Chap.1 What is Quantum Mechanics

劉長遠

要了解 Quantum Computer,讀者必須對子力學有一些基本概念,因此本章的目的並非講解物理,而是簡介量子力學中所用的符號,以及那些符號所代表的意義.只要略有普物及線性代數的基本常識,應不難理解.

I. 揭開序幕—奇怪的 Stern-Gerlach 實驗

量子力學起緣於本世紀初期,目前已經是一門相當成熟的學說.由於在本世紀初,傳統牛頓力學無法解釋許多實驗的結果,具有完全不同思考基礎的量子力學才開始萌芽.在那些使科學家質疑傳統物理學的實驗當中,雙狹縫干涉,黑體輻射都是其中大家耳熟能詳的,而 Stern-Gerlach 實驗則最能闡示量子力學的基本概念.

Stern-Gerlach實驗社計於 1922 年,相當容易理解,事實上就是利用磁場來分離不同大小,方向的自旋(spin)原子的實驗.如果讀者不知道自旋是什麼,不妨想想陀螺的自轉,是一種向量,應該符合傳統向量分析的一切規則.

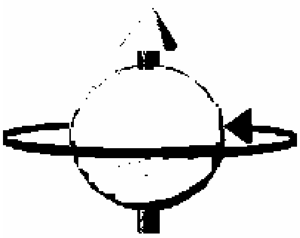

Fig1.自旋

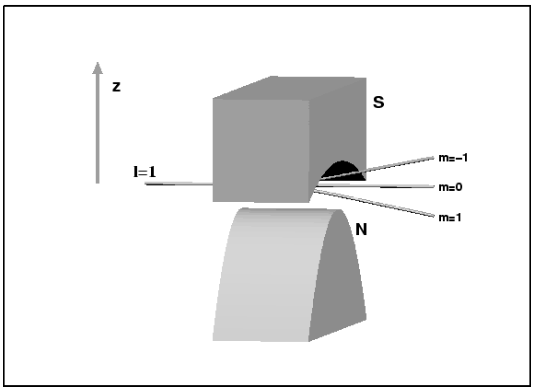

Fig2. Stern-Gerlach 實驗

自旋可以有個種方向,但是同一種原子的自旋質是固定的,當具有自旋的原子通過,場時,其行進方向會受到磁場影響而偏折(很像帶電粒子通過電場會偏折),而偏折量應與其自旋方向及大小有關.Stern-Gerlach 的實驗顯示:不管磁場方向為何,所測得的自旋值只有兩種, +h/2 和-h/2,分別代表與磁場同向與反向(h=6.5822E-16 eV-s).這和古典物理所預期的相當不同:一堆亂糟糟的原子,其自旋方向也應成均勻分布,因此自旋在特定方向的投影應該連續分布在某一區間,而不是只落於+h/2及-h/2 兩點.下面的實驗則更具有啟發性:

為方便起見,我們用 Sx,Sy,Sz來代表三個互相垂直方向的自旋,(Sx,+)表示 x方向的自旋是+h./2, 以此類推.假設現在進行一連串的 Stern-Gerlach 實驗:先由一群自旋原子之中篩選出(Sz,+),很顯然地,如果將些(Sz,+)原子再做一次(Sz,+)篩選,應該全數通過(否則怎能稱之為"篩選");反之,它們沒有一個能通過(Sz,-)的篩選過程.

接著,將(Sz,+)的這群原子再做一次(Sx,+)的篩選,結果相當符合傳統的預測,約有一半的原子通過篩選.現在,這一批原子的自旋應合於"在 x 和 z 方向均為正"了吧?為了保險起見,我們可將這一批先通過(Sz,+),又通過(Sx,+)檢查的"精選"原子再做一次(Sz,+)篩選,照理說,它們應該全部都通過,但是結果竟然是:這些原子只有一半是(Sz,+),另一半是(Sz,-).

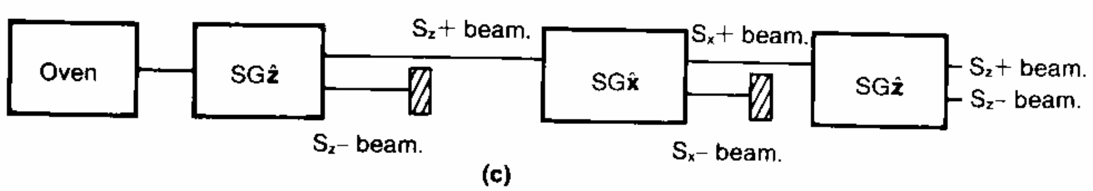

Fig3. Sequential Stern-Gerlach 實驗

這結果到底說明了什麼呢?第一點是:原子的自旋狀態會受到篩選過程(事實上就是一種測量的破壞.第二點是:在此實驗中,雖然 x 軸和 z 軸互相垂直,自旋的 x 和 z 方向卻並非獨立(想想在解決自由落體問題中,我們通常都把互相垂直的分量獨立處理),我們永遠無法同時精確地知道一個原子自旋的 x 分量及 z 分量.

這就是量子力學的核心.如果把這種情況帶入我們熟知的電腦,會發生什麼事呢?這表示:每個位元不一定是獨立的;此外,當我們僅僅想要觀查(不是設定)某一個位元的值,就可能改變整個系統(包括被觀查位元本身)的狀態.

這是一個新世界.

II. Dirac Notation and Operators

在繼續往下說之前,讀者必須了解一下量子力學中慣用的一些計號,事實上,這些記號所代表的東西大家早已熟悉,像是向量,內積,向量的大小,矩陣相乘等等.這套計號名為 Dirac Notation.雖然 Dirac Notation 骨子裡就是線性代數的同一套東西,但是它對學物理的人而言,卻相當好用及方便.

|V>這個記號相當於向量 $(v_1, v_2, \cdots v_n)^T$,V1…Vn 可以是複數, | >的計號被稱作 ket

<V|表示|V>的轉置矩陣 $(v_1^*, v_2^*, \cdots v_n^*)$,*表共軛複數,< |的記號稱作 bra

$< U \mid V >= (u_1^*, u_2^*, \cdots u_n^*)(v_1, v_2, \cdots v_n)^T = \sum_{i=1}^{n} u_i v_i$ 其實就是 U 和 V 的內積

如果<U|V>=0,則 U 和 V 互相垂直(orthogonal).

$< V \mid V >= \sum_{i=1}^{n} | v_i |^2 \geq 0$,為 V 長度的平方.

向量|V>的 v1…vn 值會隨著基底向量(即坐標軸)的不同而變換.如果選擇的向量基底為互相垂直的單位向量,<V|V>的大小並不會變(也就是在坐標軸旋轉,向量的大小並不會改變).通常我們所用到的都是單位向量.

接下來就要介紹矩陣,在量子力學中,'matrix','operator','observable'指的都是矩陣.矩陣可以作用在向量上,造成旋轉等效果.矩陣元素的值也會隨著基底向量的不同而改變.例如:能使向量對 z 軸旋轉 45?的矩陣在坐標變換以後,其元素就可能改變.假設一個三維的歐幾里德坐標系,其基底向量為|i>,|j>,|k>,則 3*3 矩陣Ω的元素Ωij 就是<i|Ω|j>,這點很容易從矩陣的特性得知.

接下來要介紹特徵向量(eigenvector)和特徵值(eigenvalue).如果向量|V>符合

A|V>=v|V>　　　　其中 A 是矩陣,v 是一個複數

我們稱|V>是矩陣 A 的 eigenvector,而 v 是 eigenvalue. Eigenvector 和 eigenvalue 在線性代數中都應有詳盡的討論.在量子力學中我們稱 eigenvector 為 eigenket,下一節中我們將討論 eigenket 及 eigenvalue 在量子力學中的意義.通常在量子力學中,eigenket 均為單位向量.

各種矩陣中,值得再提的是'Hermitian operator'和'Unitary operator'.
首先,我們定義矩陣Ω的「轉置共軛矩陣」 Ω^+為Ω^+ij=Ω^*ji, *表共軛複數.

如果一矩陣具有特性$\Omega = \Omega^+$,則稱其為 Hermitian operator.它具有一項重要性質:如果|a1>和|a2>都是的 eigenket 而且 eigenvalue a1≠a2,則<a1|a2>=0.因此在 N 維空間中,對每一個 Hermitian operator,可找到一組 N 個互相垂直(orthogonal)的 eigenket.

事實上,這些 eigenket 可以構成一組基底向量.

而 Unitary operator U 則是 $U^{+}=U^{-1}$,U^{-1} 是 U 的反矩鎮.Unitary operator 具有下列性質:任兩個巷量 U 及 V 經過Ω轉換後,其內積不會變.
(Hint:請自行證明如果Ω是 unitary operator, |U’>=Ω|U>, |V’>=Ω|V>時,<U’|V’>=<U|V>)

以上都是一些基礎的線性代數.下一節我們可來看看怎樣運用這些來表示量子力學.

III. 上帝的骰子 — 一切都是觀測的錯

愛因斯坦曾經對量子力學說過一句很有名的話:”我不相信上帝會和人們玩骰子遊戲”,為什麼量子力學好像在擲骰子呢?讀者很快就能知道了.

我們已在 Stern-Gerlach 實驗中看到觀測如何改變系統的狀態,而這個改變卻並不是實驗裝置不夠精密所能解釋的.事實上,還有許多實驗也是這個情形.那麼,有沒有可能是「觀測」這件事,不僅僅是讓人們「知道」物理系統的狀態,而且也不可避免地讓系統發生變化…再想深一層, 「觀測」真的能讓人們精確地知道系統的狀態嗎?比如說一個粒子的自旋為(+,-,+),顯然不具意義,因為我們根本不可能同時知道 Sx 及 Sz 的值;以此類推,說一個粒子位於坐標(3,5,7)難道就有意義了嗎?顯然有待商榷.我們似要重建對「觀測」的概念.

事實上,當我們說某物在某個位置,某物具有某個速度,都已先假設至少在某一瞬間,物質是被「釘」在某個特定的狀態,而描述這個狀態的參數都是「人們」 (不是上帝)用一些可觀測的量所定出的,比如說:人們常常用下面的話來描述一個電子的狀態:在 1.5 秒時電子的位置在(0,0),速度為 700km/sec.如果在造物者的法典上,物體並不一定具有特定的位置,而是像一團模糊的影像,「分布」在一個特定而極小的區域,當人們觀測的尺度很大時,以為物體就在那一「點」上(這是牛頓力學的尺度),但是一旦他們縮小尺度(到原子的尺寸),就會對看到的影像迷惑不已.如果真有這樣一個造物者,他們可能在? 揄著說:「誰教你們要看那麼仔細!」

當然,我們並不曉得是不是有這樣一個上帝,只知道實驗結果看起來似乎如此.由於科學家及工程師們只能透過觀察來了解物質世界,不可能棄觀測於不顧,只好發展了一套新理論來重新定義「系統狀態」及「觀測」,以符合新的實驗結果,同時和傳統牛頓力學相容,在這個新理論中,「觀測」是主角,而最重要的概念就是「機率」.

很奇怪吧?下面我用大家所熟悉的電腦系統來說明量子力學的架構,想像我們用一個具有自旋的原子來當做電討裡的一個位元,會有什麼不一樣呢?

一個一位元的系統,傳統上它的值不是 0 就是 1,但是在量子力學中,卻用一個三維的向量來表示:

$|0>=(1 \quad 0)^T \qquad |1>=(0 \quad 1)^T$ 分別表示位元狀態為 0 及 1

以|0>和|1>做基底向量,假設位元的狀態是

$|y>=(v_0 \quad v_1)^T$ v_0,v_1 為複數,|Ψ>為單位向量

<0|Ψ>= v_0 是在|0>方向的投影, <1|Ψ>= v_1 則是在|1>方向的投影,但究竟有什麼意思呢?讓我們大膽的假設$|v_0|^2$ 和$|v_1|^2$ 就是觀測此位元時得到 0 或 1 的機率!由於是單位向量,$|v_0|^2+|v_1|^2=1$,因此測到 0 及 1 的總機率為 1.

接著我們來看看什麼是"測良",雖然測量會改變系統狀太,但是當我們觀查位元值時,得到的結果不是 0 就是 1,並不會看到 0.3,0.5 等其它的結果.因此當觀察之後,位元狀態必定跳躍到|0>或|1>,這就是為什麼"觀測"會改變系統狀態了.唯一例外是,如果系統狀態原本就是|0>或|1>,經過觀察後,它們仍會百分之百地停留在原來的狀態.

|Ψ>——<觀測>——有$|v_i|^2$的機會—>觀測後狀態為|i>,即測得位元值=i.(i=0 或 1)

如果以你是第一次接觸到量子力學,必然會感到不可思議,但是請耐心地看下去.讓我們現在回到 Stern-Gerlach 實驗,可以更清楚地理解到觀測的意義.

假設我們設 $|Sz,+>=(1 \quad 0)^T$, $|Sz,->=(0 \quad 1)^T$ 為基底向量.現在有一個自旋原子的狀態為|Sz,+>,然後我們再將其通過(Sx,+)篩選(就像 Sequential Stern-Gerlach 實驗中所做的),結果發現有一半的機率變成|Sx,+>,這表示$|<Sx,+|Sz,+>|^2=1/2$.由這點可假設$|Sx,+>=(1/\sqrt{2} \quad 1/\sqrt{2})^T=1/\sqrt{2}(|Sz,+>+|Sz,->)$.一旦通過篩選,此原子的狀態就變成|Sx,+>,如果我們再做一次(Sz,+)篩選,通過篩選的機會是$|<Sx,+|Sz,+>|^2=1/2$,和實驗的結果全然符合.

由於經過觀測後,被測物會轉變成由觀測所決定的某幾個狀態之一(就像做 Sx 測量就會使自旋原子變成|Sx,+>或|Sx,->的狀態),而這些狀太的是互斥的(自旋不能可又是正,又是負).量子力學中用 Hermitian operator 來定義「測量」或「觀察」 (學物理的人稱其為 observable),這個矩陣的一組 eigenvalue 表示可能測量到的值,而其互相垂直的 eigenket 則代表觀測後可能的狀態.

舉例而言,我們可用 $Sz = \frac{h}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$代表 z 方向的自旋測量,它的 eigenvalue 是 h/2 及-h/2,而 eigenket 為$|0>=(1 \quad 0)^T$ 和$|1>=(0 \quad 1)^T$ .x 方向的自旋測量 Sx 則可定義成 $Sz = \frac{h}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$,有興趣的讀者不妨算出它的 eigenvalue 及 eigenket 來.

量子系統並不是停滯不動的,通常它的狀態隨時間變化.我們可以用 unitary operator U 來表示它的演化.如果系統的初始狀態是,一段時間後就成為,因為 U 是 unitary operator ,所以當它作用在單位向量上,向量的大小仍維持在 1,這保證了總機率為 1 的特性.在物理系統中,U 就像是傳統力學中的運動方程式,在下章要探討的量子計算機中,如何設計 Unitary operator就像目前電腦的CPU設計一,是建構的重點.

或許讀者會懷疑:即使做得出這種奇怪的計算機,又有什哦用?舉一各簡單的例子,我們可以用量子計算機來輟一各「真正的亂數產生器」,而亂數的分布是可自行設定的.也可以用量子計算機來,迅速地作龐大的統計問題.因為「機率」本身就是量子系統的特性.而更讓物理學家們期待的,適用這樣的計算機去模擬一些需要付出昂貴代價,而目前 Turing machine 無法勝任的量子物理實驗,「用大自然去模擬大自然」大概就是最適切的一句話吧?