoru tvořeném bazickými vektory u kterých se $x_1 = x_2$. Na tomto podprostoru přidává stavům fázi, tedy mění stav mince obou částic. Z toho je patrné, že přidáním interakce se nemění už popsaná bipartita procházky ($x_1 - x_2$ zůstává sudé, či liché pro jinou volbu počátečních pozic částic).

Dále je zřejmé, že interakce nezmění invarianci procházky vůči permutaci částic. Důsledkem čehož, jak již bylo zmíněno v 2.6, je invariance symetrického a antisymetrického podprostoru \mathcal{H} . Pro účely této práce se omezíme na antisymetrické stavy částic.

Obrázek 3.1: Pravděpodobnostní rozdělení procházky dvou částic s interakcí se singletním počátečním stavem mince. Zelenou přerušovanou čarou jsou zvýrazněny polohy $|x_1| = \frac{50}{\rho}$ a $|x_2| = \frac{50}{\rho}$.



(a) $g = 0$ Pravděpodobnostnímu rozdělení bez interakce dominují peaky ve kterých jsou částice na opačných stranách přímky.

(b) $g = \pi$ Oba peaky se zmenšily. Na diagonále přibyl "hřeben" vysoké pravděpodobnosti, kde se částice pohybují pomaleji a jsou na stejných polohách na přímce.

Nakonec, protože je systém invariantní vůči společné translaci souřadnic, zachovává se v něm hybnost těžiště. Stav se stejnou hodnotou hybnosti těžiště tedy tvoří invariantní prostor. Později této symetrie využijeme při vyšetřování energetického spektra procházky.

3.2 Poznatky z numerické simulace interakce

Pro základní orientaci v systému s interakcí se nejdříve podíváme na numerickou simulaci procházky dvou částic s δ -interakcí a její srovnání s dříve zkoumanou procházkou bez interakce. Toto srovnání můžeme vidět na Obr:3.1 Zde bereme za počáteční stav

$$|\psi(0)\rangle = |0, 0\rangle \otimes \left(\frac{1}{\sqrt{2}} (|LR\rangle - |RL\rangle) \right).$$

Tedy obě částice se před prvním krokem nacházejí v počátku v singletním stavu. Za parametr G volíme $g = \{0, \pi\}$, aby byl účinek interakce co nejzřetelnější. Oba případy krátce porovnáme.

V bezinterakčním případě je velká část pravděpodobnosti soustředěna do peaků okolo poloh $x_1 = -x_2 = \rho \pm t$. To se děje nadále i pro případ interakce, jen jsou tyto konfigurace systému méně pravděpodobné.

Hlavním rozdílem je ale vyšší pravděpodobnost stavů na diagonále, kde $x_1 = x_2$. Tento "hřeben" dosahuje jen hodnot do $x_1 = x_2 = t/3$. Proto se peaky na krajích hřebene pohybují pomaleji než peaky opačných poloh. [16]

Zajímavý je také fakt, že se tloušťka hřebene s více kroky nemění [16]. Pro libovolný počet kroků totiž pravděpodobnost v polohách kde $|x_1 - x_2| > r$ klesá exponenciálně s r .

3.3 Hledání spektra interakčního evolučního operátoru

Hlavním nástrojem pro zkoumání dynamiky systému s interakcí bude spektrum či spíše kvazispektrum evolučního operátoru. Spojitá i bodová část spektra \hat{U}_I totiž odkrývá příčiny odlišného chování pravděpodobnostního rozdělení, které jsme pozorovali v numerické simulaci systému.

3.3.1 Analytické řešení vázaných stavů

Proces hledání analytických řešení spektra krokového operátoru procházky s interakcí zde pouze stručně shrneme a nastíníme důležité kroky. Tento postup je v původní podobě a detailněji odůvodněný k nalezení v [16].

Navážeme na symetrii procházky vůči společné translaci souřadnic. Z této znalosti totiž vyplývá výhoda zápisu systému v relativních souřadnicích, tedy v souřadnici těžiště $(x_1 + x_2)/2$ a souřadnice relativní polohy částic $x_1 - x_2$. Pokud v prostoru diskretních poloh částic přejdeme k relativním souřadnicím, bude vývoj relativní vzdálenosti stále záviset na totální hybnosti $p = p_1 + p_2$.

Hybnosti částic zde získáváme pozměněnou Fourierovou transformací z prostorové reprezentace $(l^2(\mathbb{Z}) \otimes \mathbb{C}^2)^{\otimes 2}$ do hybnostní reprezentace systému $L^2((-\pi, \pi)^2, dp_1 dp_2) \otimes \mathbb{C}^4$. Zde hybnosti p_1, p_2 v případě volné procházky odpovídají posunutým k_x, k_y z minulé kapitoly (2.12). Souřadnici relativní vzdálenosti pak v hybnostní reprezentaci nahradí relativní hybnost $k = (p_1 - p_2)/2$.

Z definice p a k hledáme nyní vlastní hodnoty U_I na první Brillouinově zóně kde $(p, k) \in \langle -\pi, \pi \rangle^2$, kterou je možno získat přeskládáním definičních oborů p a k .

K tomuto cíli lze využít již zmíněné závislosti relativní vzdálenosti na totální hybnosti. Z té totiž v hybnostní reprezentaci vyplývá možnost diagonalizovat U_I pro jednotlivé hodnoty p . Krokový operátor bez interakce lze tudíž rozepsat na

$$\hat{U}_2^p(k) = \hat{U}_1(p/2 - k) \otimes \hat{U}_1(p/2 + k),$$

kde p je pevně zvolený parametr. Interakce pak působí jen na podprostoru srážky kde $x_1 - x_2 = 0$, což v hybnostní reprezentaci znamená, že působí jen na funkce konstantní v k . A pokud projektor na tento podprostor označíme jako P_δ , můžeme pro vektor $\psi(k, p) = \psi(k)$ interakci vyjádřit jako

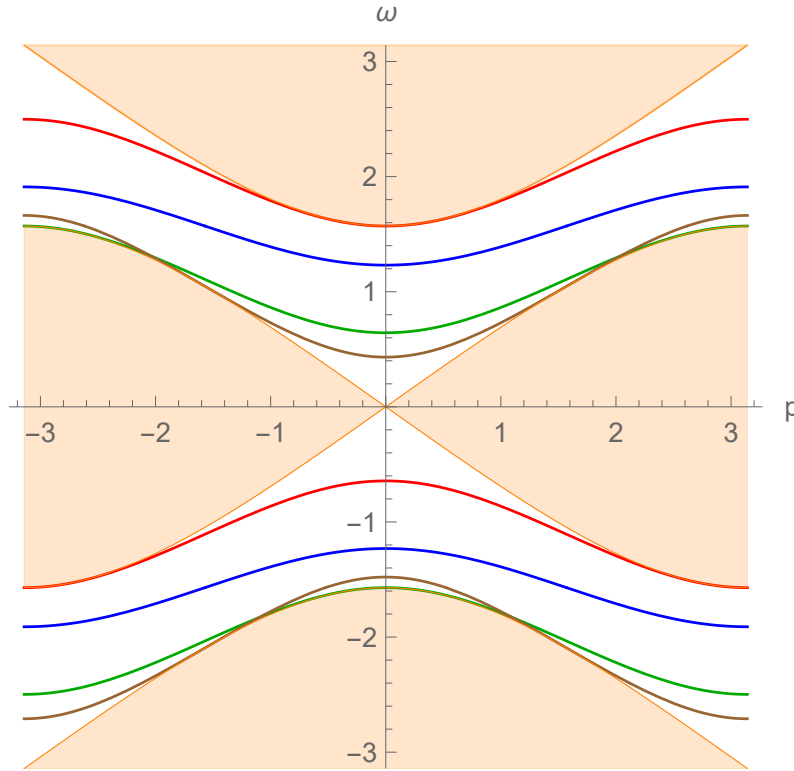
$$\hat{G}\psi(k) = \psi(k) + (e^{ig} - 1)P_\delta\psi,$$

tudíž je pak ψ vlastní vektor \hat{U}_I , pokud

$$\hat{U}_I\psi(k) = \hat{U}_2^p(k) \left(\psi(k) + (e^{ig} - 1)P_\delta\psi \right) = e^{i\omega}\psi(k). \quad (3.2)$$

Vlastní hodnoty \hat{U}_I , jsou na jednotkové kružnici. Kde $\omega \in \langle -\pi, \pi \rangle$ je "kvazie-nergie" systému. V [16] je dále dokázáno, že se ω nemohou nacházet ve spojitě části spektra \hat{U}_I (3.4) a protože jsme se omezili na antisymetrické stavy systému, bude $P_\delta\psi$ úměrné singletu ψ_- . Integrací upravené rovnice (3.2) pak lze vypočítat použitím reziduové věty a získáme tak výsledek

$$e^{i\omega} = \frac{e^{ig}}{2e^{ig} - 1} \left(\cos p \pm i\sqrt{\sin^2 p + 4(1 - \cos g)} \right), \quad (3.3)$$



Obrázek 3.2: Spektrum evolučního operátoru \hat{U}_I , kde jsou kvazienergie funkcemi celkové hybnosti. Spojité spektrum je z (2.18) a bodové z (3.3). Na obrázku jsou vázané stavy seshora dolů s parametrem interakce $g = 3\pi/2, \pi, \pi/2\pi/3$.

pokud daná ω splňují podmínku

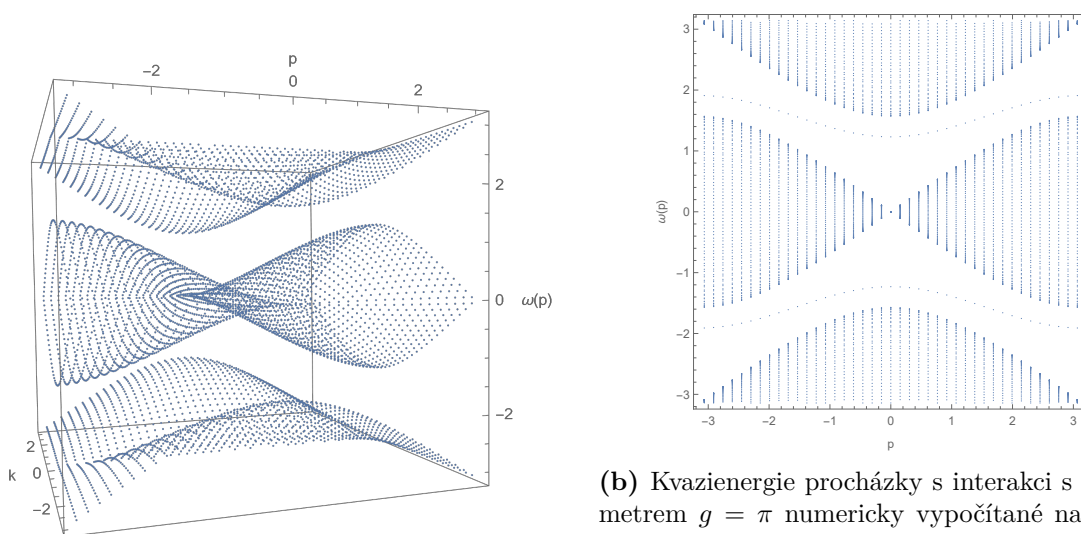
$$\sin \omega \sin(g - \omega) > 0. \quad (3.4)$$

Kvazienergie ω závislé na p , které jsme takto obdrželi, jsou zobrazeny na Obr:3.2.

3.3.2 Spojité spektrum evolučního operátoru - numerické odvození

Pro numerickou aproximaci spojitého spektra \hat{U}_I omezíme systém procházky z přímky na kruh o délce N . Tato úprava zmenší dimenzi Hilbertova prostoru na $4N^2$ a tím umožní zkonstruování evolučního operátoru i následující numerické operace s ním.

Kvůli komutaci evolučního operátoru s operátorem společné translace se \hat{U}_I po diskrétní Fourierově transformaci blokově diagonalizuje na bloky se stejnou celkovou hybností $p = p_1 + p_2$. Vlastní hodnoty těchto unitárních bloků budou na jednotkové kružnici ve tvaru $e^{i\omega}$, kde ω je opět kvazienergie. V případě volné procházky navíc \hat{U}_2 komutuje i s operátory jednotlivých translací a tak se po DFT dokonce diagonalizuje na bloky stavů se stejnými hybnostmi p_1, p_2 . V bezinterakčním případě je proto možné zobrazit získané kvazienergie v závislosti na celkové hybnosti a relativní hybnosti $k = (p_1 - p_2)/2$, která se také zachovává. Jejich definiční obory lze opět přenést do $\langle -\pi, \pi \rangle^2$. Výsledek této numerické aproximace můžeme vidět na Obr:3.3a. Jak je vidět, jsou tyto kvazienergie numerickou aproximací hodnot vypočítaných analyticky v minulé kapitole (2.18).

Obrázek 3.3: Spektrum kvazienergie získané z numerické simulace.

(a) Zde jsou k vidění numericky získané kvazienergie volné dvou-částicové procházky. Pro jejich výpočet byl systém omezen na kruh o 41 pozicích.

(b) Kvazienergie procházky s interakcí s parametrem $g = \pi$ numericky vypočítané na uzavřeném systému o 31 pozicích na kružnici. Můžeme si povšimnout spojitého spektra, které je totožné s volnou procházkou po projekci všech hodnot k do roviny p a ω . Interakcí ale vzniknou vázané stavy systému, které jsou v mezerách mezi pásy spojitého spektra.

V případě procházky s δ -interakcí se už ale jednotlivé hybnosti nezachovávají. Zobrazujeme proto ω pouze v závislosti na p . Viz Obr:3.3b pro $N = 31$. Husté pásy zde vznikly zploštěním osy k . Ačkoliv jsou při numerické aproximaci i hodnoty ze spojitého spektra změněné, tato odlišnosti je malá a pro $N \rightarrow \infty$ vymizí. Spojité spektrum pak bude totožné se spektrem volné procházky. Vlivem interakce ale hlavně přibudou hodnoty v mezerách mezi pásy. Jsou to vázané stavy, které jsme analyticky spočítali v minulé podkapitole. Jako na začátku této kapitoly jsme se i zde omezili na antisymetrický podprostor stavů. Tímto ze spektra vyjmeme symetrické vázané stavy, které navíc nesplňují podmínku (3.4) a jsou částečně ve spojitě části spektra.

Kapitola 4

Kvantová procházka s odloženou volbou

V poslední kapitole se zaměříme na vliv měření jedné částice na dynamiku druhé. Měření jedné částice z provázaného páru má totiž za následek velmi neintuitivní výsledky, které ale je kvantová mechanika schopná předpovědět. Budeme pojednávat o verzi experimentu "delayed choice" (odložené volby) upravené pro kvantovou procházku. Po představení konceptu odložené volby se zaměříme na experimentální realizaci kvantové procházky s odloženou volbou v článku [4].

4.1 Úvod do konceptu odložené volby

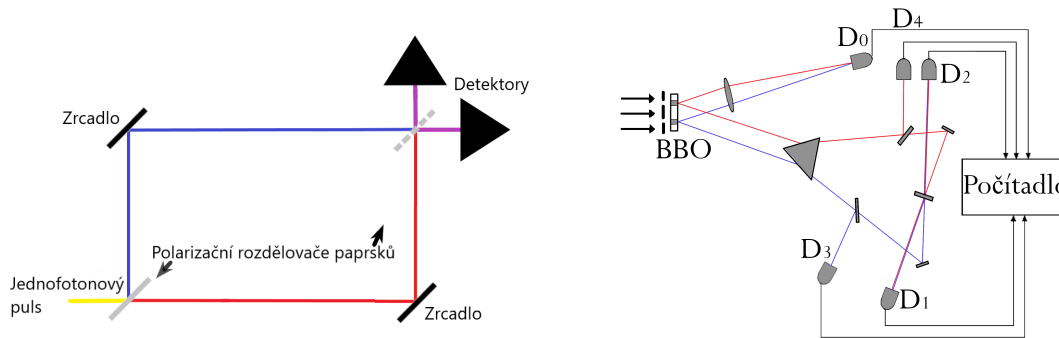
Tento experiment, v prvotní podobě myšlenkový a později experimentálně provedený pokus [18], jehož diagram je na Obr:4.1a, měl poukazovat na určení "chování" fotonu volbou měřených pozorovatelných. Změnou nastavení interferometru v optickém obvodu je pro prolétávající kvantovou částici (ve většině případů pro foton) možné získat buď "which way" informaci (zjistíme kterou dráhou foton putoval k detektoru) nebo pozorovat interferenci fotonu. Nastavení interferometru bylo pro každý foton určeno náhodně tak, aby mezi touto událostí a vstupem fotonu do interferometru byl prostorupodobný interval. Foton by tak po vzniku mohl informaci o volbě získat jen nadsvětelnou rychlostí. Volba nastavení interferometru pak byla porovnána s naměřenými daty až po dokončení experimentu. Odtud tedy pochází označení delayed choice.

Výsledky tohoto experimentu je možno vykládat dvojím způsobem. Buď si kvantové částice zachovávají dualitu částice a vlnění až do okamžiku měření, nebo své vlastnosti přizpůsobují typu experimentu "předem". Tedy že by se přizpůsobily volbě měřených pozorovatelných ještě před volbou samotnou. Neboli volba nastavení interferometru má určovat už uběhlou minulost fotonu.

Obdobný jev zkoumá i tzv. "delayed choice quantum eraser". Krátce zde popíšeme jak funguje podle jeho konstrukce v [19], protože se svou implementací velmi podobá kvantové procházce s odloženou volbou. Optický obvod pokusu je znázorněn na Obr:4.1b.

V tomto experimentu laserový puls namířený na dvouštěrbinu, která puls dělí a dále míří na dvě různá místa nelineárního optického krystalu BBO. Kde tak na jednom ze dvou míst vznikne pár "signal-idler" fotonů, které jsou vzájemně na sebe ortogonálně polarizované a je náhodné, na kterém ze dvou míst na krystalu je pár

Obrázek 4.1: Spektrum kvazienergie získané z numerické simulace.



(a) Jednoduchý diagram experimentu s odloženou volbou. Podle nastavení interferometru buď rozdělovač paprsků před detektory (šedá barva) není přítomen, což vede ke znalosti which way informace. Nebo je přítomen, což znamená závislost pravděpodobnosti naměření fotonu na obou detektorech na vzájemném fázovém posunu drah interferometru a zároveň nevíme, kterou dráhou foton přiletěl.

(b) Diagram experimentu quantum eraser podle [19]. Provázaný pár fotonů je generován na jednom ze dvou míst optického krystalu. Zatímco signal foton je naměřen detektorem D_0 , idler foton letí do interferometru, kde může být naměřen v jednom ze čtyř detektorů. Pokud je naměřen v D_1 , či D_2 , neznáme which way informaci, kterou ale známe, je-li detekován v D_3 , či D_4 .

generován. Pár je poté rozdělen polarizačním hranolem. První foton ("signal") je detekován v detektoru D_0 a je změřena x -souřadnice místa detekce. Druhý foton ("idler") putuje do interferometru. Interferometr obsahuje zrcadla a další rozdělovače paprsků, díky kterým může druhý foton zachytit jeden ze čtyř detektorů. Z detekce fotonu na D_3 či D_4 zjistíme kterou dráhou skrz dvouštěrbinu se foton vydal a pokud je foton detekován na D_1 a D_2 , which way informaci nemáme. Nevíme totiž kterou cestou se foton k detektoru dostal. Pro odloženou volbu je důležité, aby optická dráha od D_0 do počítače detekcí byla kratší než od ostatních detektorů. Tím je opět zajištěno, že je jakákoliv informace od druhého fotonu obdržena později než informace od prvního.

Po mnohonásobném opakování pokusu je pak možné porovnat případy kdy byl druhý foton zaznamenán na určitém detektoru s pozicí prvního na detektoru D_0 . Ukazuje se, že detekce druhého fotonu na D_3 a D_4 nám poskytuje which – way informaci. Tutéž informaci pak opožděně určuje i pro první foton, proto pak graf naměřených x -souřadnic na detektoru D_0 pro společnou detekci s D_3 , nebo D_4 bude křivka, na které není vidět interference. Je nutno podotknout, že bez vybrání výsledků podle měření druhého fotonu by which way informace pro první foton zjistitelná nebyla.

Naopak stejné grafy pro společné detekce v D_0 a D_1 , nebo D_2 jsou interferenční křivky. Detekce druhého fotonu v tomto případě tedy opožděně tzv. maže which way informaci pro první foton.

Z výsledků [19] je pro nás důležité, že pomocí měření provázané částice je možné smazat, či zvýraznit which-way informaci a tím zvýraznit, či potlačit interferenci fotonu na dvouštěrbině. To, že je tato "volba" učiněna až po detekci částice můžeme vykládat opět tím stejným dvojím způsobem.

V upravené podobě byl delayed choice quantum eraser zkonstruován vícekrát. Správnému vysvětlení jevu pomohl experiment předložený v [20]. Toto provedení se

v mnohém liší, ale to podstatné na něm je, že se autorům povedlo quantum eraser zkonstruovat tak, aby události měření prvního fotonu, volby nastavení interferometru i měření druhého fotonu v interferometru byly oddělené prostorupodobnými intervaly. Toto v experimentu povoluje pouze jedno vysvětlení naměřených dat. A to že kvantové částice mají částicové vlastnosti i vlastnosti vlnění zároveň.

4.2 Simulace experimentálního provedení

Po vysvětlení experimentu, ze kterého vychází, se můžeme detailněji podívat na kvantovou procházku s odloženou volbou. Konkrétně čerpáme z článku [4], ve kterém se autorům podařilo experimentálně realizovat dvou dimenzionální kvantovou Hadamardovu procházku s odloženou volbou.

V jejich pokusu vyslali laserový puls do krystalu PPKTP a pomocí dalších hranolů a vlnových destiček pak připravili počáteční maximálně provázaný stav systému, Bellův stav $|\phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H, H\rangle + |V, V\rangle)$. Kde $|H\rangle$ a $|V\rangle$ značí horizontální a vertikální polarizaci fotonu a představují tak bazické stavy Hilbertova prostoru vnitřního stupně volnosti částice v kvantové procházce.

Po oddělení fotonů rozdělovačem paprsků putuje jeden (idler) optickým vláknem dostatečné délky, aby k jeho následnému měření polarizační projekce pomocí SPD měření došlo až po měření provázaného fotonu. První foton lze s pomocí polarizátoru a vlnových destiček měřit v libovolné bázi. A to především v bázích $(|H\rangle, |V\rangle)$, $(|L\rangle, |R\rangle)$ a $(|D\rangle, |A\rangle)$. Kde se přizpůsobujeme značení ve článku.

$$\begin{aligned} |L\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle + i|V\rangle) & |D\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle + |V\rangle) \\ |R\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle - i|V\rangle) & |A\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle - |V\rangle) \end{aligned}$$

Druhý foton (signal) provádí kvantovou procházku na mřížce. V obvodu se nejdříve posune v jednom směru (x) a poté ve druhém (y). Nejdříve je půlvlnnou destičkou aplikován operátor Hadamardovy mince. Poté je polarizačním rozdělovačem paprsku (PBS) opět rozdělena horizontálně polarizovaná část vlnové funkce od části polarizované vertikálně. To umožní odlišně polarizované složce vést jinými optickými vlákny L1 a L2, které jsou různě dlouhé, zpožděním fotonu tak vytvoří posun po pomyslné mřížce na pozice $x-1$ a $x+1$. Další PBS obě optické dráhy spojí. Následuje analogický posun v souřadnici y , který je zprostředkován další půlvlnnou destičkou a optickými vlákny L3 a L4. Pozice na mřížce tak jsou přesně určeny časem detekce fotonu. Po sjednocení optických drah bude totiž foton směřovat přes rozdělovač paprsků s 50% pravděpodobností do SPD, kde je detekován a díky různým zpožděním které mohl nabrat ve vláknech L1 až L4 určíme jeho "pozici" na mřížce. S 50% pravděpodobností však také může vstoupit do dalšího kroku procházky. V experimentu je tak možno pozorovat více kroků procházky bez přidání dalších optických prvků. Hlavním omezením tak je celková ztráta v optickém obvodu. V článku autoři takto dosáhli až 4 kroků procházky.

V postselekcí pak lze vybrat z nasbíraných dat podle naměřené polarizace prvního fotonu. Podobně jako když se v experimentu quantum eraser vybírala data podle toho, v jakém detektoru byl idler foton zjištěn. A pokud si počáteční stav vyjádříme v již zmíněných bázích $|\phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|D, D\rangle + |A, A\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|L, R\rangle + |R, L\rangle)$. Je zřejmé že po měření polarizace prvního fotonu v bázi $(|H\rangle, |V\rangle)$, či $(|D\rangle, |A\rangle)$,

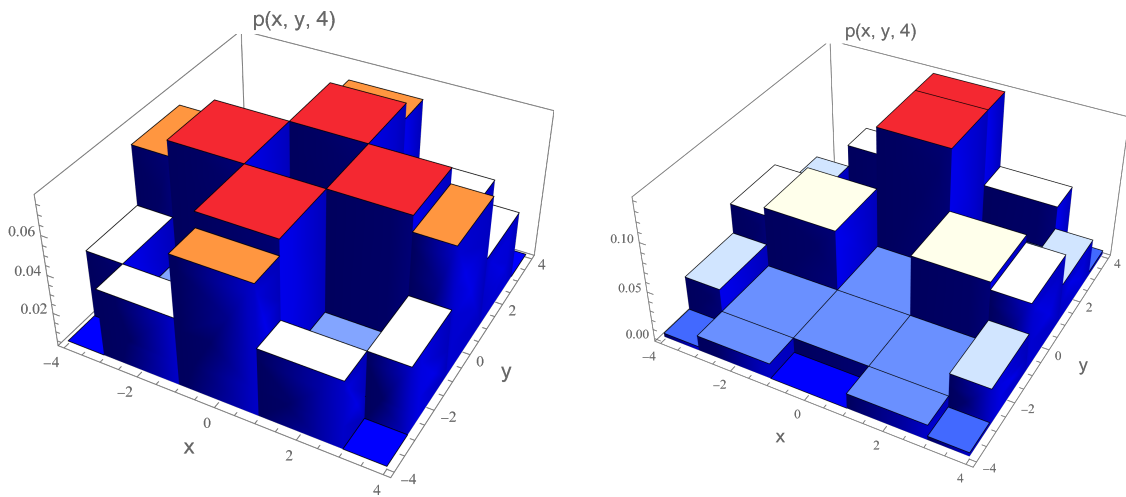
nebo $(|L\rangle, |R\rangle)$ bude mezi polarizacemi obou fotonu v prvních dvou případech korelace a v třetím antikorelace. Pokud tak vybereme ta měření, kdy jsme detekovali $|A\rangle$ polarizaci prvního fotonu, je stav mince druhého fotonu také $|A\rangle$. Pokud vybere podle $|R\rangle$, je polarizace druhé částice $|L\rangle$.

Z toho plyne, že zatímco v quantum eraser experimentu odložená volba podle místa detekce signal fotonu rozhodovala, zda se z dat detektoru idler fotonu složí interferenční obrazec či nikoliv, v kvantové procházce na mřížce odložená volba vybere část z pravděpodobnostního rozdělení procházky idler fotonu odpovídající vybrané polarizaci fotonu. Po působení odpovídajícím projektorem na vlnovou funkci idler fotonu by pravděpodobnostní rozdělení mělo odpovídat experimentálním výsledkům. Pro odloženou volbu v bázi $(|H\rangle, |V\rangle)$ jsou tyto projektory

$$P_{|H\rangle} = \mathbb{I} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{a} \quad P_{|V\rangle} = \mathbb{I} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Pro numerickou simulaci soustavy v [4] je důležité podotknout, že ač to vypadá, že druhý foton se prochází na mřížce popsané v kapitole 2, není tomu tak. Pokud zavádíme procházku jedné částice s vyšší dimenzí konstruovanou podobně jako v tomto textu, zvyšuje se s každou prostorovou dimenzí dimenze Hilbertova prostoru vnitřního stavu mince kvůli zvýšenému počtu stupňů volnosti. V článku [4] má ale foton stále jen dvou-dimenzionální prostor mince, což je umožněno tím, že se částice neposouvá v obou směrech pomocí jednoho působení čtyř-dimenzionálního operátoru mince, ale dvěma hody mince po sobě. Pokud numericky simulujeme tento systém s počátečním stavem $|\psi^+\rangle$, pak pravděpodobnostní distribuce druhé částice na mřížce po čtyřech krocích bude Obr:4.2a. Pokud provedeme odloženou volbu na polarizaci $|V\rangle$ pomocí $P_{|V\rangle}$, získáme pravděpodobnostní rozdělení druhé částice Obr:4.2b. A rozdělení při odložené volbě $|H\rangle$ je po zrcadlení v obou směrech totožné.

Pokud tyto výpočty srovnáme s výsledky experimentu, nalezneme vysokou podobnost. Kvůli odlišným ztrátám v jednotlivých částech obvodu zajišťující posun po mřížce jsou experimentální výsledky mírně zkreslené. Jinak je ale zřejmé, že jsme důsledky odložené volby úspěšně namodelovali. Demonstrovali jsme tak skutečnost, že měření prvního fotonu rozhodne o tom, jakým způsobem bude druhý foton interferovat se sebou během kvantové procházky.

Obrázek 4.2: Kvantová procházka na mřížce s odloženou volbou

(a) Numerická simulace pravděpodobnostního rozdělení druhé částice v kvantové procházce podle [4] s provázaným počátečním stavem $|\phi^+\rangle$ po čtyřech krocích. Uzly mřížky s lichými souřadnicemi s vždy nulovou pravděpodobností jsou vynechány.

(b) Numericky získané pravděpodobnostní rozdělení polohy detekce druhého fotonu v kvantové procházce s odloženou volbou a počátečním stavem $|\phi^+\rangle$. Měřením první částice byl vybrán stav mince $|V\rangle$. Opět vynecháváme liché uzly mřížky.

Závěr

V této práci bylo naším cílem seznámit se s modelem kvantové procházky, prozkoumat některé analytické metody užívané k jejím studiu a také vliv interakce a odložené volby na dynamiku systému.

Proto jsme nejdříve představili kvantovou procházku s diskrétními kroky s kvantovou částicí pohybující se po diskrétních polohách na přímce. Postupně jsme z klasického modelu náhodné procházky přešli ke kvantovému modelu. V textu jsme zavedli jednotlivé definice a vysvětlili základní principy. Poté jsme zkoumali Fourierovou analýzou a Slabou limitou pravděpodobnostní distribuce polohy nalezené částice. Výsledek Slabé limity nám umožnil předpovídat peaky pravděpodobnostního rozdělení pro různé počáteční stavy.

V další kapitole jsme se zabývali procházkou se dvěma částicemi. Opět jsme po zavedení provedli i analytické metody na odhad pravděpodobnostní distribuce. Z existence provázaných stavů částic jsme ukázali, že dvoučásticová procházka není triviálním rozšířením jednočásticové, a také, jaké důsledky to má pro procházku nerozlišitelných částic.

Po zavedení interakce mezi částicemi jsme prozkoumali symetrie systému, které jsme pak využili při hledání spektra evolučního operátoru. Při tomto jsme analytickým postupem obdrželi kvazienergie vázaných stavů, které vysvětlují vysokou pravděpodobnost nalezení obou částic na stejné poloze. Zde se nemálo spoléháme na výsledky našich zdrojů, protože rigorózní ověření všech potřebných kroků by bylo nad rámec této práce. Poté jsme numerickou simulací ověřili, že se přidáním interakce spojitá část spektra nemění.

Po uvedení do problematiky odložené volby pomocí popisu dvou experimentů jsme zkonstruovali kvantovou procházku s odloženou volbou na mřížce, jejíž předpovědi se shodovali s experimentálními výsledky v [4].

Během psaní této práce jsme byli upevněni v přesvědčení o důležitosti modelu kvantové procházky jak pro kvantovou informaci, tak pro jiné vědní obory. I z článků zabývajících se experimentální realizací procházky je nám jasné, že zkoumání kvantové procházky je a bude podstatné pro výzkum a konstrukci kvantových počítačů, či pro simulování kvantových systémů. A proto si myslíme, že si tento model zaslouží další výzkum.

Bibliografie

1. KADIAN, Karuna; GARHWAL, Sunita; KUMAR, Ajay. Quantum walk and its application domains: A systematic review. *Computer Science Review*. 2021, roč. 41, s. 100419. Dostupné z DOI: 10.1016/j.cosrev.2021.100419.
2. DOUGLAS, Brendan L; WANG, Jingbo B. A classical approach to the graph isomorphism problem using quantum walks. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. 2008, roč. 41, č. 7, s. 075303. Dostupné z DOI: 10.1088/1751-8113/41/7/075303.
3. CHILDS, Andrew M.; CLEVE, Richard; DEOTTO, Enrico; FARHI, Edward; GUTMANN, Sam; SPIELMAN, Daniel A. Exponential algorithmic speedup by a quantum walk. In: *Proceedings of the thirty-fifth ACM symposium on Theory of computing - STOC '03*. ACM Press, 2003. Dostupné z DOI: 10.1145/780542.780552.
4. JEONG, Youn-Chang; FRANCO, Carlo Di; LIM, Hyang-Tag; KIM, M.S.; KIM, Yoon-Ho. Experimental realization of a delayed-choice quantum walk. *Nature Communications*. 2013, roč. 4, č. 1. Dostupné z DOI: 10.1038/ncomms3471.
5. ŠTEFAŇÁK, Martin. *Quantum walks: habilitation thesis*. 2017.
6. PARÝZKOVÁ, Magdalena. *Kvantové procházky ve spojitém a diskrétním čase*. 2021.
7. MEYER, David A. From quantum cellular automata to quantum lattice gases. *Journal of Statistical Physics*. 1996, roč. 85, s. 551–574. Dostupné z DOI: <https://doi.org/10.1007/BF02199356>.
8. HLAVATÝ, Ladislav; ŠTEFAŇÁK, Martin. *Slabikář kvantové mechaniky*. 2018.
9. AMBAINIS, Andris; BACH, Eric; NAYAK, Ashwin; VISHWANATH, Ashwin; WATROUS, John. One-dimensional quantum walks. *Proceedings of the thirty-third annual ACM symposium on Theory of computing STOC*. 2001. Dostupné z DOI: 10.1145/380752.380757.
10. GRIMMETT, Geoffrey; JANSON, Svante; SCUDO, Petra F. Weak limits for quantum random walks. *Phys. Rev. E*. 2004, roč. 69. Dostupné z DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.69.026119>.
11. ŠTEFAŇÁK, M; BARNETT, S. M.; KOLLÁR, B.; KISS, T.; JEX, I. Directional correlations in quantum walks with two particles. *New Journal of Physics*. 2011, roč. 13, č. 3. Dostupné z DOI: 10.1088/1367-2630/13/3/033029.
12. LÖW, Oscar. *Quantum walks of interacting particles*. 2013.
13. OMAR, Y.; PAUNKOVIĆ, N.; SHERIDAN, L.; BOSE, S. Quantum walk on a line with two entangled particles. *Physical Review A*. 2006, roč. 74, č. 4. Dostupné z DOI: 10.1103/physreva.74.042304.

14. ŠTEFAŇÁK, M; KISS, T; JEX, I; MOHRING, B. The meeting problem in the quantum walk. *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 2006, roč. 39, č. 48, s. 14965–14983. Dostupné z DOI: 10.1088/0305-4470/39/48/009.
15. CHILDS, A. M.; GOSSET, D.; WEBB, Z. Universal Computation by Multi-particle Quantum Walk. *Science*. 2013, roč. 339, č. 6121, s. 791–794. Dostupné z DOI: 10.1126/science.1229957.
16. AHLBRECHT, Andre; ALBERTI, Andrea; MESCHÉDE, Dieter; SCHOLZ, Volkher B; WERNER, Albert H; WERNER, Reinhard F. Molecular binding in interacting quantum walks. *New Journal of Physics*. 2012, roč. 14, č. 7, s. 073050. Dostupné z DOI: 10.1088/1367-2630/14/7/073050.
17. BISIO, Alessandro; D’ARIANO, Giacomo; MOSCO, Nicola; PERINOTTI, Paolo; TOSINI, Alessandro. Solutions of a Two-Particle Interacting Quantum Walk. *Entropy*. 2018, roč. 20, č. 6, s. 435. Dostupné z DOI: 10.3390/e20060435.
18. JACQUES, Vincent; WU, E; GROSSHANS, Frédéric; TREUSSART, Francois; GRANGIER, Philippe; ASPECT, Alain; ROCH, Jean-Francois. Experimental Realization of Wheeler’s Delayed-Choice Gedanken Experiment. *Science*. 2007, roč. 315, č. 5814, s. 966–968. Dostupné z DOI: 10.1126/science.1136303.
19. KIM, Yoon-Ho; YU, Rong; KULIK, Sergei P.; SHIH, Yanhua; SCULLY, Marlan O. Delayed “Choice” Quantum Eraser. *Physical Review Letters*. 2000, roč. 84, č. 1, s. 1–5. Dostupné z DOI: 10.1103/physrevlett.84.1.
20. MA, Xiao-Song; KOFLER, Johannes; QARRY, Angie; TETIK, Nuray; SCHEIDL, Thomas; URSIN, Rupert; RAMELOW, Sven; HERBST, Thomas; RATSCHBACHER, Lothar; FEDRIZZI, Alessandro; JENNEWEIN, Thomas; ZEILINGER, Anton. Quantum erasure with causally disconnected choice. *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2013, roč. 110, č. 4, s. 1221–1226. Dostupné z DOI: 10.1073/pnas.1213201110.