

MITSCHRIEB ZUR VORLESUNG: NANOELEKTRONIK

Prof. Dr. Schön und Dr. Shnirman

Vorlesung Wintersemester 2004/2005

Letzte Aktualisierung und Verbesserung: 26. April 2008

Mitschrieb der Vorlesung NANOELEKTRONIK
von Herrn Prof. Dr. SCHÖN und Dr. SHNIRMAN im Wintersemester 2004/2005
von MARCO SCHRECK.

Dieser Mitschrieb erhebt keinen Anspruch auf Vollständigkeit und Korrektheit.
Kommentare, Fehler und Vorschläge und konstruktive Kritik bitte an Marco.Schreck@gmx.de.

Inhaltsverzeichnis

1 P(E)-Theorie	5
1.1 Übung: „P(E)-Theorie“/CALDEIRA-LEGETT-Modell	5
1.1.1 Kanonische Transformation	7
2 Spintronik (Spin-Elektronik)	9
2.1 Iteranter Ferromagnet (Band-Ferromagnet)	9
2.2 Tunnel-Magnetowiderstand (TMR)	10
2.2.1 JULLIERE-Modell	10
2.2.2 Beliebiger Winkel (SLONCZEWSKI (89))	12
2.2.3 Spin-Anhäufung (Spin-Akkumulation)	13
2.2.4 Spin-Relaxation	14
2.3 GMR – Giant Magnetoresistance (Gigantischer Magnetowiderstand)	15
2.3.1 Physikalisches Bild	16
2.3.2 Beispiel	16
2.4 Spin-Bahn-Effekte	18
2.4.1 Mikroskopische Spin-Bahn-Kopplung (Spin-Orbit-Coupling)	18
2.4.2 DATTA-DAS-Transistor	20
2.4.3 Spin-Filter	20
3 Quantencomputer	23
3.1 Konzepte	23
3.1.1 Quantenmechanik von Spins	23
3.1.2 RABI-Oszillationen	26
3.1.3 Mehrere Spins	27
3.2 Quantencomputer	27
3.3 Elemente von Quantencomputern	30
3.3.1 Quanten-Parallelität	30
3.3.2 Beispiel: FOURIER-Transformation	32
3.3.3 Fehlerkorrektur	32
3.4 Anforderungen für Quanten-Informationssysteme	32
3.4.1 Physikalische Realisierung von Qubits	32
3.5 Supraleitung	33
3.6 Kohärenz und Dekohärenz	34
3.6.1 Die BLOCHgleichung	34
3.6.2 Relaxation T_1 (transversales Rauschen)	35
3.7 Pure Dephasierung (für longitudinales Rauschen)	37
3.8 Longitudinales und transversales Rauschen	38
3.8.1 $1/f$ -Rauschen	38
3.9 Adiabatisches Quantenrechnen (adiabatic quantum computation)	38
3.9.1 NP-vollständige Probleme	39
3.9.2 TURING-Maschine	39
3.9.3 Adiabatisches Theorem	40
3.9.4 Adiabatischer Quantenalgorithmus	40
3.10 Laufzeitverhalten und Dephasierung	41

Kapitel 1

P(E)-Theorie

Stromschwankungen werden $\Delta I(t)$ werden durch das JOHNSON-NYQUIST-Rauschen beschrieben:

$$\langle \delta I \delta I \rangle_\omega \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') \exp[i\omega(t-t')] \cdot \frac{1}{2} \langle \{\delta I(t), \delta I(t')\} \rangle = \operatorname{Re} (Z^{-1}(\omega)) \hbar \omega \cdot \coth \left(\frac{\hbar \omega}{2k_B T} \right)$$

Hierbei gilt für die Mittelwerte $\langle \delta I(t) \rangle = 0$, aber $\langle \delta I(t)^2 \rangle \neq 0$.

$$S_I(\omega) = \int d(t-t') \exp[i\omega(t-t')] \langle \delta I(t), \delta I(t') \rangle$$

bezeichnet man auch als Rauschfunktion. Für $\hbar \omega \ll k_B T$ gilt:

$$\langle \delta I \delta I \rangle_\omega \approx \frac{2k_B T}{Z(\omega)}$$

1.1 Übung: „P(E)-Theorie“ / Caldeira-Legett-Modell

Man nimmt an, dass es ein Bad von harmonischen Oszillatoren gibt. Das letzte mal haben wir die Phase

$$\hbar \varphi(t) = \int^t e \cdot V(t') dt'$$

eingeführt, die dimensionslos ist. Die Phase ergibt sich als Summe

$$\varphi = \sum_i c_i \cdot x_i$$

wobei x_i die Koordinaten der Oszillatoren und c_i irgendwelche Kopplungskonstanten sind. Der HAMILTON-Operator dieses Bades lässt sich dann schreiben als:

$$H_{bath} = \sum_i \left[\frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{m_i \cdot \Omega_i^2 \cdot x_i^2}{2} \right]$$

Wir sind nun an den Eigenschaften von $\varphi(t)$ interessiert. Dazu berechnen wir den Korrelator $\langle \varphi(t) \varphi(t') \rangle$:

$$\langle \varphi(t) \varphi(t') \rangle = \sum_z \varrho(z) \langle z | \varphi(t) \varphi(t') | z \rangle$$

Dies gilt, wenn die Dichtematrix $\varrho(z)$ diagonal ist. Mit $\varphi(t)$ meinen wir die Operatoren im HEISENBERG-Bild. Sind die Dichtematrizen nicht diagonal, so folgt:

$$\langle \varphi(t) \varphi(t') \rangle = \operatorname{Sp}(\varrho \varphi(t) \varphi(t'))$$

Betrachten wir zunächst einen einzigen Oszillator, also $i = 1$:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\Omega}} (a^\dagger + a) \quad \text{und} \quad i\sqrt{\frac{\hbar m \Omega}{2}} (a^\dagger - a)$$

Ein Operator $A(t)$ im HEISENBERG-Bild ergibt sich durch eine unitäre Transformation aus dem Operator A im SCHRÖDINGER-Bild:

$$A(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}Ht\right) A \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Ht\right)$$

Mit den Erzeugern a^\dagger und Vernichtern a lässt sich dann H schreiben als:

$$H_{\text{bath}} = \sum_i \hbar\Omega_i \left(a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2} \right)$$

Wir transformieren a^\dagger ins HEISENBERG-Bild:

$$a^\dagger(t) = \exp(i\Omega a^\dagger a \cdot t) a^\dagger \exp(-i\Omega a^\dagger a \cdot t) = \exp(i\Omega t) a^\dagger \text{ und } a(t) = \exp(-i\Omega t) a$$

Damit können wir den Korrelator zweier x -Operatoren berechnen:

$$\langle x(t)x(t') \rangle = \frac{\hbar}{2m\Omega} \langle (a^\dagger \exp(i\Omega t) + a \exp(-i\Omega t)) (a^\dagger \exp(i\Omega t') + a \exp(-i\Omega t')) \rangle$$

Es gilt $\langle a^\dagger a^\dagger \rangle = 0 = \langle aa \rangle$. Damit folgt weiter:

$$\langle x(t)x(t') \rangle = \frac{\hbar}{2m\Omega} [\langle a^\dagger a \rangle \exp(i\Omega(t-t')) + \langle aa^\dagger \rangle \exp(-i\Omega(t-t'))]$$

Mit

$$\langle a^\dagger a \rangle = \langle n \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\Omega}{k_B T}\right) - 1} \text{ und } \langle aa^\dagger \rangle = \langle n+1 \rangle = \langle n \rangle + 1$$

folgt weiterhin:

$$\langle x(t)x(t') \rangle = \frac{\hbar}{2m\Omega} [(2\langle n \rangle + 1) \cdot \cos(\Omega(t-t')) - i \sin(\Omega(t-t'))]$$

Dabei handelt es sich um einen unsymmetrisierten Korrelator, da $\langle x(t)x(t') \rangle \neq \langle x(t')x(t) \rangle$ ist. Wir wollen nun die FOURIER-Transformierte des Korrelators berechnen:

$$\begin{aligned} \langle x(t)x(t') \rangle_\omega &= \langle x_\omega^2 \rangle = \int \exp(i\omega t) \langle x(t)x(0) \rangle dt = \\ &= \frac{\hbar}{2m\Omega} [\langle n \rangle \cdot 2\pi\delta(\Omega + \omega) + (\langle n \rangle + 1) \cdot 2\pi\delta(\omega - \Omega)] \end{aligned}$$

Auch im FOURIERraum ist der Korrelator nicht symmetrisch. Damit können wir auch den Korrelator von $\varphi(t)$ berechnen:

$$\langle \varphi(t)\varphi(t') \rangle_\omega = \langle \varphi_\omega \rangle^2 = \sum_i \frac{2\pi \cdot c_i^2 \cdot \hbar}{2m_i \cdot \Omega_i} \cdot [n_i \delta(\omega + \Omega_i) + (n_i + 1) \delta(\omega - \Omega_i)]$$

Wir definieren nun die spektrale Dichte für $\omega > 0$:

$$J(\omega) = \pi \sum_i \frac{c_i^2 \cdot \hbar}{2m_i \cdot \Omega_i} \cdot \delta(\omega - \Omega_i)$$

Damit können wir schreiben:

$$\langle \varphi_{\omega>0}^2 \rangle = 2J(|\omega|) (n(|\omega|) + 1) \text{ mit } n(\omega) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar|\omega|}{k_B T}\right) - 1}$$

Dies hat nur dann eine Bedeutung, wenn man viele Oszillatoren hat. Für $\omega < 0$ können wir schreiben:

$$\langle \varphi_{\omega<0}^2 \rangle = 2J(|\omega|) n(|\omega|)$$

Außerdem können wir $S_\varphi(\omega)$ angeben:

$$S_\varphi(\omega) = \frac{\langle \varphi_\omega^2 \rangle + \langle \varphi_{-\omega}^2 \rangle}{2} = J(|\omega|) \cdot (2n(|\omega|) + 1) \text{ mit } 2n(|\omega|) + 1 = \coth\left(\frac{\hbar|\omega|}{2k_B T}\right)$$

$$S_\varphi(\omega) = J(|\omega|) \coth\left(\frac{\hbar|\omega|}{2k_B T}\right)$$

Wir definieren nun $J(-\omega) = -J(\omega)$ und man erhält endlich:

$$S_\varphi = J(\omega) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right)$$

Was bringt uns das jetzt für die Physik und speziell die Elektrotechnik? Haben wir eine Spannung V , so ergibt sich folgender Korrelator:

$$S_V = \text{Re}[Z_t(\omega)] \cdot \hbar\omega \cdot \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right)$$

Im FOURIERraum gilt $\varphi(t) = \frac{e \cdot V_\omega}{\hbar \cdot (\pm i\omega)}$ und damit:

$$S_\varphi = \frac{e^2}{\hbar^2 \omega^2} \varphi V$$

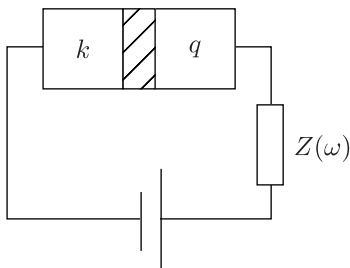
Wir treffen die Wahl

$$J(\omega) = \frac{e^2}{\hbar\omega} \text{Re}(Z_t(\omega))$$

um die korrekte Rauschfunktion zu erhalten. Für Fluktuationen des Stroms gilt:

$$S_I = \text{Re}\left[\frac{1}{Z(\omega)}\right] \hbar\omega \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right)$$

1.1.1 Kanonische Transformation



Wir betrachten folgenden HAMILTON-Operator:

$$H = \sum_{k,\sigma} (\varepsilon_k + eV + e\delta V(t)) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{q,\sigma} \varepsilon_q c_{q\sigma}^\dagger c_{q\sigma} + \sum_{k,q,\sigma} T_{k,q} c_{k\sigma}^\dagger c_{q\sigma}$$

Der dritte Operator beschreibt einen Tunnelstrom. Wir betrachten als Übung zuerst $\delta V(t)$ als klassischen Wert. Kanonische Transformationen in der Quantenmechanik sind nichts anderes als Basiswechsel. Haben wir also eine Wellenfunktion ψ mit der SCHRÖDINGER-Gleichung $i\hbar\dot{\psi} = H\psi$, so möchten wir ψ in einem anderen Basissystem angeben. Es sei dann $\psi' = U\psi$ und $i\hbar\dot{\psi}' = H'\psi'$, wobei U die unitäre Transformation sei. Mit $\psi = U^{-1}\psi'$ folgt dann:

$$i\hbar\dot{\psi}' = i\hbar\dot{U}\psi + i\hbar U\dot{\psi} = i\hbar\dot{U}\psi + UH\psi = [i\hbar\dot{U}U^{-1} + UHU^{-1}] \psi'$$

Es ist damit:

$$H' = i\hbar\dot{U}U^{-1} + UHU^{-1} \text{ mit } U^{-1} = U^\dagger$$

Ist U zeitunabhängig, so fällt der erste Term weg. Wir wählen nun die unitäre Transformation folgendermaßen:

$$U(t) = \exp\left(i\delta\varphi(t) \sum_{k,\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}\right) \text{ und } U^{-1} = U^\dagger = \exp\left(-i\delta\varphi(t) \sum_{k,\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}\right)$$

Jedem Elektron wollen wir eine zusätzliche Phase geben. Damit folgt:

$$\delta\varphi(t) = \frac{e}{\hbar} \int^t \delta V(t') dt'$$

$$i\hbar\dot{U}U^{-1} = i\hbar \left(i\dot{\delta\varphi} \sum_{k,\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \right) UU^{-1} = -\hbar\dot{\delta\varphi} \sum_{k,\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \text{ mit } \hbar\dot{\delta\varphi} = e\delta V(t)$$

Wir wollen nun UHU^{-1} berechnen. Dazu betrachten wir:

$$Uc_{k\sigma}^\dagger U^{-1} = \exp\left(i\delta\varphi c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma}\right) c_{k,\sigma}^\dagger \exp\left(-i\delta\varphi c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}\right) = \exp(i\delta\varphi) c_{k\sigma}^\dagger$$

Außerdem gilt $Uc_q U^{-1} = c_q$. Sei δV nun ein Operator:

$$H = \sum_{k,\sigma} (\varepsilon_k + eV + e\delta\hat{V}) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{q,\sigma} \varepsilon_q c_{q\sigma}^\dagger c_{q\sigma} + \sum_{k,q,\sigma} T_{k,q} c_{k\sigma}^\dagger c_{q\sigma}$$

Die unitäre Transformation lautet damit:

$$U = \exp\left(i\delta\hat{\varphi} \sum_{k,\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}\right)$$

Da \hat{U} nun zeitunabhängig ist, gilt $H' = UHU^{-1}$.

$$\delta\varphi = \sum c_i \hat{x}_i$$

$$Uc_{k\sigma}^\dagger U^{-1} = \exp(i\delta\hat{\varphi}) c_{k\sigma}^\dagger$$

$$Uc_{k\sigma} U^{-1} = \exp(-i\delta\hat{\varphi}) c_{k,\sigma}$$

Wir benötigen nun noch:

$$U \left(\sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} \right) U^{-1}$$

$$\exp(iax)p \exp(-iax) = p - \hbar a$$

Dies erhält man mit der Kommutatorrelation $xp - px = i\hbar$.

$$\sum_n \frac{(iax)^n}{n!} p \exp(-iax)$$

$$x^n p = x^{n-1} xp = x^{n-1}$$

Kapitel 2

Spintronik (Spin-Elektronik)

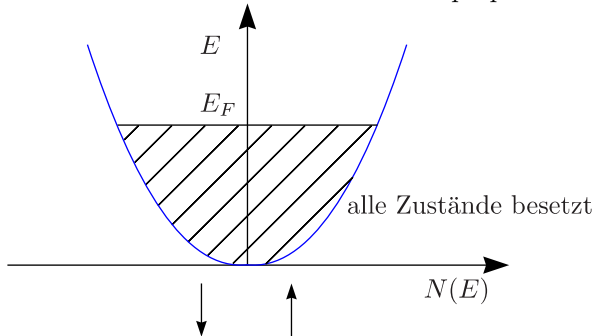
Bei diesem Thema geht es um spinabhängige elektronische Transportprozesse.

2.1 Iteranter Ferromagnet (Band-Ferromagnet)

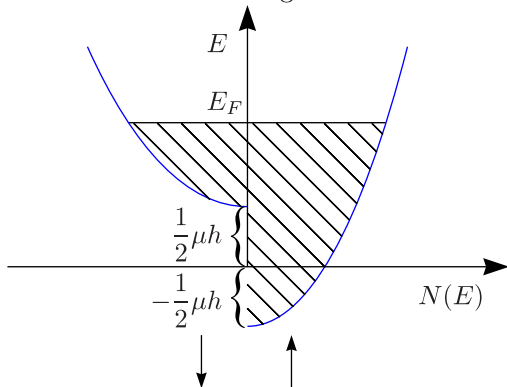
Dabei handelt es sich um einen polarisierten Ferromagneten, bei dem die Elektronen nicht lokalisiert, sondern frei sind. Beispiele dafür sind Eisen (Fe) und Cobalt (Co). Wir können dann folgenden HAMILTONoperator ansetzen, wobei m eine effektive Masse sei:

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(x) - \mu\vec{h} \cdot \vec{s}$$

\vec{h} sei ein Magnetfeld (Austauschfeld) und $\vec{s} = \frac{1}{2}\vec{\sigma}$ der Spinoperator mit $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$. In einem dreidimensionalen Metall ist die Zustandsdichte proportional zu \sqrt{E} :



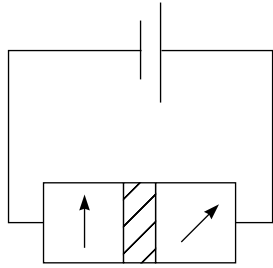
In einem Band-Ferromagneten sieht dies anders aus, wobei wir ein Feld der Form $\vec{h} = (0, 0, h)$ betrachten:



Es liegt also eine Mehrheit von Elektronen mit Spin \uparrow vor, wobei die Elektronen mit Spin \downarrow in der Minderheit sind. Wir bezeichnen nun die Anzahl der Elektronen mit Spin \uparrow mit dem Index M und die mit Spin \downarrow mit m :

$$N_M = N\left(E_F + \frac{\mu h}{2}\right), \quad N_m = N\left(E_F - \frac{\mu h}{2}\right)$$

2.2 Tunnel-Magnetowiderstand (TMR)



Wir können den HAMILTONoperator schreiben als:

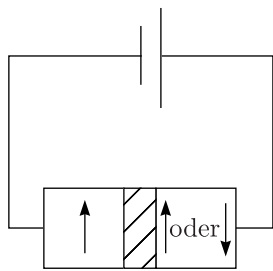
$$H = H_L + H_R + \sum_{q,k,\sigma} T_{q,k} c_{k\sigma}^\dagger c_{q\sigma} + \text{hermitesch konjugiert}$$

Ohne Herleitung notieren wir uns:

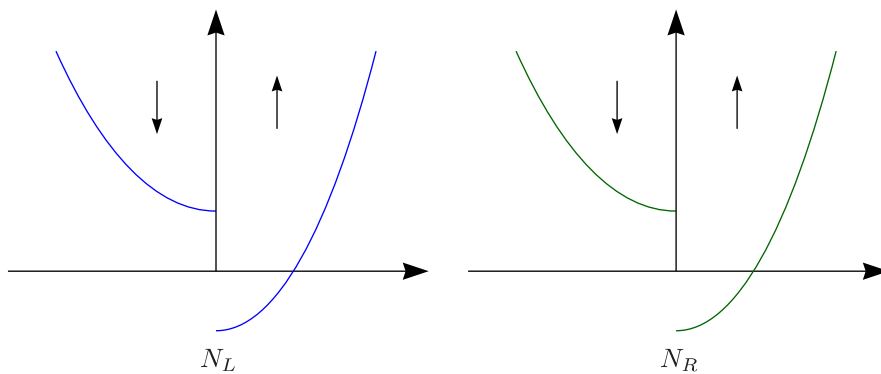
$$\frac{1}{R_T} = G_T = 2 \cdot \frac{2\pi e^2}{\hbar} \cdot |T|^2 N_L N_R \text{ mit } N_L = \tilde{N}_L \cdot V_L \text{ und } N_R = \tilde{N}_R \cdot V_R$$

Der zusätzliche Faktor zwei kommt von der Berücksichtigung des Spins.

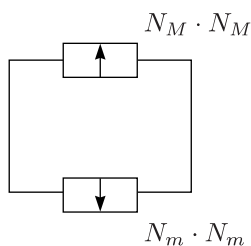
2.2.1 Julliere-Modell



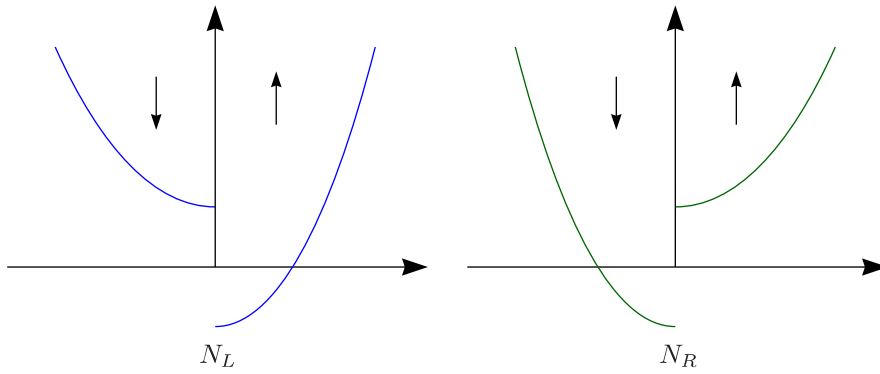
a.) Parallel:



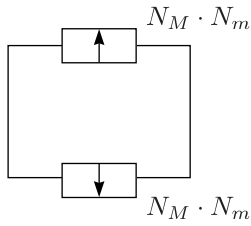
$$G^P = \frac{2\pi e^2}{\hbar} |T|^2 (N_M^2 + N_m^2)$$



b.) Antiparallel:



$$G^{AP} = \frac{2\pi e^2}{\hbar} |T|^2 \cdot 2N_M N_m$$



Die Polarisierung ist gegeben durch

$$P = \frac{N_M - N_m}{N_M + N_m}$$

und das magnetische Moment M mit $P \neq M$ berechnet sich durch Integration:

$$M = \int_0^{E_F} \left[N \left(E - \frac{\hbar\mu}{2} \right) - N \left(E + \frac{\hbar\mu}{2} \right) \right] dE$$

Ist $P = 1$, so handelt es sich um ein Halbmetall, bei $P = 0$ spricht man von einem normalen Metall.

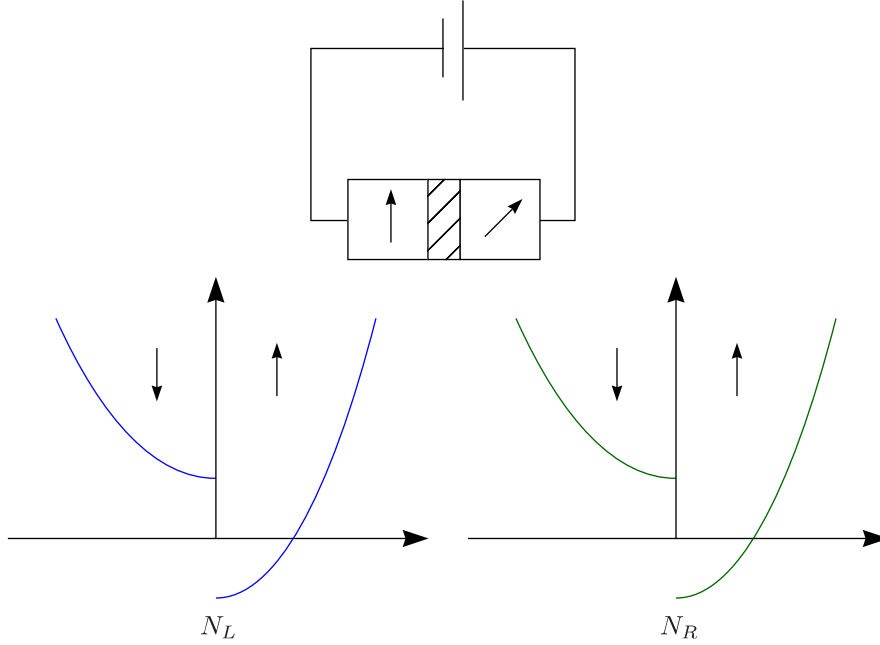
Zusammenfassend können wir die Ausdrücke für den Leitwert schreiben als:

$$G^{P/AP} = \frac{2\pi e^2}{\hbar} |T|^2 \cdot \left[\frac{(N_M + N_m)^2 \pm (N_M - N_m)^2}{2} \right] = \bar{G} \cdot (1 \pm P^2) \quad \text{mit } \bar{G} = \frac{2\pi e^2}{\hbar} \cdot \frac{(N_M + N_m)^2}{2}$$

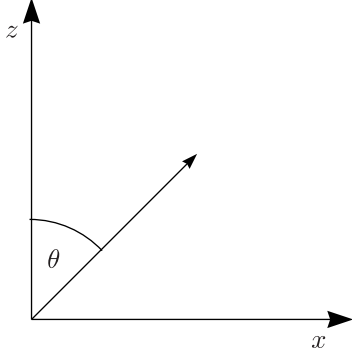
Man kann nun den Tunnel-Magnetwiderstand definieren durch:

$$\text{TMR} = \frac{G^P - G^{AP}}{G^{AP}} = \frac{R^{AP} - R^P}{R^P} \stackrel{\text{JULIERE}}{=} \frac{2P^2}{1 - P^2}$$

2.2.2 Beliebiger Winkel (Slonczewski (89))



↑ und ↓ zeigen sowohl für rechts als auch links entlang der Polarisation. Es ist $\uparrow_L \neq \uparrow_R$ und $\downarrow_L \neq \downarrow_R$.



$$|\uparrow_R\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|\uparrow_L\rangle + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|\downarrow_L\rangle$$

$$|\downarrow_R\rangle = -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|\uparrow_L\rangle + \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|\downarrow_L\rangle$$

Man erhält dies, indem man den Drehoperator $U = \exp\left(\frac{i\theta\sigma_y}{2}\right)$ auf $|\uparrow_L\rangle$ bzw. $|\downarrow_L\rangle$ anwendet. Damit ergibt sich für unseren HAMILTONoperator:

$$H_{Tunnel} = \sum_{q,k,\sigma} T c_{k\sigma}^\dagger c_{q\sigma} + \text{hermitesch konjugiert} = \sum_{q,k} T \left(c_{k\uparrow_R}^\dagger c_{q\uparrow_R} + C_{k\downarrow_R}^\dagger c_{q\downarrow_R} \right) + \text{hermitesch konjugiert}$$

Setzen wir

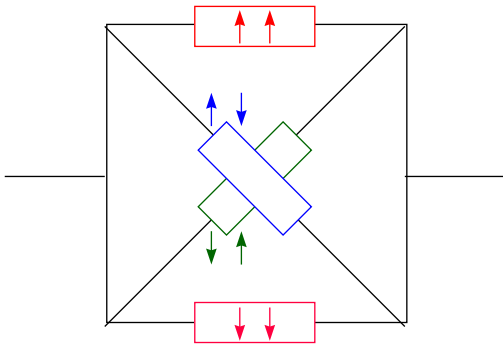
$$c_{k\uparrow_R}^\dagger = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) c_{k\uparrow_L}^\dagger + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) c_{k\downarrow_L}^\dagger$$

in H_{Tunnel} ein, so erhalten wir:

$$H_{Tunnel} = \sum_{q,k} T \left[\left(\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) c_{k\uparrow_L}^\dagger c_{q,\uparrow_R} + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) c_{k\downarrow_L}^\dagger c_{q\uparrow_L} - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) c_{k\uparrow_L}^\dagger c_{q\downarrow_R} + \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) c_{k\downarrow_L}^\dagger c_{q\downarrow_R} \right) + \text{h.k.} \right]$$

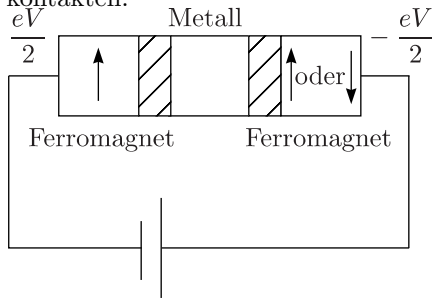
Wir erhalten dann als Ergebnis:

$$G = \frac{2\pi e^2}{\hbar} |T|^2 \left[\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \cdot (N_M^2 + N_m^2) + 2 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) N_M N_m \right] = \bar{G} (1 + P^2 \cos \theta)$$



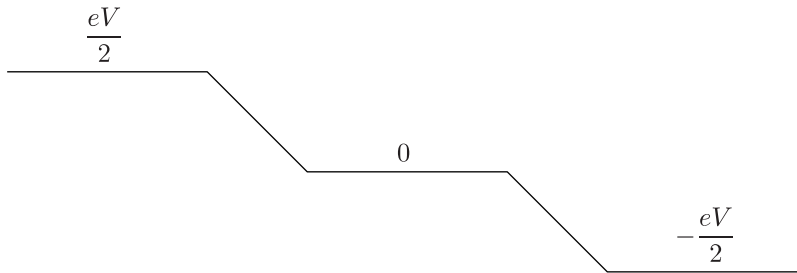
2.2.3 Spin-Anhäufung (Spin-Akkumulation)

Dieser Effekt ist verbunden mit einem Nichtgleichgewicht. Wir betrachten folgendes System mit zwei Tunnelkontakten:



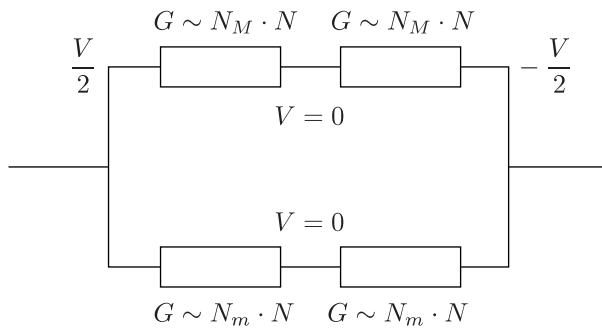
Wir vernachlässigen die COULOMB-Blockade.

a.) Parallel:



$$I_{\uparrow L} = \alpha N_M \cdot N \cdot \frac{V}{2}, I_{\uparrow R} = I_{\uparrow L}$$

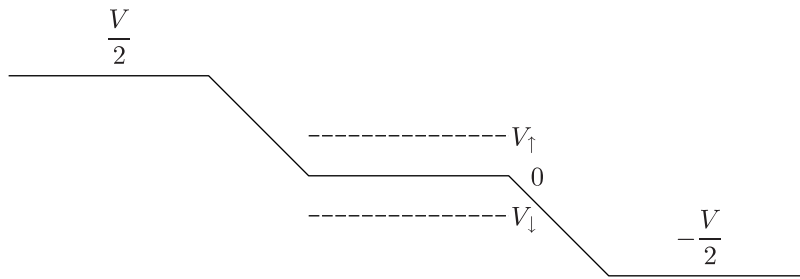
$$I_{\downarrow L} = \alpha N_m \cdot N \cdot \frac{N}{2}, I_{\downarrow R} = I_{\downarrow L} \text{ mit } \alpha = \frac{2\pi e^2}{\hbar} |T|^2$$



$$I^P = \frac{\alpha}{2} \cdot V \cdot (N_M N + N_m N)$$

b.) Antiparallel

$$V_{\uparrow} = \frac{\Delta\mu_{\uparrow}}{e} \text{ und } V_{\downarrow} = \frac{\Delta\mu_{\downarrow}}{e}$$



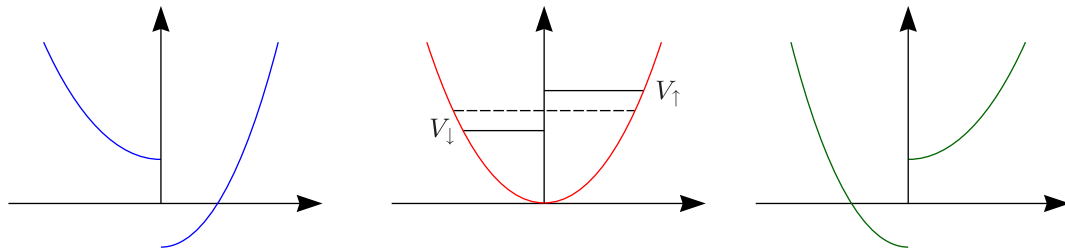
$$I_{\uparrow L} = \alpha \cdot N_M \cdot N \cdot \left(\frac{V}{2} - V_{\uparrow} \right)$$

$$I_{\uparrow R} = \alpha \cdot N_m \cdot N \cdot \left(V_{\uparrow} + \frac{V}{2} \right)$$

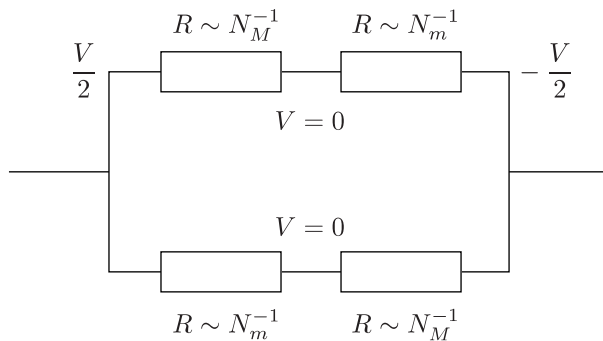
Aus $I_{\uparrow L} = I_{\uparrow R}$ ergibt sich:

$$V_{\uparrow} = \frac{V}{2} \cdot \frac{N_M - N_m}{N_M + N_m} = \frac{1}{2}PV \text{ und } V_{\downarrow} = -\frac{1}{2}PV$$

Wir haben aus dem Metall einen Ferromagneten gemacht.

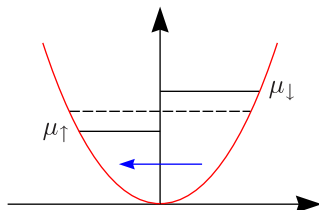


2.2.4 Spin-Relaxation



$$\frac{dS}{dt} = -\frac{S}{\tau_{sf}}$$

Wir bezeichnen mit S den gesamten Spin (Magnetisierung).

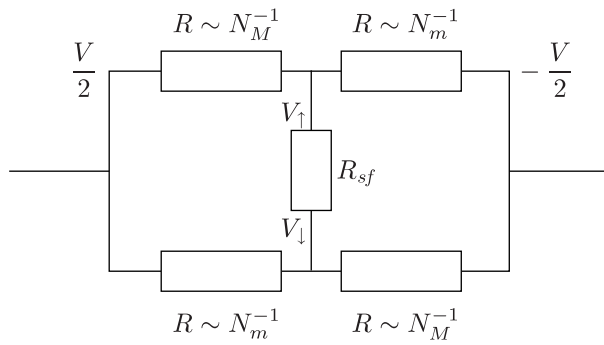


$$S = \Delta\mu \cdot N \text{ mit } \Delta\mu = \mu_{\uparrow}, \Delta\mu = -\mu_{\downarrow}$$

Es sei $\Delta\mu \ll E_F$. Macht ein einziges Elektron einen Spinflip, so fließt ein Strom I_{sf} :

$$I_{sf} = -e \frac{dS}{dt} = \frac{e \cdot N \Delta\mu}{\tau_{sf}} = \frac{eN}{2\tau_{sf}} \cdot (V_{\uparrow} - V_{\downarrow})$$

2.3. GMR – GIANT MAGNETORESISTANCE (GIGANTISCHER MAGNETOWIDERSTAND)



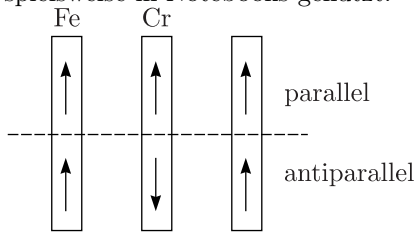
$$R_{sf} = \frac{2\tau_{sf}}{eN}, \quad V_{\uparrow} = \frac{V}{2} \cdot \frac{G_M - G_m}{G_M + G_m + 2G_{sf}}$$

$$G_{M/m} = \alpha \cdot N_{M/m} \cdot N$$

Die Zeit eines Spin-Flips muss lang sein, um Spin-Akkumulation zu bekommen.

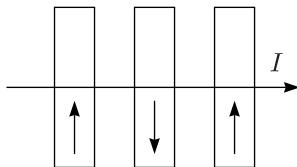
2.3 GMR – Giant Magnetoresistance (Gigantischer Magnetowiderstand)

Wir betrachten in folgenden Systeme mit vielen magnetischen Schichten (layered materials). Dieser Effekt wurde von GRÜNBERG (1989) und BAIBICH (1988) unabhängig voneinander entdeckt. Heute wird dies beispielsweise in Notebooks genutzt.



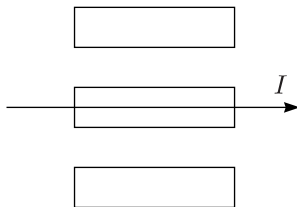
Im Experiment werden Systeme mit wenigen Schichten verwendet. In der Theorie wollen wir uns auf periodische Schichten konzentrieren. Es gibt nun zwei verschiedene Geometrien, nämlich:

- 1.) CPP (Current Perp. Plane)



Diese Methode ist experimentell jedoch schwer zu realisieren.

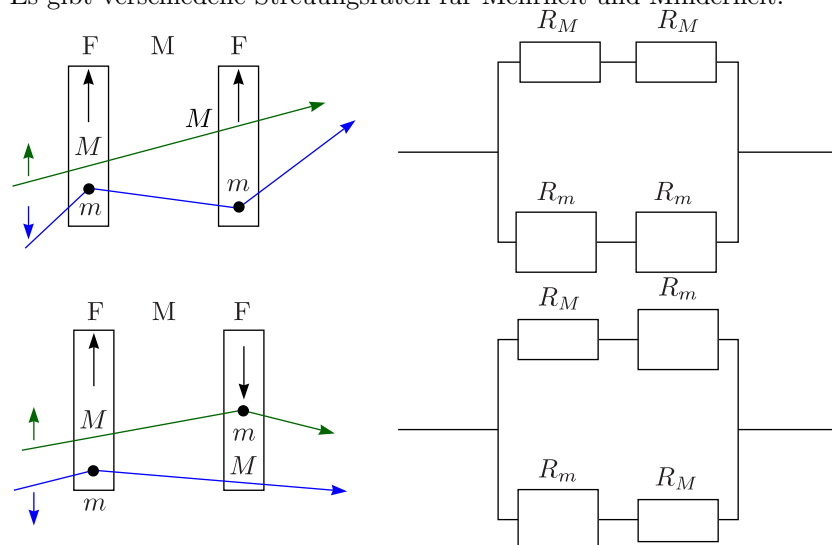
- 2.) CIP (Current in Plane)



$$\text{GMR} = \frac{\Delta R}{R^P} = \frac{R^{AP} - R^P}{R^P} \approx \begin{cases} 220\% & \text{für } T = 1,5 \text{ K} \\ 52\% & \text{für } T = 300 \text{ K} \end{cases}$$

2.3.1 Physikalisches Bild

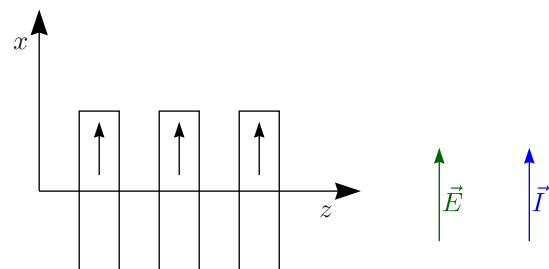
Es gibt verschiedene Streuraten für Mehrheit und Minderheit.



2.3.2 Beispiel

CIP: Wir hatten uns die BOLTZMANN-Gleichung notiert:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \vec{\nabla}_r + e \vec{E} \vec{\nabla}_p \right) f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{Stoss}$$



Es sei

$$f = f_0 + \delta f(\sigma, \vec{p}, z), \quad \frac{\partial}{\partial t} f = 0, \quad \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{Stoss} = -\frac{\delta f}{\tau}$$

womit sich für die BOLTZMANN-Gleichung ergibt:

$$v_z \cdot \frac{\partial f}{\partial z} + e E_x \cdot \frac{\partial f}{\partial p_x} = -\frac{\delta f}{\tau} \Rightarrow v_z \cdot \frac{\partial \delta f}{\partial z} + e E_x \cdot \frac{\partial (f_0 + \delta f)}{\partial p_x} = -\frac{\delta f}{\tau}$$

Damit erhalten wir weiter:

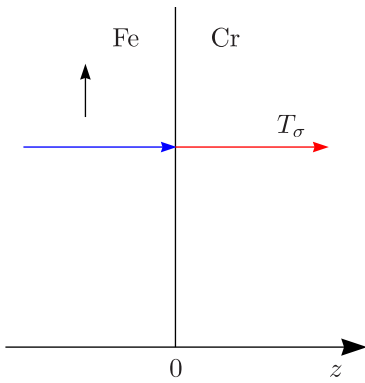
$$\left(v_z \frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{\tau} \right) \delta f = -e E_x v_x \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \quad \text{da} \quad \frac{\partial f_0}{\partial p_x} = \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_x} = \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} v_x$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung ist:

$$\delta f = -e E_x v_x \tau \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} + F_{\vec{\sigma}}(x, y, p_x, p_y) \exp\left(-\frac{z}{v_z \tau}\right)$$

Der erste Term ist die inhomogene und der zweite die homogene Lösung. F ist eine beliebige Funktion.

2.3. GMR – GIANT MAGNETORESISTANCE (GIGANTISCHER MAGNETOWIDERSTAND)



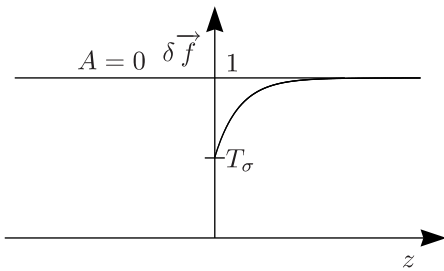
Pfeil nach rechts bedeutet $p_z > 0$ und nach links $p_z < 0$:

$$\delta \vec{f}_\sigma(z = 0^+) = T_\sigma \delta \vec{f}_\sigma(z = 0^-)$$

$$\delta \overleftarrow{f}_\sigma(z = 0^-) = T_\sigma \delta \overleftarrow{f}_\sigma(z = 0^+)$$

Diese Randbedingungen können nur dann erfüllt werden, falls F von der Form $A \left(-e E_x v_x \tau \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right)$ ist. Man erhält dann für $p_z > 0$:

$$\delta f = -e E_x v_x \tau \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \cdot \left[1 + A \exp\left(-\frac{z}{v_z \tau}\right) \right]$$

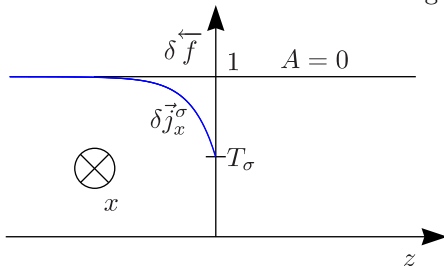


Für $p_z < 0$ folgt:

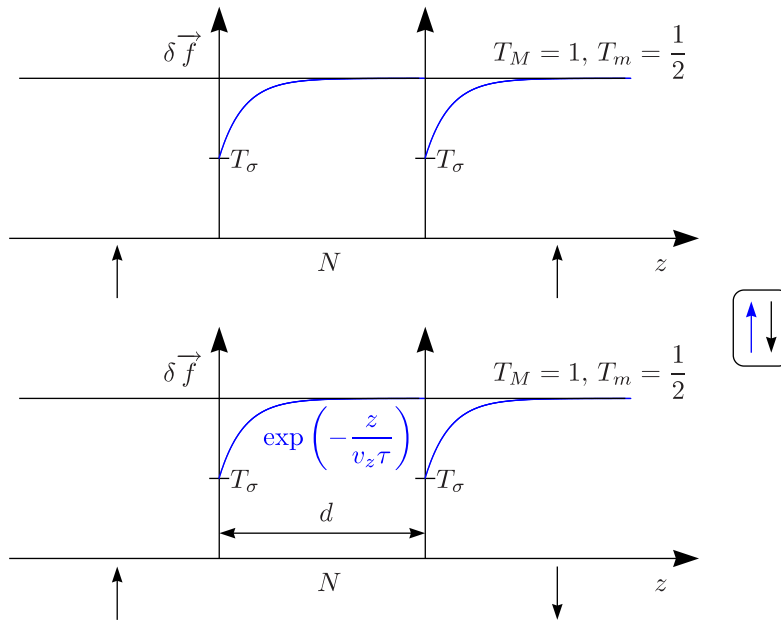
$$\delta f = C_\sigma(z) \left[-e E_x v_x \tau \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right]$$

$$\vec{j} = e \sum_{p,\sigma} \vec{v}_p \delta f_\sigma(\vec{r}, \vec{p})$$

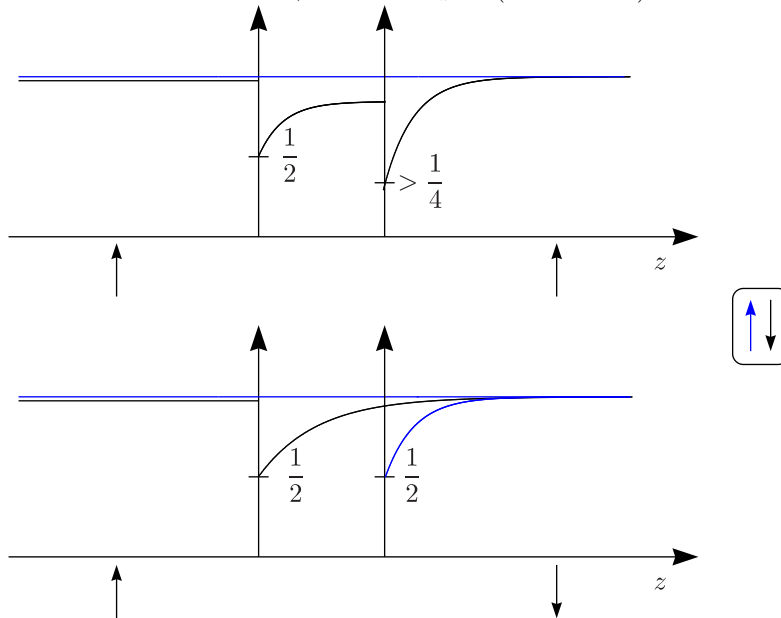
Es fließt nur ein Strom in x -Richtung.



$$j_x^\sigma(z) = j_x|_{T_\sigma=1} - \delta j_x^\sigma(z)$$



Damit ein Effekt auftritt, muss $d < v_z \cdot \tau$ (nm-Bereich) sein.



$$\delta j^P \neq \delta j^{AP}$$

2.4 Spin-Bahn-Effekte

2.4.1 Mikroskopische Spin-Bahn-Kopplung (Spin-Orbit-Coupling)

Dabei handelt es sich um einen relativistischen Effekt.

$$H_{SO} = \frac{\hbar}{4m^2c^2} (\vec{\nabla}V \times \vec{p}) \vec{\sigma} \sim \frac{v}{c} \text{ mit } e\vec{E} = \vec{\nabla}V \text{ und } \vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$$

Ist $\frac{v}{c} \ll 1$, dann ist der Beitrag dieses Effekts zur Energie des Elektrons klein. Ein weiterer Beitrag ist die ZEEEMAN-Energie:

$$H_Z = -\mu \vec{B} \cdot \vec{s} \text{ mit } \vec{s} = \frac{\hbar \vec{\sigma}}{2} \text{ und } \mu = \frac{e}{mc}$$

In Atomen gilt für die Matrixelemente:

$$\langle s'_z, l'_z, n' | H_{SO} | n, l_z, s_z \rangle = \alpha \vec{l} \cdot \vec{s}$$

(Band)Metalle, Halbleiter:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) + H_{SO}$$

Wir suchen nach Eigenzuständen ψ ($H\psi = E\psi$), wobei $V(\vec{r})$ periodisch sei. Ohne Spin-Bahn-Kopplung sind die Eigenzustände BLOCHwellen $\psi_k = u_k(\vec{r}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$, wobei $u_k(\vec{r})$ die periodische BLOCHfunktion ist, dass also $u_k(\vec{r} + \vec{a}) = u_k(\vec{r})$ gilt. Der gesamte Zustand ist gegeben durch das Tensorprodukt der BLOCHwellen mit dem Spinzustand, also $\psi_{k,\sigma} = \psi_k|\sigma\rangle$. Mit Spin-Bahn-Kopplung (ELLIOTT, 54) gilt also:

$$\psi_{\vec{k},0} = [a_{\vec{k}}(\vec{r})|\uparrow\rangle + b_{\vec{k}}(\vec{r})|\downarrow\rangle] \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$$

Die Koeffizienten $a_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{a})$ sind auch periodisch, also $a_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{a}) = a_{\vec{k}}(\vec{r})$ und $b_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{a}) = b_{\vec{k}}(\vec{r})$. Wir bezeichnen $\psi_{\vec{k}}$ mit dem Index „0“, da es sich hierbei um den Grundzustand handelt. Wir wollen uns nun die Rolle der Symmetrien anschauen. Es gibt zwei wichtige Symmetrien, nämlich:

1.) \hat{P} (Paritätsoperator: $\vec{r} \mapsto -\vec{r}$)

Gilt für das Potential $V(\vec{r}) = V(-\vec{r})$, so besitzen auch die Wellenfunktionen diese Symmetrie.

$$a_{\vec{k}}(-\vec{r}) = a_{-\vec{k}}(\vec{r}) \text{ und } b_{\vec{k}}(-\vec{r}) = b_{-\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\hat{P}\psi_{\vec{k},0} = \hat{P}([a_{\vec{k}}(\vec{r})|\uparrow\rangle + b_{\vec{k}}(\vec{r})|\downarrow\rangle] \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})) = (a_{-\vec{k}}(\vec{r})|\uparrow\rangle + b_{-\vec{k}}(\vec{r})|\downarrow\rangle) \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r})$$

2.) \hat{T} (Zeitumkehroperator: $T\psi(\vec{r}) = \psi^*(\vec{r})$, $T|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle$, $T|\downarrow\rangle = -|\uparrow\rangle$)

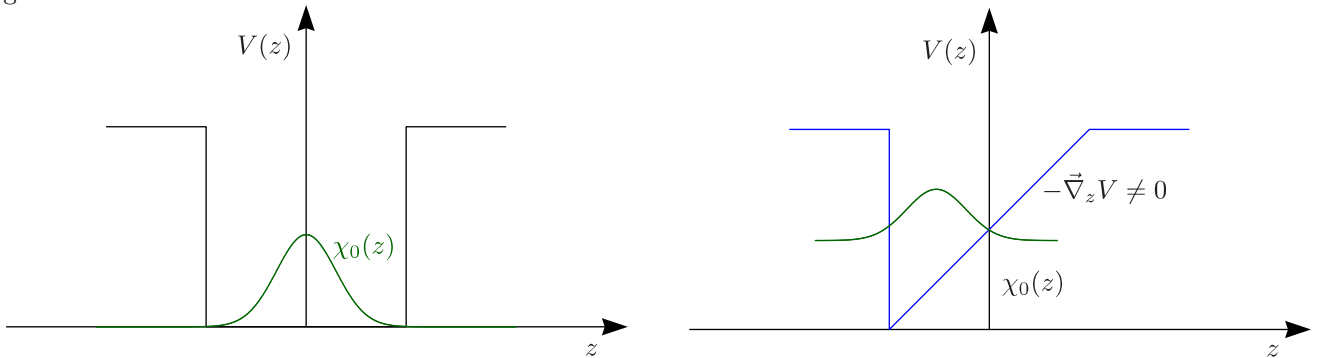
$$\hat{T}\hat{P}\psi_{\vec{k},0} = (a_{-\vec{k}}^*(\vec{r})|\downarrow\rangle - b_{-\vec{k}}^*(\vec{r})|\uparrow\rangle) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) = \psi_{\vec{k},1} = \hat{P}\hat{T}\psi_{\vec{k},0}$$

Falls der HAMILTONoperator invariant bezüglich dieser beiden Transformationen sind ($\hat{T}\hat{H}\hat{T}^{-1} = \hat{H}$ und $\hat{P}\hat{H}\hat{P}^{-1} = \hat{H}$), so ist $E_{k,1} = E_{k,0}$. Die Zeitumkehrsymmetrie gilt ohne Magnetfeld immer; die \hat{P} -Symmetrie ist jedoch in einigen Kristallen verletzt ($\hat{P}\hat{H}\hat{P}^{-1} \neq \hat{H}$), womit dann $E_{k,1} \neq E_{k,0}$ ist. Dann gibt es eine Spin-Bahn-Aufspaltung:

$$H = H_0 + H_{SO} \text{ mit } H_{SO} = \frac{1}{2}\hbar\sigma_z\Omega_z(k) \Rightarrow \underbrace{\frac{1}{2}\hbar\vec{\sigma}\vec{\Omega}(k)}_{\text{ursprünglicher Raum}} \text{ wobei } \Omega(k_1) \neq \Omega(k_2)$$

$$\sigma_x|0\rangle = |1\rangle, \sigma_z|0\rangle = |0\rangle, \sigma_z|1\rangle = -|1\rangle$$

Ist die TP-Symmetrie gebrochen, so spricht man von BIA (Bulk Inversion Asymmetrie). Arbeiten dazu findet man von DRESSELHAUS (55) und D'YAKONOV-PEREL (71). Wir betrachten ein zweidimensionales Elektronengas:



$$e\vec{E} = \vec{\nabla}_z V \parallel \vec{z}$$

$$H_{SO} \sim (\vec{E} \times \vec{k}) \cdot \vec{\sigma}$$

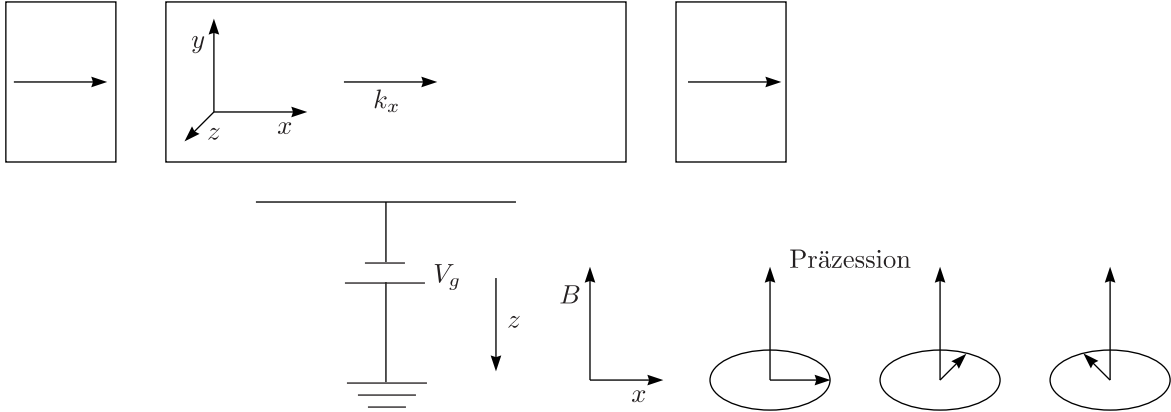
Für $\vec{E} = (0, 0, E_z)$ ergibt sich:

$$H_{SO} \sim E_z (\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) \text{ und } H_{SO,R} = \alpha_R (\sigma_x \hat{k}_y - \sigma_y \hat{k}_x)$$

Man bezeichnet diese als RASHBA-Spin-Bahn-Kopplung. Bei Bewegung in x -Richtung, spürt das Elektron ein Magnetfeld in y -Richtung.

2.4.2 Datta-Das-Transistor

Wir wollen uns nun mit dem SFET (spin-field-effect-transistor) von DATTA und DAS (1990) beschäftigen. Ferromagnet zweidimensionales Elektronengas Ferromagnet



Zur Vereinfachung wählen wir $\vec{k} = (k_x, 0, 0)$ und erhalten damit:

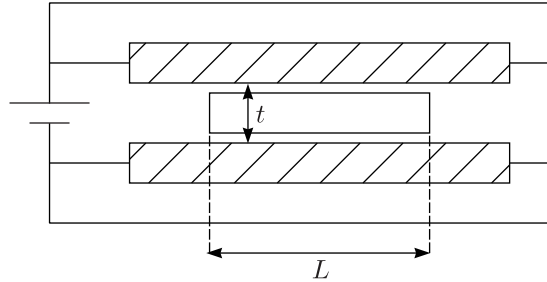
$$H_{SO,R} = -\alpha_R(V_g)k_x\sigma_y$$

$$\vec{B} = (0, B_y, 0) \text{ mit } B_y = -2\alpha_R k_x$$

Mit V_g kann man den Strom ändern. Man kann V_g beispielsweise so einstellen, dass der Spin eine ganze Umdrehung macht.

2.4.3 Spin-Filter

Wir betrachten zwei ideale eindimensionale Drähte:



Der HAMILTONoperator sieht folgendermaßen aus:

$$H = \sum_{\alpha=\uparrow/\downarrow} H_{\alpha} + H_{Tunnel} \text{ mit } H_{\alpha} = \int \frac{dk}{2\pi} \varepsilon_{\alpha}(k) c_{k\sigma\alpha}^{\dagger} c_{k\sigma\alpha} \text{ und } H_{Tunnel} = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} [t\psi_{u\sigma}^{\dagger}(x)\psi_{l\sigma}(x) + \text{h.k.}]$$

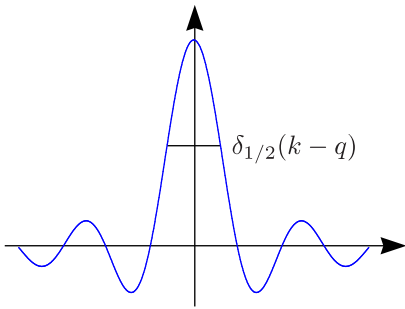
Man kann mit FOURIERtransformation zwischen dem x - und k -Raum transformieren:

$$c_{k\sigma u}^{\dagger} = \int dx \psi_{\sigma u}^{\dagger}(x) \exp(-ikx), \psi_{\sigma u}^{\dagger}(x) = \int \frac{dk}{2\pi} c_{k\sigma u}^{\dagger} \exp(ikx)$$

Es sei nun $k \mapsto u$ und $q \mapsto L$:

$$H_{Tunnel} = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx t \int \frac{dk}{2\pi} c_{k\sigma}^{\dagger} \exp(ikx) \int \frac{dq}{2\pi} c_{q\sigma} \exp(-iqx) + \text{h.k.} =$$

$$= \iint \frac{dk dq}{(2\pi)^2} t_{kq} c_{k\sigma}^{\dagger} c_{q\sigma} + \text{h.k.} \text{ mit } t_{kq} = t \frac{\sin\left(\frac{(k-q)L}{2}\right)}{\left(\frac{k-q}{2}\right)}$$

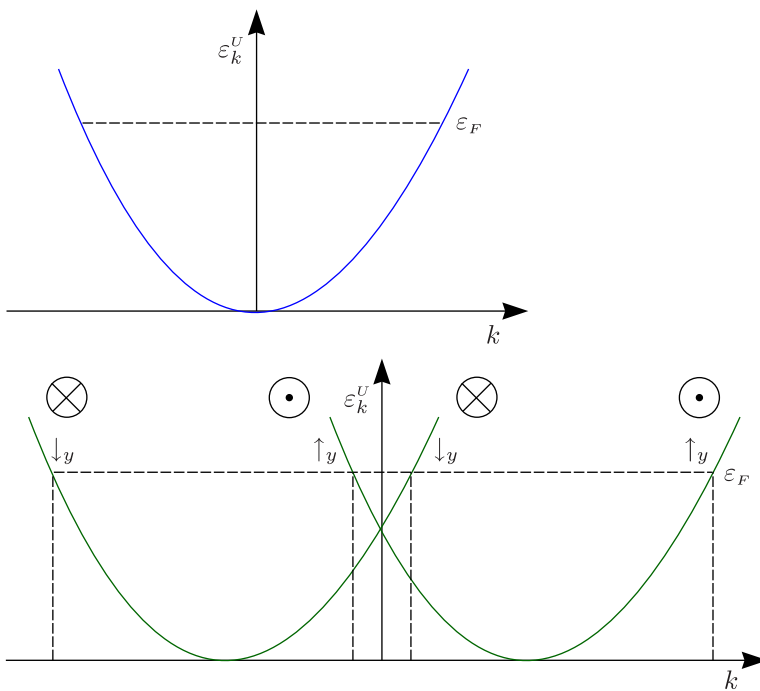


k ist fast erhalten; für $k \approx q$ ist Tunneln möglich.

1.) RASHBA SO (nur um U Draht)

$$\varepsilon_k = \varepsilon_{0U} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \alpha_R^U k \sigma_y = \tilde{\varepsilon}_{0U} + \frac{\hbar^2}{2m} (k - k_{SO}^U \sigma_y)^2$$

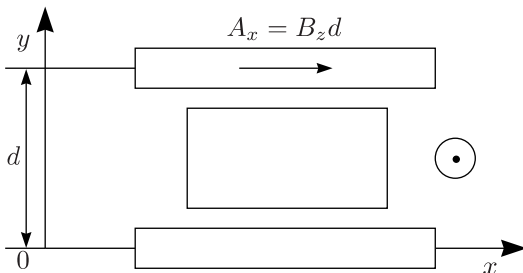
Die Dispersionsrelation ist verschoben. Sie ist nach rechts verschoben für Spin up und nach links für Spin down.



$$v_F^\uparrow = v_F^\downarrow = v_F \text{ ohne Spin-Bahn-Kopplung}$$

2.) Magnetfeld \vec{B} (Bahnkopplung – keine ZEEMAN-Wechselwirkung)

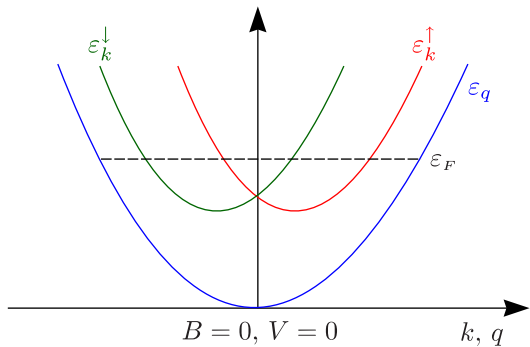
Wir betrachten $\vec{B} = (0, 0, B_z)$ mit $\vec{B} = \text{rot } \vec{A}$, wobei $\vec{A} = (B_z y, 0, 0)$ ist.



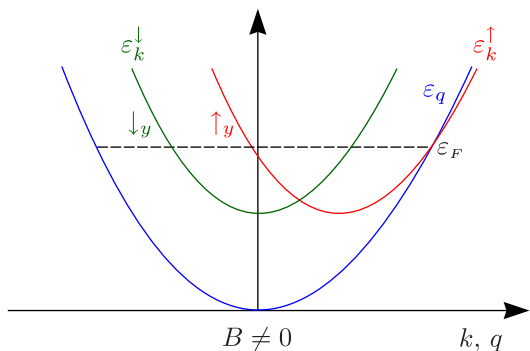
$$H_U = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right)^2 \stackrel{\nabla \mapsto ik}{=} \frac{\hbar^2}{2m} \left(k - \frac{e}{\hbar c} A_x \right)^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (k - p_B)^2 \text{ mit } p_B = \frac{e}{\hbar c} A_x = \frac{ed}{\hbar c} B_z$$

$$\varepsilon_k^U = \tilde{\varepsilon}_0^U + \frac{\hbar^2}{2m} (k - p_B - k_{SO} \sigma_y)^2$$

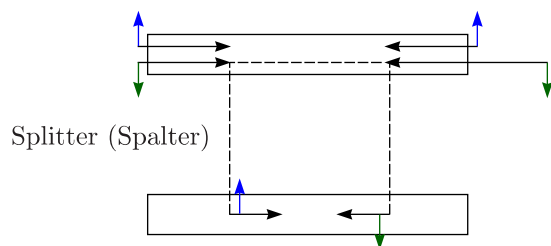
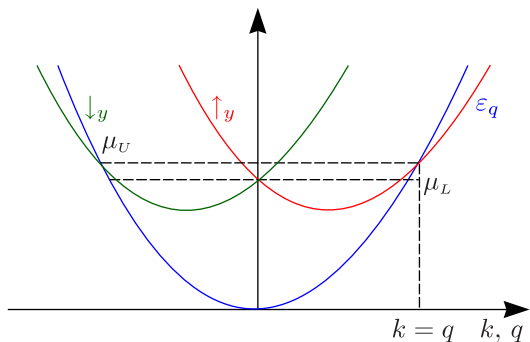
Es gibt also eine weitere Aufspaltung.



Der Leitwert G ist gleich null, da kein Tunneln möglich ist.



Nur die Elektronen mit Spin up, können tunneln. Durch das Magnetfeld können wir einen Strom erzeugen, der nur aus Spin-up-Elektronen besteht; man hat also einen **Polarisator**.



Kapitel 3

Quantencomputer

Wir werden uns mit Algorithmen (SHOR-Algorithmus, Error-correcting codes) und Quantenlogik (Qubit, NOT, $\sqrt{\text{NOT}}$) beschäftigen. Als Grundlage müssen wir uns jedoch zuerst mit der Quantenmechanik der Spins und der sogenannten Phasenkohärenz (Zerstörung, Mechanismen) auseinandersetzen. Danach kommen wir zu den physikalischen Realisierungen wie nano-elektrische Bauelemente usw.

3.1 Konzepte

3.1.1 Quantenmechanik von Spins

Wir gehen aus von der zeitabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = H\psi(t)$$

Ist H zeitunabhängig, so erhält man die stationären Zustände ψ_n aus $H\psi_n = E_n\psi_n$. Die Zeitentwicklung ist für einen solchen Zustand:

$$\psi_n(t) = \psi_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right)$$

Allgemein gilt:

$$\psi(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Ht\right) \psi(0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} Ht\right)^n \psi(0)$$

Ist H zeitabhängig mit $[H(t_1), H(t_2)] \neq 0$, so können wir mittels des Zeitordnungsoperators T schreiben:

$$\psi(t) = T \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt'\right) \psi(0) = U(t)\psi(0)$$

$U(t)$ bezeichnet man als Zeitentwicklungsoperator:

$$U(t) = T \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n}{n!} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) \dots H(t_n) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_0^t dt_n \int_0^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_0^{t_3} dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 H(t_n) \dots H(t_2)H(t_1)$$

„Zeitordnung“ bedeutet, dass der früheste Operator ganz rechts steht. $U(t)$ ist unitär: $UU^\dagger = \mathbf{1}$. Wir betrachten nun den Spin-1/2 mit $|\vec{S}| = \frac{1}{2}\hbar$; es handelt sich dabei um einen internen Drehimpuls beispielsweise von Elektronen. Der Spinoperator \vec{S} lässt sich durch die PAULI-Matrizen darstellen:

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \text{ mit } \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \text{ und } \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Diese Matrizen erfüllen die Eigenschaften $\sigma_k \sigma_l = i\varepsilon_{klm} \sigma_m$ und $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbf{1}$. Der Spin ist verknüpft mit einem magnetischen Moment $\vec{\mu}$:

$$\vec{\mu} = 2\mu_B \frac{\vec{S}}{\hbar} = \mu_B \vec{\sigma} = \mu \vec{\sigma}$$

Der HAMILTON-Operator für einen Spin im Magnetfeld lautet $H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu \vec{B} \cdot \vec{\sigma}$.

Beispiel:

Wir betrachten ein Magnetfeld in z -Richtung, also $\vec{B} = B\hat{e}_z$. Dann lautet der HAMILTON-Operator:

$$H = -\mu B \sigma_z = \begin{pmatrix} -\mu B & 0 \\ 0 & \mu B \end{pmatrix}$$

Dieser besitzt folgende Eigenzustände und -energien:

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |\uparrow\rangle \text{ für } E_0 = -\mu B$$

Der Spin zeigt in $+z$ -Richtung.

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle \text{ für } E_0 = \mu B$$

Der Spin zeigt in $-z$ -Richtung.

Beispiel:

Betrachten wir den HAMILTON-Operator für ein allgemeines Magnetfeld $\vec{B} = B_x\hat{e}_x + B_z\hat{e}_z$:

$$H = -\mu B_x \sigma_x - \mu B_z \sigma_z = \begin{pmatrix} -\mu B_z & -\mu B_x \\ -\mu B_x & \mu B_z \end{pmatrix}$$

Die Eigenwerte erhält man durch:

$$0 = \det \begin{pmatrix} -\mu B_z - E & -\mu B_x \\ -\mu B_x & \mu B_z - E \end{pmatrix} \Rightarrow E_{0,1} = \mp \mu \sqrt{B_x^2 + B_z^2}$$

Die Eigenzustände folgen nach den Regeln der linearen Algebra. Ein allgemeiner Zustand ist darstellbar mittels der beiden Basiszustände, nämlich:

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a|0\rangle + b|1\rangle$$

Für die Erwartungswerte ergibt sich:

$$\langle \sigma_x \rangle = (a^* \quad b^*) \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a^*b + b^*a$$

$$\langle \sigma_y \rangle = (a^* \quad b^*) \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = -ia^*b + ib^*a$$

$$\langle \sigma_z \rangle = (a^* \quad b^*) \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = |a|^2 - |b|^2$$

Schauen wir uns die Zeitentwicklung der Zustände an. Wir betrachten dazu $\vec{B} = B\hat{e}_z$.

$$H = \begin{pmatrix} -\mu B & 0 \\ 0 & +\mu B \end{pmatrix}$$

Der Anfangszustand zeige in x -Richtung:

$$\psi(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Wie entwickelt sich dieser Zustand mit der Zeit? Wir benötigen den Zeitentwicklungsoperator:

$$U = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} t \begin{pmatrix} -\mu B & 0 \\ 0 & \mu B \end{pmatrix} \right) = \begin{pmatrix} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \mu B t \right) & 0 \\ 0 & \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \mu B t \right) \end{pmatrix}$$

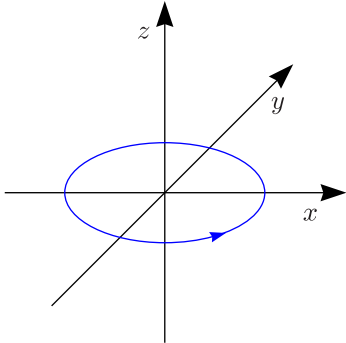
Damit ergibt sich durch Anwendung von $U(t)$ auf $\psi(0)$:

$$\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \mu B t \right) & 0 \\ 0 & \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \mu B t \right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \mu B t \right) \\ \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \mu B t \right) \end{pmatrix}$$

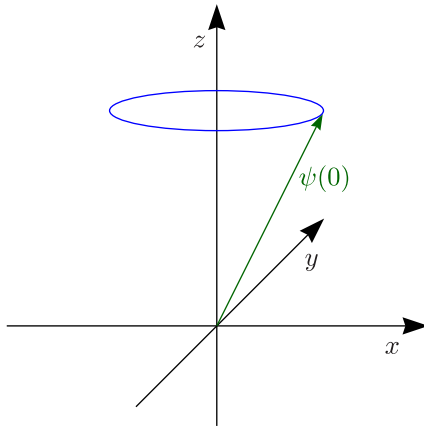
$$\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle = \frac{1}{2} \left[\exp\left(\frac{i}{\hbar} \mu B t\right) + \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mu B t\right) \right] = \cos\left(\frac{\mu B t}{\hbar}\right)$$

Man bezeichnet dies als kohärente Oszillationen. Allgemein gilt:

$$\psi(0) = \sum_n a_n |n\rangle \Rightarrow \psi(t) = \sum_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) a_n |n\rangle$$



Allgemein vollführt der Spin eine **Präzessionsbewegung** mit der Kreisfrequenz $\omega = \frac{2\mu B}{\hbar}$.



Wir berechnen den Erwartungswert dieses Zustands:

$$\langle \psi(t) | \sigma_x | \psi(t) \rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \exp(-i\frac{\omega}{2}t) & \exp(i\frac{\omega}{2}t) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \exp(i\frac{\omega}{2}t) \\ \exp(-i\frac{\omega}{2}t) \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (\exp(-i\omega t) + \exp(i\omega t)) = \boxed{\cos(\omega t)}$$

Beispiel:

Es sei folgender Zustand gegeben:

$$\psi(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Wir betrachten dazu ein Magnetfeld in x -Richtung: $\vec{B} = B_x \hat{e}_x$. Der HAMILTON-Operator lautet $H = -\mu B_x \sigma_x$. Damit folgt der Zeitentwicklungsoperator:

$$U(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mu B_x \sigma_x\right) = \exp(i\alpha \sigma_x) \text{ mit } \alpha = \frac{\mu B_x}{\hbar} t$$

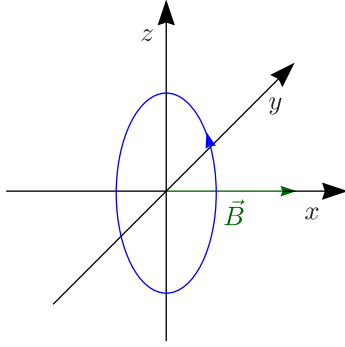
Wir berechnen den Exponentialausdruck:

$$\begin{aligned} \exp(i\alpha \sigma_x) &= \mathbf{1} + i\alpha \sigma_x - \frac{1}{2} \alpha^2 \sigma_x^2 - \frac{i}{3!} \alpha^3 \sigma_x^3 + \frac{1}{4!} \alpha^4 \sigma_x^4 + \dots = \mathbf{1} + i\alpha \sigma_x - \frac{1}{2} \alpha^2 \mathbf{1} - \frac{i}{3!} \alpha^3 \sigma_x + \frac{1}{4!} \alpha^4 \mathbf{1} + \dots = \\ &= \left(1 - \frac{1}{2} \alpha^2 + \frac{1}{4!} \alpha^4 + \dots\right) + i\sigma_x \left(\alpha - \frac{1}{3!} \alpha^3 + \dots\right) = \cos(\alpha) \mathbf{1} + i\sigma_x \sin(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos \alpha & i \sin \alpha \\ i \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Damit können wir $\psi(0)$ nach der Zeit entwickeln:

$$\psi(t) = \exp(i\alpha \sigma_x) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \alpha \\ i \sin \alpha \end{pmatrix}$$

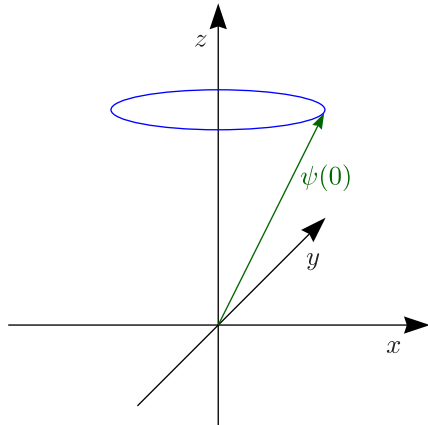
Der Zustand dreht sich in der y - z -Ebene.



3.1.2 Rabi-Oszillationen

Wir haben ein dc- und ein ac-Feld. Der dc-Anteil wird beschrieben durch folgenden HAMILTON-Operator:

$$H_0 = -\mu B_z \sigma_z = -\frac{\hbar \omega_0}{2} \sigma_z$$



Der Erwartungswert des Spins präzediert mit der Frequenz ω_0 . Nun schalten wir ein transversales zirkular polarisiertes ac-Feld ein, nämlich $B_x(t) = \tilde{B} \cos(\omega t)$, $b_y(t) = -\tilde{B} \sin(\omega t)$. Wir definieren nun die sogenannte RABI-Frequenz $\Omega = \frac{2\tilde{B}\mu}{\hbar}$. Daraus folgt der gesamte HAMILTON-Operator:

$$H = -\frac{\hbar \omega_0}{2} \sigma_z - \frac{\hbar \Omega}{2} (\sigma_x \cos(\omega t) - \sigma_y \sin(\omega t)) = -\frac{\hbar \omega_0}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} - \frac{\hbar \Omega}{2} \begin{pmatrix} 0 & \exp(i\omega t) \\ \exp(-i\omega t) & 0 \end{pmatrix}$$

Wir betrachten die zeitabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = H \psi(t)$$

Wir transformieren in das mitrotierende System

$$U_r = \exp\left(i\frac{\omega_0 t}{2} \sigma_z\right)$$

durch, womit $\psi'(t) = U_r^\dagger \psi(t)$ im rotierenden System gilt. Damit hat man im rotierenden System die SCHRÖDINGER-Gleichung

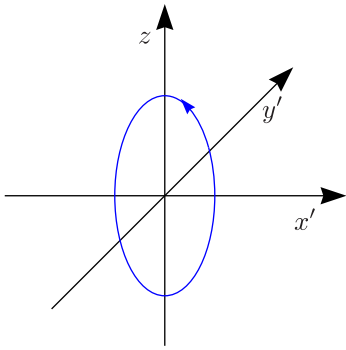
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi'(t) = H' \psi'(t) \text{ mit } H' = U_r^\dagger H U_r - i\hbar U_r^\dagger \dot{U}_r$$

Wir wählen nun $\omega = \omega_0$ genau in Resonanz. Genau dann gilt:

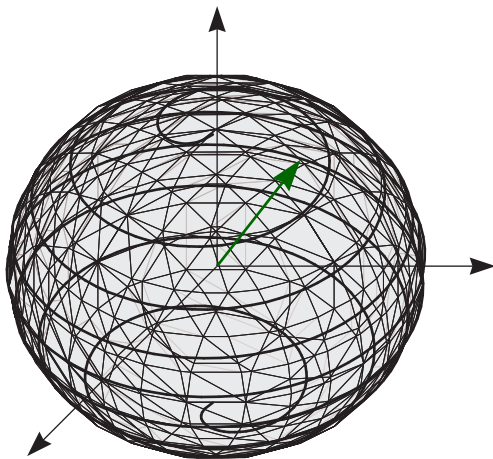
$$H' = -\frac{\hbar \Omega}{2} \sigma_x$$

Dieses Ergebnis entspricht dem Spezialfall, dass das Feld in x -Richtung zeigt. Es ergab sich eine Drehung in der y - z -Ebene.

$$\psi'(t) = \exp\left(i\frac{\hbar \Omega}{2} \sigma_x t\right) \psi'(0) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\hbar \Omega}{2} t\right) & i \sin\left(\frac{\hbar \Omega}{2} t\right) \\ i \sin\left(\frac{\hbar \Omega}{2} t\right) & \cos\left(\frac{\hbar \Omega}{2} t\right) \end{pmatrix} \psi'(0)$$



$$\psi(t) = U_r(t) \exp\left(i \frac{\hbar\Omega}{2} \sigma_x t\right) U_r^\dagger(t) \psi(0)$$



Man spricht von „RABI-Oszillationen“.

3.1.3 Mehrere Spins

Wir betrachten beispielsweise zwei Spins. $\psi_1(t)$ und $\psi_2(t)$ können eine Superposition sein. Das Gesamtsystem kann dann in einem Produktzustand $\psi_1(t)\psi_2(t)$ existieren. Es gibt jedoch auch verschränkte Zustände. Betrachten wir dazu folgendes Beispiel:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow^{(1)} \downarrow^{(2)}\rangle - |\downarrow^{(1)} \uparrow^{(2)}\rangle \right)$$

Wir kennen diesen Zustand unter dem Begriff „Singulett“.

- * Physik von 2-Niveau-Systemen (Spins)
 - Zustände, Superposition, entangled states
 - unitäre Zeitentwicklung (spin flip, Spin-Rotation, Phasenverschiebung)
 - Phasenkohärenz, Messprozess
- * Grundlegende Operationen für Quantencomputer: „Gatter“
 - Not, $\sqrt{\text{NOT}}$

3.2 Quantencomputer

Klassisch	Quantencomputer
Bits (0 oder 1)	Qubits (Spin 1/2), $\psi = \alpha 0\rangle + \beta 1\rangle$
5 = (00101) ₂	5 = (00101) ₂
Register <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>	Register <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>

Man verwendet folgende Basis:

$$|0\rangle = |0000\rangle = |0\rangle|0\rangle|0\rangle|0\rangle$$

$$|1\rangle = |0001\rangle = |0\rangle|0\rangle|0\rangle|1\rangle$$

$$|2\rangle = |0010\rangle = |0\rangle|0\rangle|1\rangle|0\rangle$$

⋮

$$|15\rangle = |1111\rangle = |1\rangle|1\rangle|1\rangle|1\rangle$$

Es sind in diesem Register Überlagerungen erlaubt, wie beispielsweise $\alpha|2\rangle + \beta|15\rangle + \gamma|13\rangle$. Allgemein würde gelten:

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{2^N-1} C_n |n\rangle$$

Dies ist der allgemeine Zustand eines Registers mit N Qubits. Es ist auch möglich, Zustände zu verschränken.

$$|1\rangle + |3\rangle = |0\rangle|0\rangle|0\rangle|1\rangle + |0\rangle|0\rangle|1\rangle|1\rangle = (|0\rangle|0\rangle|0\rangle + |0\rangle|0\rangle|1\rangle) \otimes |1\rangle$$

Dies ist jedoch kein verschränkter Zustand.

- * Informationsspeicherung im Spinzustand/Qubit
- * Programm: Manipulation von Qubits durch Kontroll-HAMILTONoperator
- * Modell-HAMILTONoperator:

$$H(t) = - \sum_{i=1}^N [B_x^i(t)\sigma_x^i + B_z^i(t)\sigma_z^i] + \sum_{i<j} J^{ij}(t)\sigma_+^i\sigma_-^j + \text{h.k mit } \sigma_{\pm} = \frac{\sigma_x \pm i\sigma_y}{2}$$

- * Logischer Zustand eines einzelnen Gatters: Spin-Rotation des Spins i

$$H(t) = -B_x^i \sigma_x^i \text{ für irgendeine Zeit } \tau$$

Der Zeitentwicklungsoperator lautet:

$$U^i(\varphi) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} B_x^i \sigma_x^i \tau\right) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & i \sin \varphi \\ i \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix} \text{ mit } \varphi = \frac{B_x^i \tau}{\hbar}$$

Dies folgt ja aus $\exp(i\alpha\sigma_{x,y,z}) = \cos(\alpha)\mathbf{1} + i\sigma_{x,y,z} \sin \alpha$. Dies führt zu einer Superposition von Zuständen. Das logische NOT folgt für $\varphi = \frac{\pi}{2}$:

$$U = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = i\sigma_x$$

Wendet man den Zeitentwicklungsoperator nämlich an auf Zustände $|0\rangle$ bzw. $|1\rangle$, so folgt:

$$U_{\text{NOT}}|0\rangle = |1\rangle \text{ und } U_{\text{NOT}}|1\rangle = |0\rangle$$

Für $\varphi = \frac{\pi}{4}$ haben wir die Operation $\sqrt{\text{NOT}}$:

$$U_{\sqrt{\text{NOT}}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}$$

Es muss nämlich gelten:

$$U_{\sqrt{\text{NOT}}} \cdot U_{\sqrt{\text{NOT}}} = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} = U_{\text{NOT}}$$

* Zwei-Bit-Gatter für Spins i und j :

$$H(t) = -J^{ij} \sigma_+^i \sigma_-^j + \text{h.k.}$$

Wir erhalten für den Zeitentwicklungsoperator:

$$U_{2\text{-Bit}}^i = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \gamma & i \sin \gamma & 0 \\ 0 & i \sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ in der Basis } |\uparrow_i \uparrow_j\rangle, |\uparrow_i \downarrow_j\rangle, |\downarrow_i \uparrow_j\rangle, |\downarrow_i \downarrow_j\rangle$$

logische SWAP-Operation für $\gamma = \frac{\pi}{2}$ und $\sqrt{\text{SWAP}}$ für $\gamma = \frac{\pi}{4}$, XNOT, ...

* „Universeller Satz“ von Gattern

{1-Bit, CNOT}

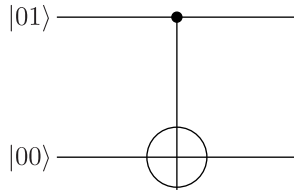
Ein CNOT-Operator (controlled NOT, XOR) ist ein 2-Bit-Gatter mit folgenden 4×4 -Matrizen:

$$U_{\text{CNOT}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ in der Basis } |00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$$

Wenden wir diese Operation auf die Basiszustände an:

$$U_{\text{CNOT}}|00\rangle = |00\rangle, U_{\text{CNOT}}|01\rangle = |01\rangle, U_{\text{CNOT}}|10\rangle = |11\rangle, U_{\text{CNOT}}|11\rangle = |10\rangle$$

Das erste Bit ist das **Kontrollbit**.

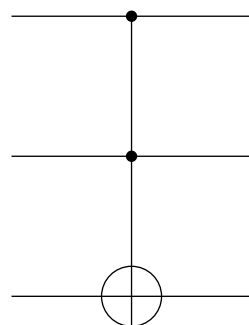


$$U_{\text{CNOT}}(|0\rangle + |2\rangle) = U_{\text{CNOT}}(|00\rangle + |10\rangle) = |00\rangle + |11\rangle = |0\rangle + |3\rangle$$

$$U_{\text{CNOT}} = \exp\left(i\frac{\pi}{4}\right) H_1 \exp\left(\frac{i\pi\sigma_x^{(2)}}{4}\right) \cdot \exp\left(-\frac{i\pi\sigma_x^{(1)}}{4}\right) U_{2\text{-Bit}}\left(\frac{\pi}{4}\right) \cdot U_{\text{NOT}}^{(1)} \cdot U_{2\text{-Bit}}\left(\frac{\pi}{4}\right) H^{(1)}$$

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \text{ (HADAMARD-Gatter)}$$

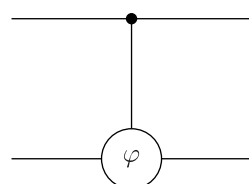
* 3-Bit-Gatter (TOFFOLI-Gatter, CCNOT):



Die entsprechende Matrix lautet:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

* Kontrollierte Phasenverschiebung



Beispielsweise ist $U|11\rangle = \exp(i\varphi)|11\rangle$.

* Reversibilität

Dies ist ein weiterer großer Unterschied zwischen klassischem Computer und Quantencomputer. Betrachten wir beispielsweise die NAND-Operation. Dies ist eine Zwei-Bit-Operation (Input: 2, Output: 1)

$$|00\rangle \mapsto |10\rangle, |01\rangle \mapsto |10\rangle, |10\rangle \mapsto |10\rangle, |11\rangle \mapsto |00\rangle$$

Hat man nur den Output, kann man nicht auf den Input schließen. Im Quantencomputer gibt es deshalb keine NAND-Operation.

* HADAMARD-Gatter

Dieses wirkt auf ein Qubit:

$$|\uparrow\rangle \mapsto \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$$

$$|\downarrow\rangle \mapsto \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)$$

Dieses kann realisiert werden durch:

$$\exp\left(-i\frac{\pi}{2}\left(\frac{\sigma_x + \sigma_z}{\sqrt{2}}\right) - 1\right)$$

3.3 Elemente von Quantencomputern

- 1.) Klassisch: Bits, Register, elementares Gatter NAND ist ausreichend, setzt Bits auf 0 (Löschen von Informationen, Erzeugung von Entropie), Funktionen $x \mapsto f(x)$, im allgemeinen irreversibel
- 2.) Quantencomputer: Qubits, Quantenregister, universeller Satz von Gattern, phasenkohärente Funktionen (außer Messung) $|x, 0\rangle \mapsto |x, f(x)\rangle$, reversibel

2^N Zahlen werden repräsentiert durch N Qubits.

$$|0\rangle = |00 \dots 00\rangle$$

$$|1\rangle = |00 \dots 01\rangle$$

⋮

$$|2^N - 1\rangle = |11 \dots 11\rangle$$

3.3.1 Quanten-Parallelität

Wir beginnen mit einer Superposition von Zuständen (im allgemeinen ganze Zahlen $0 \leq x \leq 2^N - 1$)

$$|\psi(t=0)\rangle = \frac{1}{2^{\frac{N}{2}}} \sum_{x=0}^{2^N-1} |x\rangle$$

Wir führen unitäre Operationen (\equiv Programm) auf allen Zuständen gleichzeitig aus:

$$|\{x\}, \{0\}\rangle \mapsto |\{x\}, \{f(x)\}\rangle$$

Man erhält die ganze Funktion in einer Rechnung.

$$U_f |x\rangle |0\rangle \mapsto |x\rangle |f(x)\rangle$$

$$U \left(\frac{1}{2^{\frac{N}{2}}} \sum_{x=0}^{2^N-1} |x\rangle \right) |0\rangle \mapsto \frac{1}{2^{\frac{N}{2}}} \sum_{x=0}^{2^N-1} |x\rangle |f(x)\rangle$$

Um dieses Ergebnis zu erhalten, muss man jedoch einen Messprozess vollziehen. PETER SHOR hat im Jahre 1994 die Lösung eines Problems gefunden.

Problem: Berechne $f_{a,n}(x) = a^x \pmod n$ für alle x gleichzeitig

- * Anfangszustand $|0^N\rangle|0^N\rangle$ ($2N$ Qubits)
- * Anwendung von N HADAMARD-Gattern:

$$H_1 H_2 \dots H_N |0^N\rangle|0^N\rangle = \frac{1}{2^{\frac{N}{2}}} \sum_{x=0}^{2^N-1} |x\rangle|0^N\rangle$$

Superposition aller x

- * Anwendung von U :

$$\sum_x |x\rangle|0\rangle \mapsto \sum_x |x\rangle|f_{a,n}(x)\rangle$$

Die Information kann nicht ausgelesen werden, aber wir benötigen nur die Periode.

- * Messung des zweiten Registers, erhalte irgendeinen Wert j

Projiziere auf Unterraum der Zustände $|x\rangle|j\rangle$, für die $f_{a,n}(x) = j$ ist! Betrachte folgendes Beispiel: Es sei $n = 15$, $a = 2$.

- Messung von $j = 2$, Zustand nach Messung:

$$(|1\rangle + |5\rangle + |9\rangle + \dots) |2\rangle$$

- Messung von $j = 4$, Zustand nach Messung:

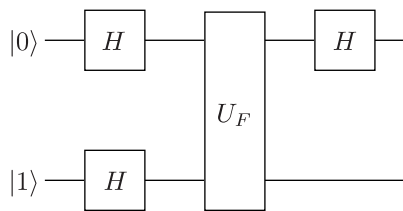
$$(|2\rangle + |6\rangle + |10\rangle + \dots) |4\rangle$$

- * Verschiedene Messungen ergeben verschiedene j

Projiziert man diese auf Unterräume, haben alle dieselbe Periode r , aber einen unterschiedlichen „Offset“ k_j :

$$|\psi\rangle = \sum_{i=0}^{\frac{2^N}{r}-1} |ir + k_j\rangle |j\rangle$$

Betrachten wir ein weiteres Beispiel:



$$|x\rangle|y\rangle \xrightarrow{U_F} |x\rangle|[y + F(x)] \pmod{2}\rangle$$

$$\begin{aligned} H \otimes H |0\rangle|1\rangle &= \frac{1}{2} (|0\rangle + |1\rangle) (|0\rangle - |1\rangle) = \frac{1}{2} (|00\rangle + |10\rangle - |01\rangle - |11\rangle) = \\ &\stackrel{U_F}{=} \frac{1}{2} (|0, F_0\rangle + |1, F_1\rangle - |0, \bar{F}_0\rangle - |1, \bar{F}_1\rangle) \stackrel{H \otimes 1}{=} \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}} (|0, F_0\rangle + |1, F_0\rangle + |0, F_1\rangle - |1, F_1\rangle - |0, \bar{F}_0\rangle - |1, \bar{F}_0\rangle - |0, \bar{F}_1\rangle + |1, \bar{F}_1\rangle) = \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}} (|0\rangle [|F_0\rangle + |F_1\rangle - |\bar{F}_0\rangle - |\bar{F}_1\rangle] + |1\rangle [|F_0\rangle - |F_1\rangle - |\bar{F}_0\rangle + |\bar{F}_1\rangle]) \end{aligned}$$

Sind F_1 und F_2 gleich, so erhält man $|0\rangle$ (falsche Münze), für $F_1 \neq F_2$ erhält man $|1\rangle$. Man bezeichnet diesen Algorithmus als Deutsch-Algorithmus.

3.3.2 Beispiel: Fourier-Transformation

Wir gehen aus von der Basis

$$|0\rangle = |\uparrow \dots \uparrow \uparrow\rangle$$

$$|1\rangle = |\uparrow \dots \uparrow \downarrow\rangle$$

⋮

$$|2^L - 1\rangle = |\downarrow \dots \downarrow \downarrow\rangle$$

und betrachten eine Superposition aller Zustände:

$$\sum_{x=0}^{2^L-1} a_x |x\rangle \mapsto \sum_{k=0}^{2^L-1} c_k |k\rangle \text{ mit } c_k = \frac{1}{2^L} \sum_{x=0}^{2^L-1} \exp\left(\frac{2\pi i k x}{2^L}\right) a_x$$

Die Anzahl der Gatter ist proportional zu L^2 . In klassischen Computern benötigt man jedoch 2^L Operationen, um eine FOURIER-Transformation durchzuführen.

3.3.3 Fehlerkorrektur

a.) Spinflip:

Wenn sich die Wahrscheinlichkeit für $|0\rangle$ und $|1\rangle$ ändert, bezeichnet man dieses als Spinflip:

$$\alpha|0\rangle + \gamma|1\rangle \mapsto \alpha'|0\rangle + \gamma'|1\rangle \text{ mit } |\alpha| \neq |\alpha'|$$

b.) Phasenfehler:

$$\alpha|0\rangle + \gamma|1\rangle \mapsto \alpha|0\rangle + \exp(i\varphi)\gamma|1\rangle$$

Wie kann man dieser Fehler korrigieren?

- * drei Qubits für ein logisches Bit: $|0\rangle = |000\rangle$, $|1\rangle = |111\rangle$
- * durch zerstörungsfreie Messung feststellen, ob Spinflip stattgefunden hat

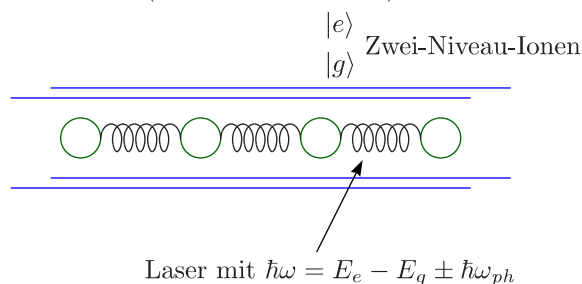
3.4 Anforderungen für Quanten-Informationssysteme

- 1.) N wohldefinierte Qubits, skalierbar zu großen N
- 2.) Präparation eines wohldefinierten Anfangszustands
- 3.) alle Ein-Bit-Gatter und einige Zwei-Bit-Gatter, die einen universellen Satz bilden
- 4.) lange Phasenkohärenzzeit $\frac{\tau_\varphi}{\tau_{op}} \geq 10^4$
- 5.) Ausleseinheit

Man bezeichnet diese als DI VINCENZO-Kriterien.

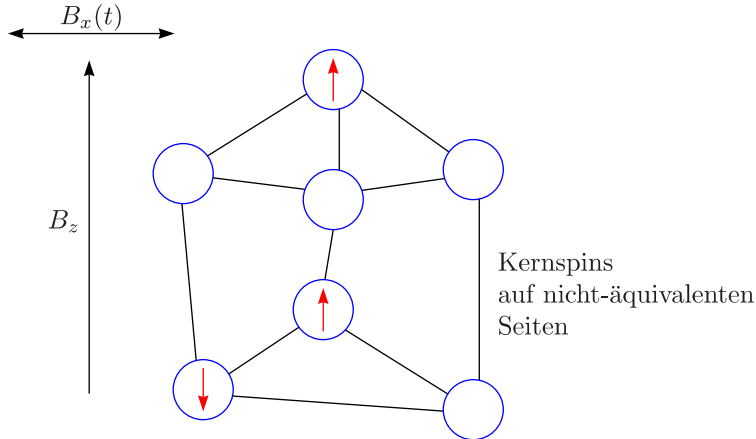
3.4.1 Physikalische Realisierung von Qubits

1.) Ionenfallen (CIRAC und ZOLLER)



- große experimentelle Aufbauten
- + große τ_φ
- + mehr als fünf Qubits gekoppelt
- schwierig in Geräte zu integrieren

2.) NMR (CHUANG et. al., CORY et. al.)



- + große τ_φ
- + sieben Qubits gekoppelt
- kann nicht zu großen N skaliert werden, $\mu_n H \ll k_B T$ (Mischung)

3.) Elektronenspins in Gatterstrukturen (LOSS und DI VINCENZO)

- + τ_φ für Spins $>$ τ_φ für Ladung
- + genau zwei Zustände
- experimentelle Herausforderung

4.) JOSEPHSON-Qubits (MOOIJ et. al.)

- + Technologie verfügbar (SET, SQUID)
- + integrierbar in elektronische Schaltung
- + skalierbar
- experimentelle Herausforderung

3.5 Supraleitung

Quasifreie Elektronen in einem Metall genügen der Dispersionsrelation

$$\varepsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} - \mu$$

Im supraleitenden Fall gilt $E_{\vec{k}} = \sqrt{\varepsilon_{\vec{k}} + \Delta^2}$, wobei Δ eine Energielücke ist. Für die Anregungswahrscheinlichkeit gilt:

$$\exp\left(-\frac{E_{\vec{k}}}{k_B T}\right) \leq \exp\left(-\frac{\Delta}{k_B T}\right)$$

Es bleiben COOPERpaare ohne Lücke mit der Ladung $2e$.

3.6 Kohärenz und Dekohärenz

3.6.1 Die Blochgleichung

Wir gehen aus von den BLOCH-Gleichungen. Diese sind sehr relevant für NMR.

$$\frac{d}{dt}\vec{M} = \frac{1}{\hbar}\vec{B} \times \vec{M}$$

Dadurch wird die Präzession beschrieben. Entspricht die Ausgangsmagnetisierung nicht dem thermischen Gleichgewichtswert M_0 entspricht, wir im allgemeinen ein bestimmter Relaxationsprozess auf einer bestimmten Zeitskala T_1 bzw. T_2 stattfinden. Es sei $\vec{B} = B_z \hat{z}$:

$$\frac{d}{dt}\vec{M} = \frac{1}{\hbar}\vec{B} \times \vec{M} - \frac{1}{T_1}(M_z - M_0)\hat{z} - \frac{1}{T_2}(M_x\hat{x} + M_y\hat{y})$$

Diese Gleichung wurde 1946 von BLOCH postuliert. [BLOCH (46), (57) und REDFIELD (57)]. Wir wollen nun die Gleichung herleiten. Dazu betrachten wir folgenden HAMILTON-Operator:

$$H = -\frac{1}{2}B_z\sigma_z + \text{Dissipation}$$

Auf die Dissipation werden wir später eingehen. Wir benötigen die PAULI-Matrizen:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Die Magnetisierung \vec{M} folgt aus $\text{Sp}(\vec{\sigma}\rho)$. (M sei so normiert (ohne Dimension).) ρ ist die Dichtematrix:

$$\rho = \sum_n W_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| \text{ mit } \sum_n W_n = 1$$

Sie beschreibt ein statistisches Ensemble. Die Zustände $|\psi_n\rangle$ seien mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit W_n realisiert. Die Dichtematrix ist hermitesch und hat Spur eins. Für 2-Niveau-Systeme hat die Dichtematrix folgende Form:

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{00} & \rho_{01} \\ \rho_{10} & \rho_{11} \end{pmatrix}$$

Betrachten wir den quantenmechanischen Erwartungswert:

$$\langle A \rangle = \sum_n W_n \langle n|A|n \rangle = \text{Sp}(A\rho)$$

$$\vec{M} = \text{Sp}(\vec{\sigma}\rho) = \begin{pmatrix} \rho_{10} + \rho_{01} \\ -i\rho_{10} + i\rho_{01} \\ \rho_{00} - \rho_{11} \end{pmatrix}$$

Wir werten nun die LIOUVILLE-Gleichung $\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho]$ für $H = -\frac{1}{2}B_z\sigma_z$ aus:

$$\dot{\rho} = \frac{i}{2\hbar}B_z[\sigma_z, \rho] = \frac{i}{\hbar}B_z \begin{pmatrix} 0 & \rho_{01} \\ -\rho_{10} & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \dot{\rho}_{00} = 0 = \dot{\rho}_{11} \text{ und } \dot{\rho}_{01} = \pm \frac{i}{\hbar}B_z\rho_{10}$$

Daraus folgt die zeitliche Ableitung der Magnetisierung:

$$\dot{M}_x = \frac{i}{\hbar}B_z(\rho_{01} - \rho_{10}) = \frac{B_z}{\hbar}M_y \text{ und } \dot{M}_y = -\frac{B_z}{\hbar}M_x \Rightarrow \boxed{\dot{\vec{M}} = \frac{1}{\hbar}\vec{B} \times \vec{M}}$$

Mit Dissipation, Rauschen und dergleichen gilt:

$$\dot{\rho}_{00} = -\Gamma_{\uparrow}\rho_{00} + \Gamma_{\downarrow}\rho_{11} \text{ und } \dot{\rho}_{11} = \Gamma_{\uparrow}\rho_{00} - \Gamma_{\downarrow}\rho_{11} \text{ und } \dot{\rho}_{10} = \pm \frac{1}{\hbar}B_z\rho_{01} - \Gamma_{\varphi}\rho_{10}$$

Der Beweis folgt. Im thermischen Gleichgewicht gilt detailliertes Gleichgewicht:

$$\frac{\Gamma_{\uparrow}}{\Gamma_{\downarrow}} = \exp\left(-\frac{B_z}{k_B T}\right) \Leftrightarrow \frac{\rho_{11}^{eq}}{\rho_{00}^{eq}} = \exp\left(-\frac{B_z}{k_B T}\right) \text{ (stationär)}$$

$$M_0 = \frac{\varrho_{00}^{eq} - \varrho_{11}^{eq}}{\varrho_{00}^{eq} + \varrho_{11}^{eq}} = \tanh\left(\frac{B_z}{2k_B T}\right)$$

$$\dot{M}_z = \frac{\dot{\varrho}_{00}^{eq} - \dot{\varrho}_{11}^{eq}}{\varrho_{00}^{eq} + \varrho_{11}^{eq}} = -\frac{1}{T_1}(M_z - M_0) \text{ mit } \frac{1}{T_1} \equiv \Gamma_{rel} = \Gamma_{\uparrow} + \Gamma_{\downarrow}$$

Es bleibt $\Gamma_{\varphi} \equiv \frac{1}{T_2}$. T_1 entspricht der Relaxation der Diagonalelemente von ϱ und T_2 dem Zerfall der Neben-diagonalelemente von ϱ .

Beispiel:

Wir berechnen die Dichtematrix in der Basis $|\psi_0\rangle, |\psi_1\rangle$:

$$\psi(t=0) = |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_0\rangle + |\psi_1\rangle)$$

Zur Zeit $t=0$ gilt:

$$\varrho(t=0) = |\psi(t=0)\rangle\langle\psi(t=0)| = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$\varrho(t>0) \stackrel{T=0, B_z=0}{=} \text{diag} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \exp\left(-\frac{t}{T_2}\right)$$

3.6.2 Relaxation T_1 (transversales Rauschen)

$$H_0 = -\frac{1}{2}B_z\sigma'_z - \frac{1}{2}B_x\sigma'_x \xrightarrow{\text{Diagonalisierung}} -\frac{1}{2}\Delta E\sigma_z \text{ mit } \Delta E = \sqrt{B_z^2 + B_x^2}$$

Dies gilt in der Eigenbasis des Qubits. Das Rauschen kann transversal ankoppeln:

$$H = -\frac{1}{2}\Delta E\sigma_z - \frac{1}{2}x(t)\sigma_x (+H_{Bad})$$

x sei eine GAUSS-Verteilung:

$$\langle x(t) \rangle = 0, S_x(\omega) = \frac{1}{2} \int dt \langle \{x(t), x(0)\} \rangle \exp(-i\omega t)$$

Der Mittelwert von x verschwindet, also ist $\langle x(t) \rangle = 0$. $x(t)$ verursacht Übergänge im Zwei-Niveau-System und gleichzeitig im Bad. Diese berechnen wir nach FERMIS goldener Regel:

$$\begin{aligned} \Gamma_{\uparrow\downarrow} &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{i,f} \varrho_i^{Bad} \left| \left\langle 1f \left| \frac{x}{2} \right| i0 \right\rangle \right|^2 \delta(E_i - \Delta E - E_f) = \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{i,j} \varrho_i^{Bad} \langle i|x|f \rangle \langle f|x|i \rangle \frac{1}{2\pi\hbar} \int dt \exp\left(\frac{i}{\hbar}(E_i \mp \Delta E - E_f)t\right) = \\ &= \frac{1}{4} \cdot \frac{2\pi}{\hbar} \int \frac{1}{2\pi\hbar} dt \sum_{i,f} \varrho_i^{Bad} \left\langle i \left| \exp\left(\frac{i}{\hbar}H^{Bad}t\right) x \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H^{Bad}t\right) \right| f \right\rangle \langle f|x|i \rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\Delta Et\right) = \\ &= \frac{1}{4\hbar^2} \int dt \langle x(t)x(0) \rangle_{th} \exp\left(\mp \frac{i}{\hbar}\Delta Et\right) = \frac{1}{4\hbar^2} \langle x(t)x(0) \rangle_{\omega=\pm\frac{\Delta E}{\hbar}} \end{aligned}$$

Damit ergibt sich:

$$\boxed{\frac{1}{T_1} = \Gamma_{\uparrow} + \Gamma_{\downarrow} = \frac{1}{2\hbar^2} S_{x,\perp} \left(\omega = \frac{\Delta E}{\hbar} \right)}$$

$$\frac{1}{T_2} = \frac{1}{2T_1} + T_{\varphi}^*$$

$$\boxed{\Gamma_{\varphi}^* = \frac{1}{2\hbar^2} S_{x,\parallel}(\omega \approx 0)}$$

Relaxation bezieht auf die Diagonalelemente. Die Dekohärenz ist eine Aussage, dass die Nebendiagonalelemente zerfallen zu null, da die Phase verloren geht. x ist eine quantenmechanische Variable. (Rechnet man dies genau, so wird man feststellen, dass es die Auslenkung eines harmonischen Oszillators ist.) Relaxation bewirkt auch Dekohärenz.

$$\Gamma_\varphi = \frac{1}{T_2} = \frac{1}{2}\Gamma_{rel}$$

Um dies zu verstehen, betrachten wir zunächst einen Spezialfall. Wir nehmen an, der Zustand $|\psi(t)\rangle$ sei ein kohärenter Zustand, nämlich eine Superposition von $|0\rangle$ und $|1\rangle$:

$$|\psi(t)\rangle = C_0(t)|0\rangle + C_1(t)|1\rangle \text{ mit } |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ und } |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Da $|\psi(t)\rangle$ ein reiner Zustand ist, lautet die Dichtematrix:

$$\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| = \begin{pmatrix} |C_0|^2 & C_0 C_1^* \\ C_0^* C_1 & |C_1|^2 \end{pmatrix}$$

Wir nehmen an, die Relaxation finde bei $T = 0$ statt und es sei $\Gamma_\uparrow = 0$, $\Gamma_\downarrow \neq 0$. Die Anfangsbedingungen sind $|C_1(0)|^2 \neq 0$ (aber klein) und $|C_0(0)|^2 = 1 - |C_1(0)|^2$. Es existiert also eine kleine Wahrscheinlichkeit, dass die das System im angeregten Zustand befindet. Hieraus ergibt sich:

$$|C_1(t)|^2 = |C_1(0)|^2 \exp(-t\Gamma_\downarrow) \text{ und } |C_0(t)|^2 \approx 1$$

Damit folgt:

$$|\varrho_{01}(t)| = |C_0(t)C_1^*(t)| = |C_0(0)C_1(0)| \exp\left(-\frac{t\Gamma_\downarrow}{2}\right) \propto \exp(-t\Gamma_\varphi) \Rightarrow \Gamma_\varphi = \frac{\Gamma_{rel}}{2}$$

Endliche Temperatur und besseres Modell:

$$H = -\frac{1}{2}\Delta E \sigma_z + \sum_k g_k (b_k^\dagger \sigma_- + \sigma_+ b_k) + \sum_k \hbar\omega_k \left(b_k^\dagger b_k + \frac{1}{2}\right)$$

$$\sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_- \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \text{ und } \sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_- \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Man spricht von der Rotating-Wave-Näherung. (Prozesse wie $b_k^\dagger \sigma_+$ verletzen die Energieerhaltung, womit deren Erwartungswerte verschwinden.) Näheres dazu findet man in Büchern der Quantenmechanik.

$$\dot{\varrho}_{11} = - (n^0(\Delta E) + 1) \Gamma_0 \varrho_{11} + n^0(\Delta E) \Gamma_0 \varrho_{00}$$

$-n^0(\Delta E) \Gamma_0 \varrho_{11}$ beschreibt die stimulierte Emission und $-\Gamma_0 \varrho_{11}$ die spontane Emission. $n^0(\Delta E) \Gamma_0 \varrho_{00}$ ist ein Absorptionsprozess.

$$\varrho_{00} + \varrho_{11} = 1$$

$$n^0(\omega_n) = \langle b_n^\dagger b_n \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_k}{k_B T}\right) - 1}, \frac{\Gamma_\downarrow}{\Gamma_\uparrow} = \frac{(n^0(\Delta E) + 1)\Gamma_0}{n^0(\Delta E)\Gamma_0} = \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_B T}\right)$$

$$\dot{\varrho}_{01} = - \left(n^0(\Delta E) + \frac{1}{2}\right) \Gamma_0 \varrho_{01} + \text{Oszillationen mit } \left(n^0(\Delta E) + \frac{1}{2}\right) \Gamma_0 = \Gamma_\varphi \equiv \frac{1}{T_2}$$

$$\Gamma_{rel} = \frac{1}{T_1} = \Gamma_\uparrow + \Gamma_\downarrow = (2n^0(\Delta E) + 1)\Gamma_0 \Rightarrow \Gamma_\varphi = \frac{1}{2}\Gamma_{rel}$$

Dies gilt auch bei $T \neq 0$.

3.7 Pure Dephasierung (für longitudinales Rauschen)

Wir könnten auch den Fall haben, dass das Rauschen anders an den HAMILTON-Operator ankoppelt:

$$H = -\frac{1}{2}\Delta E\sigma_z - \frac{1}{2}x\sigma_z + H_{Bad}$$

Es gilt – wie wir schon gesehen haben – die LIOUVILLE-Gleichung:

$$\varrho(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t H(t') dt'\right) \varrho_0 \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_0^t H(t') dt'\right)$$

Betrachten wir ein Element aus der Nebendiagonale, wobei wir $\Delta E\sigma_z$ ignorieren:

$$\varrho_{01}(t) = \exp\left(-\frac{i}{2\hbar}\int_0^t x(t')\sigma_z dt'\right) |0\rangle\langle 1| \exp\left(\frac{i}{2\hbar}\int_0^t x(t')\sigma_z dt'\right) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t x(t') dt'\right) \text{ da } \varrho(0) = |0\rangle\langle 1|$$

Die Phasenfaktoren addieren sich also und heben sich nicht weg.

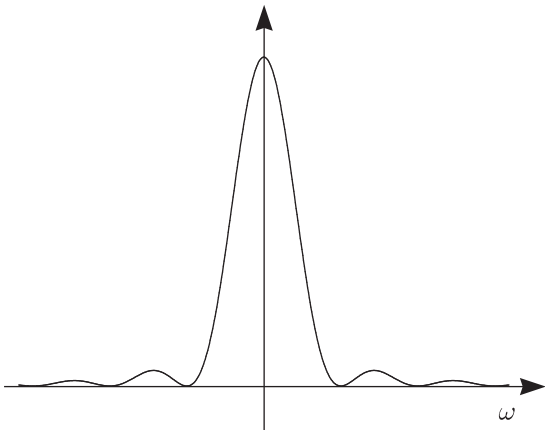
$$\langle |\varrho_{01}(t)| \rangle \propto \left\langle \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t x(t') dt'\right) \right\rangle$$

$x(t)$ ist GAUSSSCH verteilt, womit sich weiter ergibt:

$$\exp\left(-\frac{1}{2\hbar^2} \left\langle \left(\int_0^t x(t') dt'\right)^2 \right\rangle\right) = \exp\left(-\frac{1}{2\hbar^2} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \langle x(t_1)x(t_2) \rangle\right)$$

Es genügt anzunehmen, dass x klassisch sei.

$$\begin{aligned} & \exp\left(-\frac{1}{2\hbar^2} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \int \frac{d\omega}{2\pi} S_x(\omega) \exp(-i\omega(t_1 - t_2))\right) = \\ & = \exp\left(-\frac{1}{2\hbar^2} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{S(\omega)}{\omega^2} (\exp(-i\omega t) - 1)(\exp(i\omega t) - 1)\right) = \\ & = \exp\left(-\frac{1}{2\hbar^2} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{S_k(\omega)}{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2} \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)\right) \end{aligned}$$



Mit $\frac{\sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)}{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2} \approx 2\pi t \delta(\omega)$ und $\Gamma_{rel} = \frac{1}{2\hbar^2} S_x(\omega = \Delta E)$ ergibt sich nun:

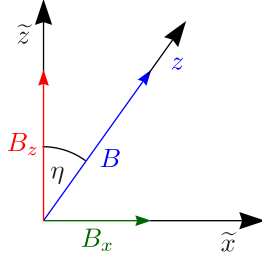
$$\exp(-t\Gamma_{\varphi^*}) \text{ mit } \Gamma_{\varphi^*} = \frac{1}{2\hbar^2} S_x(\omega = 0)$$

Dies ist ein exponentieller Zerfall.

3.8 Longitudinales und transversales Rauschen

$$H = \underbrace{-\frac{B_z}{2}\tilde{\sigma}_z - \frac{B_x}{2}\tilde{\sigma}_x}_{H_0} - \frac{1}{2}x\tilde{\sigma}_z + H_{Bad}$$

Wir gehen nun in die Basis, in der H_0 diagonal ist.



$$H = -\frac{\Delta E}{2}\sigma_z - \frac{1}{2}x \cos \eta \sigma_z - \frac{1}{2}x \sin \eta \sigma_x + H_{Bad} \text{ mit } \Delta E = \sqrt{B_z^2 + B_x^2}$$

Hieraus folgt schlussendlich:

$$\Gamma_{rel} = \sin^2 \eta \frac{1}{2\hbar^2} S_x(\omega = \Delta E)$$

$$\Gamma_\varphi = \frac{1}{2}\Gamma_{rel} + \cos^2 \eta \frac{1}{2\hbar^2} S_x(\omega = 0)$$

3.8.1 1/f-Rauschen

$$S_x(\omega) = \frac{E_{1/f}^2}{|\omega|} \xrightarrow{\omega \rightarrow 0} \infty$$

Hieraus ergibt sich das Pure-Dephasing-Gesetz.

$$|\langle \varrho_{01} \rangle| \sim \exp \left(-\frac{t^2}{\hbar^2} \int_0^\infty d\left(\frac{\omega t}{2}\right) \frac{E_{1/f}^2}{2\pi} \frac{\omega t}{2} \cdot \frac{\sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)}{\left(\frac{\omega}{2}\right)^2} \right)$$

$$I = \int_{\frac{\omega_{IR}t}{2}}^\infty \frac{\sin^2(x)}{x^3} dx = \exp \left(-\frac{E_{1/f}^2 t^2}{2\pi\hbar^2} \right) = \exp \left(-\frac{E_{1/f}^2 t^2}{\hbar^2 \pi} \left| \ln \left(\frac{\omega_{IR}t}{2} \right) \right| \right)$$

ω_{IR} ist der Infrarot-Abschneideparameter.

3.9 Adiabatisches Quantenrechnen (adiabatic quantum computation)

- * Motivation: Intrinsische Robustheit gegenüber Dekohärenz (auch 1/f-Rauschen)
- * Es ist evident, dass NP-vollständige Probleme zumindest im Mittel exponentiell schnell gelöst werden können als mit klassischem Computer.
- * keine schnellen Pulse nötig
Dies ist experimentell einfacher.

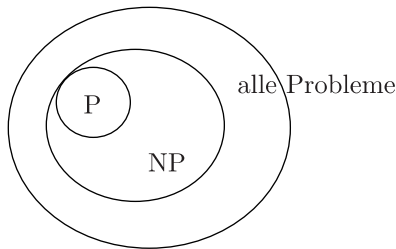
3.9.1 NP-vollständige Probleme

Die meisten Probleme lassen sich einteilen in solche, die polynomiell auf einem Computer lösbar sind und solche, für die es noch keinen solchen Algorithmus gibt. A priori heißt NP **nicht**: „Probleme, die nicht in Polynomialzeit lösbar sind.“ Sondern wir wollen folgendes definieren:

- * P sei die Menge aller Probleme, die auf einer deterministischen TURING-Maschine in **P**olynomialzeit lösbar sind.
- * NP sei die Menge aller Probleme, die auf einer **nicht**deterministischen TURING-Maschine in Polynomialzeit lösbar sind.

a.) NP-schwer:

Darunter fallen die Probleme, die mindestens so „schwer“ wie jedes andere Problem in der NP-vollständigen Menge lösbar sind.



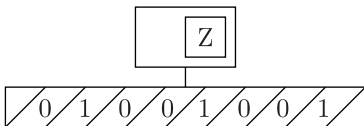
b.) NP-vollständig:

p ist Element der NP-vollständigen Menge $\Leftrightarrow p \in NP$ und p ist NP-schwer (NP-vollständig ist eine Teilmenge von NP-schwer.)

Ist ein Problem NP-vollständig, so kann man alle NP-Probleme auf dieses NP-vollständige Problem zurückführen.

- * Die wichtigste Frage der theoretischen Informatik ist, ob $P = NP$ gilt. (Man glaubt jedoch, dass dies nicht der Fall ist.)

3.9.2 Turing-Maschine



- * Zustände der TURING-Maschine, Buchstaben auf Band

- * Ein Programm ist eine Überföhrungsfunktion δ

$$\delta(\text{alter Zustand, neuer Buchstabe}) = (\text{neuer Zustand, neuer Buchstabe, Bewegung links/rechts/stehen bleiben})$$

- * „Deterministisch“ heißt, dass es für einen gegebenen Zustand und einen gegebenen Buchstaben ein eindeutiges Ergebnis gibt. Eine deterministische TURING-Maschine ist zu verstehen wie ein klassischer Computer.

- * Im Gegensatz dazu spricht man von „nichtdeterministisch“, wenn mehrere Aktionen „parallel“ erlaubt sind. Das Ergebnis ist damit nicht eindeutig (verzweigter Aktionsbaum).

Beispiel: 3-SAT (von satisfiability)

Gegeben sei ein boolescher Ausdruck B der Form $B = C_1 \wedge C_2 \wedge \dots \wedge C_n$ mit $C_i = Z_{i,1} \vee Z_{i,2} \vee Z_{i,3}$. Die $Z_{i,n}$ mit $n = 1, 2, 3$ sind Variablen. Betrachten wir dazu ein kleines Beispiel:

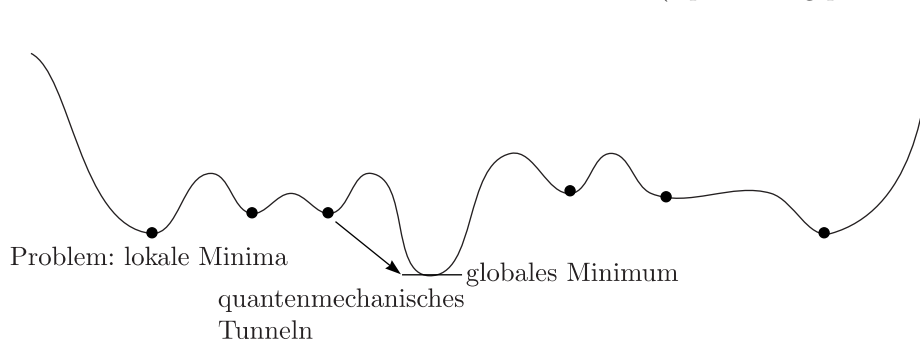
$$B = (\bar{a} \vee \bar{b} \vee \bar{c}) \wedge (a \vee \bar{b} \vee \bar{d}) \wedge (a \vee b \vee \bar{d})$$

Die Frage ist, ob es eine Variablenbelegung mit 0 oder 1 für die angegebenen Variablen gibt, so dass der boolesche Ausdruck erfüllt ist.

- * $abcd = (1111)$ verletzt die erste Klausel.
- * $\bar{a}bcd = (0111)$ verletzt die zweite Klausel.
- * $a\bar{b}cd = (1011)$ erfüllt B .

Wie kann man ein schweres Problem (mit mehr Klauseln) lösen?

- * Der klassische Algorithmus ist, dass man alle Belegungen ausprobiert. Dies führt auf einen Aufwand $O(Z^n)$.
- * Alternativ könnte man die Variablen einzeln umdrehen (Optimierungsproblem).



Die Quantenmechanik kann leichter globale Minima finden (beispielsweise durch „Tunneln“).

3.9.3 Adiabatisches Theorem

Den Beweis dazu findet man beispielsweise im MESSIAH. Wir gehen aus von der zeitabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle$$

und betrachten $H(t)$ für $0 \leq t \leq T$. Es ist ganz sinnvoll, dimensionslose Variablen einzuführen, also zum Beispiel $s = \frac{t}{T}$ und $H(t) = \tilde{H}(t/T) = \tilde{H}(s)$. Wir definieren nun instantane Eigenwerte und Eigenvektoren.

$$\tilde{H}(s) |n; s\rangle = E_{n,s} |n; s\rangle$$

n steht für den n -ten Eigenwert, wobei $|n; s\rangle$ die zugehörigen Eigenvektoren und $E_{n,s}$ die Eigenwerte sind. Das adiabatische Theorem besagt, dass sich ein ursprünglich im Grundzustand befindliches System auch nach der Zeit T noch im Grundzustand aufhält, wenn sich H langsam ändert. Außerdem gilt $E_1(s) - E_0(s) > 0$ für jedes $s \in [0, 1]$. Formaler lautet das adiabatische Theorem: „Sei $|\psi(0)\rangle = |n = 0, s = 0\rangle$ und $E_1(s) - E_0(s) > 0$ für jedes $s \in [0, 1]$, so gilt:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} |\langle n = 0, s = 1 | \psi(T) \rangle| = 1$$

An dieser Stelle kann man sich nun fragen, was „langsam“ bedeutet. Die Bedingung dazu ist folgende:

$$T \gg \frac{\varepsilon}{g_{min}^2} = \max_{0 \leq \varepsilon \leq 1} \left| \left\langle n = 1, s \left| \frac{d\tilde{H}}{ds} \right| n = 0, s \right\rangle \right| \text{ mit } g_{min} = \min_{0 \leq s \leq 1} (E_1(s) - E_0(s)) \text{ mit } \hbar = k_B = 1$$

Es handelt sich dabei um das Minimum der Energielücke zwischen erstem angeregten Zustand und Grundzustand. Typisch ist, dass ε proportional zum Energieeigenwert ist. Wirklich relevant ist jedoch g_{min} .

3.9.4 Adiabatischer Quantenalgorithmus

Die Originalarbeiten sind von FARHI et al. (2000).

- 1.) Definiere einen Anfangs-HAMILTONoperator H_B mit leicht zu konstruierendem Grundzustand.
- 2.) Definiere einen problemspezifischen HAMILTONoperator H_p so, dass der Grundzustand von H_p die Lösung kodiert.

3.) Zeitabhängiger HAMILTONoperator:

$$H(s) = s \cdot H_p + (1 - s) \cdot H_B$$

4.) Starte mit Grundzustand $|\psi(0)\rangle = |n = 0; s = 0\rangle$ und ändere H adiabatisch während der Zeitspanne T .

5.) Zur Zeit T kodiert der Grundzustand $|\psi(T)\rangle$ die Lösung und muss nur noch gemessen werden.

Beispiel: 3-SAT

1.) Wir definieren einen 1-Bit-Operator $H_B^{(i)} = \frac{1}{2}(1 - \sigma_x^{(i)})$

Die Eigenvektoren von H_B (in der Basis $\{|z_i\rangle\}$) sind:

$$|x_i = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ und } |x_i = 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \Rightarrow H_B |x_i\rangle = x_i |x_i\rangle$$

2.) Für $H_{B,C} = H_B^{(i_c)} + H_B^{(j_c)} + H_B^{(k_c)}$

$$H_B = \sum_C H_{B,C} = \sum_{j=1}^n d_j H_B^{(j)}$$

d_i ist die Anzahl der Variablen im booleschen Ausdruck. Der Grundzustand ist gegeben als Tensorprodukt der einzelnen Grundzustände, nämlich $|x_1 = 0\rangle |x_2 = 0\rangle \dots |x_n = 0\rangle$.

$$|x_1 = 0\rangle |x_2 = 0\rangle \dots |x_n = 0\rangle = \frac{1}{2^{\frac{n}{2}}} \sum_{z_1} \sum_{z_2} \dots \sum_{z_n} |z_1\rangle |z_2\rangle \dots |z_n\rangle$$

2.) Zunächst klassisch:

Wir definieren eine Energiefunktion:

$$h_C = \begin{cases} 0 & \text{wenn } z_{i,c}, z_{j,c}, z_{k,c} \text{ die Klausel erfüllen} \\ 1 & \text{sonst} \end{cases}$$

Wenn wir $h = \sum_C h_C$ definieren, so ergibt sich $h = 0$, wenn alle Klauseln erfüllt sind. Ansonsten ist $h > 0$. Wir vollziehen den Übergang zur Quantenmechanik:

$$H_{P,C} |z_1\rangle |z_2\rangle \dots |z_n\rangle = h_C(z_{i,c}, z_{j,c}, z_{k,c}) |z_1\rangle |z_2\rangle \dots |z_n\rangle$$

3.10 Laufzeitverhalten und Dephasierung

a.) Wie verhält sich T bezüglich der Eingabegröße?

$$T \gg \frac{\epsilon}{g_{min}^2}$$

Man löst die SCHRÖDINGER-Gleichung numerisch. Beim Random 3-SAT [am Phasenübergang; $\frac{m}{n} = 4,25$] wurde ein Verhalten $O(n^3)$ gefunden.

b.) Numerisch:

Hat man einen HAMILTON-Operator $H(t) + K(t)$, wobei $K(t)$ einen Fehler repräsentiert, so sind die Ergebnisse relativ unabhängig von $K(t)$ unter der Bedingung, dass sich $K(t)$ entweder sehr schnell oder sehr langsam ändert und zu Beginn klein ist.