



МОСКОВСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ
ИМ. М.В. ЛОМОНОСОВА

Ю.И. ОЖИГОВ

Квантовый компьютер



МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. ЛОМОНОСОВА

Факультет вычислительной математики и кибернетики

Ю.И. Ожигов

КВАНТОВЫЙ КОМПЬЮТЕР



МОСКВА – 2020

Рецензент:

Андрей Хренников, профессор университета Линнея, Векшьё, Швеция,
Директор Международного центра
математического моделирования в физике и когнитивных науках

Ожигов, Юрий Игоревич.

О-45 **Квантовый компьютер** / Ю.И. Ожигов. – Москва : МАКС Пресс, 2020. – 172 с.
ISBN 978-5-317-06403-7
e ISBN 978-5-317-06405-1

Эта книга о грандиозном проекте, условно называемом «Квантовый компьютер». Она рассчитана на читателей, интересующихся точной теорией микромира и желающих познакомиться с современным подходом к физике сложных процессов с точки зрения квантовой теории. Первоначальных знаний в этой области не предполагается, но чтение всего текста требует математической подготовки на уровне первых двух курсов университета по естественным специальностям. Излагаются не только вопросы, входящие в традиционный материал подготовки студентов по этой теме, но и подходы к нерешенным проблемам, что может представить интерес для специалистов. В книге много задач, решение которых даст любопытному читателю навыки самостоятельной работы и позволит самому принять участие в развитии этого проекта.

Ключевые слова: квантовый компьютер, квантовый алгоритм, декогерентность, квантовое моделирование, запутанные состояния, квантовое дальноедействие.

УДК 004
ББК 32.971.9

Reviewer:

Andrei Khrennikov, professor of Linnaeus University, Växjö, Sweden,
The director of International Centre for mathematical modelling in physics and cognitive science

Ozhigov, Y.I.

Quantum computer / Y.I. Ozhigov. – Moscow : MAKS Press, 2020. – 172 p.
ISBN 978-5-317-06403-7
e ISBN 978-5-317-06405-1

This book is about a Grand project, conventionally called «Quantum computer». It is intended for readers who are interested in the exact theory of the microcosm and want to get acquainted with the modern approach to the physics of complex processes from the point of view of quantum theory. Initial knowledge in this area is not assumed, but reading the entire text requires mathematical training at the level of the first two University courses in natural Sciences. Not only questions included in the traditional material of training students on this topic, but also approaches to unsolved problems that may be of interest to specialists are presented. The book contains a lot of tasks, the solution of which will give the curious readers the skills of independent work and allow them to take part in the development of this project.

Keywords: quantum computer, quantum algorithms, quantum modeling, decoherence, entangled states.

Оглавление

Предисловие	7
1 Введение в квантовую механику	11
1.1 Квантовые состояния. Формализм Дирака	12
1.2 Измерение. Матрица плотности	14
1.3 Композитные системы.	17
1.3.1 Частичные измерения. Смешанные состояния	20
1.3.2 Теорема Шмидта	24
1.3.3 Парадокс квантовой энтропии	25
1.4 Физические величины как наблюдаемые	26
1.4.1 Наблюдение координаты	26
1.4.2 Квантовый оператор Фурье и наблюдение импульса	27
1.4.3 Наблюдение момента импульса и спина	29
1.4.4 Одновременное наблюдение нескольких величин	29
1.5 Унитарная эволюция	31
1.5.1 Уравнение Шредингера и решение задачи Коши для него	31
1.5.2 Уравнение Шредингера для матрицы плотности	32
1.5.3 Матричная динамика	33
1.5.4 Интегралы по путям	34
1.6 Открытая квантовая система. Квантовое основное уравнение	37
1.7 Фейнмановский квантовый компьютер	39
1.8 Квантовые гейты	40
1.9 Алгоритм Гровера	43
1.10 Алгоритм Гровера как квантовая модель сложного процесса	46
1.11 Алгоритм Залки-Визнера	48

1.12	Реалистическая схема квантового компьютера	50
1.12.1	Ядро операционной системы квантового компьютера	52
2	Конечномерные модели КЭД	53
2.1	Моды электромагнитного поля	54
2.2	Модель Джейнса-Каммингса	55
2.3	Декогерентность в модели Джейнса-Каммингса	59
2.4	Квантовое бутылочное горлышко	60
2.5	Модель Тависа-Каммингса	62
2.6	Темные состояния кубитовых систем	63
2.7	Термическая стабилизация	65
2.8	Термические аттракторы для двух атомов	68
2.9	Модель Тависа-Каммингса-Хаббарда	68
2.10	Запутывающий гейт в модели JCH	69
2.11	Расчет фазовых сдвигов	70
2.12	Реализация соCSign	71
2.13	Реализация однокубитных гейтов	73
2.14	Оптическая проводимость графов	74
2.14.1	Оптическое определение изоморфизма графов	75
2.14.2	Оптическая полупроводимость	75
2.15	Коллективные осцилляции	76
2.15.1	Эффект DAT	78
2.16	Системы многоуровневых атомов	80
2.17	Оптический отбор темных состояний	82
2.18	Многоуровневый случай	87
2.19	Химический квантовый компьютер	89
2.20	Модификация с движением атомов. Черные состояния	92
2.21	Относительная индивидуальность электронов	93
3	Квантовый детерминизм	97
3.1	Квантовое дальноедействие	101
3.2	Квантовая телепортация	107

3.3	Распределенные квантовые вычисления	108
3.3.1	Одностороннее управление	108
3.3.2	Квантовые бифотонные сигналы	109
3.4	Дискретность амплитуд	113
3.5	Равновесные состояния	116
3.6	Кванты амплитуды	117
3.7	Кванты амплитуды в алгоритме Гровера	122
3.8	Константа масштабируемости и ее нахождение	124
3.9	Зерно амплитуды как причина измерений	129
3.10	Выводы	130
3.11	О перспективах квантового детерминизма	130
4	Диалог специалиста с дилетантом	133
4.1	Раунд 1. Околонаучный	133
4.2	Раунд 2. Около-биологический	137
4.3	Раунд третий, решающий, посвященный физике	140
	Заключение для тех, кто дочитал до конца	144
	Благодарности	147
A	Приложение	149
A.1	Нижняя массовая оценка квантовой сложности	149
A.2	Квантовый гармонический осциллятор	152
A.3	Приближение вращающейся волны	153
A.4	Явный вид темных состояний в модели ТС	154
A.5	Энтропия	162
A.6	Конструктивный математический анализ	163
A.7	Реализация квантового преобразования Фурье на квантовом компьютере	165

Предисловие

Физика квантового компьютера есть, по-существу, квантовая физика сложных систем, которая отличается от квантовой теории простых систем, так называемой копенгагенской теории. Отличие - в новых, более жестких ограничениях на математический аппарат бесконечно малых, а также и тем, что для сложных систем вычисления играют совершенно особую роль, которой не было в старой, копенгагенской теории. Название этого проекта возникло в далеких временах конца 20 века, когда мы представляли его конечный продукт как некую вычислительную машину, стоящую на рабочем столе, или в лаборатории, и способную вычислять какие-то вещи быстрее, чем классические суперкомпьютеры.

Последние 30 лет показали наивность такого представления. В действительности мы хотим не вычислять что-то абстрактное, мы хотим управлять сложными естественными процессами, что нужно для нашего выживания. И это управление должно вестись на квантовом уровне, потому что ход сложного процесса определяется в микромире, где господствуют законы квантовой физики.

Сами вычисления нужны лишь для того, чтобы управлять. Для этого надо хорошо знать, к чему приведет тот или иной ход в управлении, то есть надо уметь предсказывать поведение управляемой системы (наноустройство, живая клетка или организм), причем делать это в режиме реального времени, то есть быстрее, чем управляемая система сама откликнется на наше управление. Вот эту роль и должен сыграть квантовый компьютер, как бы он ни выглядел.

Первый шаг на пути создания этого устройства уже сделали наши предшественники - основатели квантовой механики. Этот грандиозный шаг в познании мира привел к появлению компьютеров как таковых. Разумеется, можно отсчитывать историю вычислений от механических арифмометров времен Буля; исторически это имеет основания, но все же компьютер - это микроэлектронное устройство - набор микросхем на кремниево-германиевых гетероструктурах. И принцип работы таких устройств основан на квантовом представлении о состоянии электронов в твердом теле, то есть на квантовой механике.

Вся современная микроэлектроника - достижение квантовой теории. Причем здесь она применяется для управления огромными ансамблями идентичных частиц - бозонов, как фотоны, или фермионов, как электроны. Методы математического анализа работают для таких ансамблей очень хорошо, что и является причиной успеха на этом этапе, охватывающем почти весь 20 век. Мы умеем хорошо управлять такими микроэлектронными системами.

Сегодня нужно научиться управлять более сложными системами биологической природы. Здесь речь идет об отдельных атомах, обладающих индивидуальностью. Отдельные звенья ДНК уже нельзя объединить в ансамбли тождественных частиц, как атомы гелия-4 в жидком состоянии, или как электроны в полупроводящем слое гетероструктуры. Вот этот этап и обозначается термином "квантовый компьютер", и его нам только предстоит пройти. Речь здесь идет об управлении живым, что радикально отличает задачи настоящего времени от прошлых эпох.

Квантовый компьютер есть метод проникновения в глубины микромира, в ту об-

ласть, где и сама квантовая теория должна быть преобразована и приспособлена к огромной сложности живой материи. Проект его создания обширный и многообразный, его невозможно охватить в одной книге.

Здесь представлена только одна его сторона - математическая, причем с пристрастной точки зрения автора, который сам занимается этой темой. Читатель может найти описание иных сторон этого проекта в постоянно растущей литературе и обращаясь к архиву <http://arxiv.org>, раздел quant-ph. Математическая сторона квантового компьютера очень важна, так как здесь аналитический аппарат, привычный физикам 20 века, не является вполне адекватным реальности. Это было ярко продемонстрировано в 90-х годах на примере так называемых быстрых квантовых алгоритмов.

Развитие проекта квантового компьютера способно оказать серьезное воздействие на ход развития естествознания уже в ближайшие десятилетия, поэтому многие работы по нему не публикуются, а их результаты сразу используются в сфере информационных технологий. Это относится к квантовой криптографии - части проекта, которая оперирует с одним или двумя кубитами или с прецизионными квантовыми приборами; оба эти направления широко применяются в практике. Здесь мы не будем их рассматривать. Нашим предметом будет масштабируемый квантовый компьютер как устройство, моделирующее реальность.

В первой главе дается краткое введение в квантовую механику для тех, кто с ней не знаком. По этому предмету есть великолепные монографии, начиная с канонической книги Льва Ландау и Евгения Лифшица [1] и многих других столь же превосходных книг. Однако запрос на простоту изложения основных тезисов, в особенности в применении к сложным системам, диктует иной стиль изложения. Примером является уникальная книга Ричарда Фейнмана [2], в которой квантовые понятия изложены практически без использования высшей математики. Я придерживался более традиционного стиля, основанного на матричной алгебре, но сделал акцент на дискретном характере квантовой теории. Это изложение было бы полезно также и специалистам - физикам. Здесь же описана и абстрактная модель квантового компьютера по Фейнману - с пользовательским интерфейсом в виде квантовых гейтов, а также свойство концентрации амплитуды - на примере знаменитого алгоритма Гровера.

Во второй главе описывается конечномерная модель КЭД - квантовой электродинамики Тависа-Каммингса-Хаббарда (ТСН), и некоторые ее обобщения, ведущие к конечномерной модели химии. Эта модель в определенном смысле аккумулирует всю квантовую механику. Сфера приложений квантовой методологии ограничена именно КЭД, и попытки продвинуть эту методологию на ядерную физику или даже гравитацию связаны именно с продвижением методов КЭД в эти области. Модель ТСН позволяет выявить феномены чисто квантовой природы, имеющие глубокий смысл; главным из которых является феномен так называемых темных состояний. Другие явления: DAT (dephasing assisted transport) или квантовое бутылочное горлышко, оттеняют квантовую сторону некоторых макроскопических процессов, имеющих большое практическое значение, например, связанных с превращениями атомов.

Третья глава посвящена описанию возможного перехода от копенгагенской квантовой теории к пост-квантовой детерминистической теории сложных систем. Эта тема связана с расплывчатым термином "скрытые параметры" квантовой механики,

под которыми на заре ее развития понимались какие-то неизвестные величины, знание которых дало бы точное предсказание результатов измерений. В области точно поставленных экспериментов над простыми системами, которыми до сих пор ограничивается круг традиционных задач квантовой физики, отсутствие таких параметров доказано исчерпывающим образом. Однако квантовый компьютер выходит за пределы таких систем, и здесь вопрос о детерминистическом описании явлений - что не тождественно предсказанию результатов измерений - становится актуальным. Мы рассмотрим эксперимент, фиксирующий нарушение неравенств Белла, и связанную с ним квантовую нелокальность, свидетельствующую о том, что детерминистическое описание многочастичных систем обязано быть нелокальным. Далее, мы опишем метод квантования амплитуд, показывающий принципиальную возможность квантового детерминизма.

Четвертая глава содержит диалоги двух условных персонажей: Специалиста и Дилетанта, в которых проясняются возможные подходы к сложным вопросам, на которые нет ответа в первых трех главах. Квантовый компьютер, как проект, ожидает большое будущее. Направления развития современных подходов определены далеко не однозначно, многое еще подлежит обсуждению. Здесь не обойтись без синтеза знаний из разных научных областей, потому что наш проект не принадлежит одной лишь физике.

Заключение подводит итог и намечает ближайшую перспективу развития квантового компьютера, которая уже видна достаточно ясно.

В приложении я разместил интересные, но частные вопросы, иллюстрирующие основной материал книги. Там есть некоторые обобщения модели ТСН на системы многоуровневых атомов, установлена явная форма темных состояний для двухуровневых систем с помощью квантования амплитуды. Я также привел одну из массовых нижних оценок квантовой сложности, свидетельствующую в пользу того, что сверхспособности квантовых компьютеров ограничиваются задачами, допускающими ускорение при классическом распараллеливании. Есть также изложение двух тем: квантового гармонического осциллятора и приближения вращающейся волны в виде задач, последовательное решение которых приведет трудолюбивого читателя к более глубокому овладению методами квантовой механики.

В книге много нового материала; большая часть так или иначе опубликована в научных журналах, но еще не стала общепринятым трендом в этой области.

Я изложил традиционные вещи бегло, сосредоточившись на нерешенных этапах большой проблемы создания математического обеспечения квантового компьютера. Квантовая операционная система требует совсем иного подхода по сравнению с классической, так как здесь речь идет о распространении самой квантовой теории на новую для нее область - на сложные системы, которые не сводятся к простой сумме своих частей. Это накладывает не совсем обычные требования и на математический аппарат: он должен исходить из дискретности, так что использование алгебраических и аналитических методов, составляющих традиционное "меню" подготовки студентов - физиков, здесь хоть и очень важно, но ограничено; для сложных систем надо широко применять компьютерное и суперкомпьютерное моделирование, описание которого не могло войти в книгу.

После прочтения книги читатель, не зависимо от области специализации, получит общее представление о современной ситуации в проекте квантового компьютера, что принесет ему несомненную пользу.

Глава 1

Введение в квантовую механику

Квантовая физика - это методология, применимая к механике микро-, мезо- и макроскопических объектов (для последних она превращается в обычную, ньютоновскую), и к электродинамике, что включает в себя физику атомов и молекул, химию и, потенциально, хотя бы частично, биологию (в основном, это касается отдельных процессов). Вопрос о ее применимости к настоящей биологии живых организмов, к сверхбыстрым процессам типа ядерных реакций и превращению элементарных частиц, а также к гравитации, является дискуссионным в силу того, что в этих областях нет возможности непосредственных манипуляций с реальными системами (ядерная физика и гравитация), или чрезвычайно велика даже классическая сложность объекта исследования (биология).

Поэтому основным иллюстративным материалом для нас будут примеры из электродинамики.

Кроме того, абстракция актуальных бесконечностей, на которых, в частности, построен математический анализ, требующий предельного перехода $dx \rightarrow 0$, логически не согласована с квантовой механикой. Это проявляется, например, в виде ненормируемости собственных функций операторов координаты и импульса. Этому расхождению есть глубокие физические причины: от зерна разрешения фактически зависят заряды и массы элементарных частиц, изменение которых называют перенормировками. Разумеется, мы не будем отказываться от аналитической техники, которая отлично работает для простых систем, бывших в фокусе интереса физиков 20 века.

Однако для нашего предмета - квантового компьютера - математический анализ надо применять с осторожностью. При росте числа частиц, даже самых простых, у которых всего лишь два состояния (их называют кубитами) при условии сохранения их индивидуальности, размерность пространства состояний растет как экспонента, и мы быстро встречаемся с теми трудностями, которыми в простых системах можно пренебречь.

Первым из таких тонких моментов будет дискретизация пространства классических состояний любого объекта, что необходимо для обеспечения конечномерности рассматриваемого пространства.

Далее нам придется дискретизировать и амплитуды, то есть коэффициенты в ли-

нейных комбинациях базисных состояний. Это связано с правилом Борна, приписывающим свойство вероятности квадратам модулей амплитуд. Для простых систем это не актуально, так как там всегда можно набрать огромную статистику, но для сложных систем, входящих в нашу область, набор статистики будет ограничен, и дискретность самих амплитуд станет актуальной.

Эти требования являются необходимыми для исследования квантовых компьютеров, и в дальнейшем мы будем по мере необходимости вводить такие ограничения в математический аппарат. В стандартной части квантовой теории, до появления квантовых компьютеров, эти ограничения касались только компьютерных расчетов, поскольку машина не понимает бесконечностей. Однако наш предмет не входит в квантовую теорию. Квантовый компьютер выходит за ее пределы именно в том смысле, что он требует введения дискретизации в самый формализм, а не только в расчетную технику.

Читателю надо примириться с этой необходимостью. Для облегчения восприятия я буду по возможности использовать как язык дискретный, так и непрерывный, привычный физикам, для иллюстрации естественности предельного перехода в простых случаях. Однако случаи, где язык непрерывного анализа уже перестает работать, будут специально оговариваться.

1.1 Квантовые состояния. Формализм Дирака

Рассмотрим частицу в трехмерном классическом пространстве. Непрерывность декартова пространства есть абстракция, потому что невозможно зафиксировать разницу в положении частицы, например, в 10^{-100} сантиметров. Кроме того, мы не будем рассматривать частицы, удаленные от нас на расстояние более 10^{100} сантиметров. Поэтому разумно считать, что реальная частица при классическом рассмотрении может находиться лишь в одном из конечного числа состояний, например, она может занимать лишь конечное число пространственных положений в трехмерном пространстве R^3 , или, если мы допускаем только движение частицы вдоль одной из осей координат, она может иметь только одну координату из конечного набора возможных координат x_0, x_1, \dots, x_{N-1} .

Важно отметить, что классические состояния частицы образуют линейное пространство, например, R^3 , но при квантовом рассмотрении мы сначала обязаны произвести дискретизацию этого непрерывного пространства и перейти к конечному множеству возможных состояний.

Занумеруем эти классические состояния натуральными числами: $0, 1, 2, \dots, N - 1$ и будем рассматривать эти положения как ортонормированный базис в некотором комплексном гильбертовом пространстве, изоморфном C^N . Будем записывать вектора этого базиса в виде $|0\rangle, |1\rangle, \dots, |N - 1\rangle$, а произвольный вектор из этого пространства называть квантовым состоянием (или вектором состояния) данной частицы, записывать его в виде

$$|\Psi\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} \lambda_j |j\rangle \quad (1.1)$$

и представлять этот вектор состояния в виде столбца комплексных чисел λ_j , называемых амплитудами данного состояния. Символы $|$ - "бра", и \rangle - "кет" (от английского слова bracket - "скобка") введены Полем Дираком; они очень удобны во всех вопросах, связанных с линейной алгеброй.

Итак, квантовые состояния образуют комплексное евклидово пространство, называемое гильбертовым пространством квантовых состояний, которое всегда имеет конечную размерность.

Амплитуды всегда являются безразмерными величинами. Физическую размерность имеют только базисные состояния $|j\rangle$. Поэтому физическая размерность вектора состояния берется только из базисных состояний.

Сопряженная к вектору-столбцу $|\Psi\rangle$ вектор-строка $(\bar{\lambda}_0 \bar{\lambda}_1 \dots \bar{\lambda}_{N-1})$ обозначается через $\langle\Psi|$ (здесь "кет" и "бра" меняются местами). Тогда скалярное произведение двух векторов состояния $|\Psi\rangle$ и $|\Phi\rangle$ можно записать как матричное произведение $\langle\Psi| \cdot |\Phi\rangle$, что мы будем сокращать до $\langle\Psi|\Phi\rangle$.

Если имеется абстракция - волновая функция $\Psi(x)$ от непрерывной переменной x , ее можно сделать реалистичной, если ввести дискретное множество возможных значений переменной $x = x_0, x_1 = x_0 + dx, x_2 = x_0 + 2dx, \dots, x_N = x_0 + Ndx$, а затем представить приближенно непрерывную функцию $\Psi(x)$ как

$$\Psi(x) \approx \sum_{j=0}^{N-1} \Psi(x_j) d_j(x), \quad (1.2)$$

где $d_j(x)$ - характеристическая функция j -го отрезка $[x_j, x_{j+1}]$, $j = 0, 1, \dots, N-1$. Учитывая скалярное произведение непрерывных функций $\langle f|g\rangle = \int_R \bar{f}g dx$, мы можем пронормировать ортогональные векторы d_j , получив ортонормированный базис $|j\rangle = d_j/\sqrt{dx}$, и определив $\lambda_j = \Psi(x_j)\sqrt{dx}$, придем к представлению нашей функции в виде вектора состояния (1.1).

Эта процедура дискретизации всегда будет иметься в виду по умолчанию. Более того, совершая линейное преобразование \mathcal{D} координаты x , что эквивалентно выбору новых единиц измерения длины, мы можем считать, что отрезок определения волновой функции $[x_0, x_N]$ совпадает с отрезком $[0, 1]$, а $N = 2^n$, так что $x_j = j/N$, $j = 0, 1, \dots, N-1$ и будем записывать приближенное, с точностью $1/N$, значение координаты x в виде последовательности бинарных знаков двоичного разложения $j = \sum_{k=1}^n 2^{n-k} e_k$, то есть в виде бинарной строки $|e_1 e_2 \dots e_n\rangle$, $e_k \in \{0, 1\}$.

Любая такая строка есть базисное состояние системы n кубитов (квантовых битов), поэтому данное дискретное представление волновых функций будем называть кубитовым. В кубитовом представлении у волновой функции не будет никакой физической размерности. Размерным будет только оператор \mathcal{D} перехода к кубитовому представлению от физической непрерывной функции $\Psi(x)$, и базисные состояния $|j\rangle$.

Читателю предлагается потренироваться, оперируя натуральными числами в бинарной записи: перечислять, складывать, умножать и делить. Если верно то, что Природа говорит с нами на языке математики, то основой этого языка являются именно операции с целыми числами в бинарной записи.

1.2 Измерение. Матрица плотности

Измерение частицы, находящейся в квантовом состоянии $|\Psi\rangle$ вида (1.1) - это случайная величина, принимающая значения $|j\rangle$ с вероятностями $p_j = |\lambda_j|^2$, $j = 0, 1, \dots, N - 1$. Эти вероятности называют еще населенностями соответствующих базисных состояний¹. С практической точки зрения измерение - процесс, переводящий сложное состояние $|\Psi\rangle$, в котором частица одновременно находится во всех возможных классических состояниях (в каждом со своей амплитудой) - в ровно одно такое состояние. Выбор этого единственного состояния случаен и подчинен правилу Борна: вероятность есть квадрат модуля амплитуды. Такая случайность является истинной, и ее можно отличить от псевдослучайности, получающейся при выборе из колоды карт одной наугад. Если человек, тасующий колоду, запоминает положение каждой карты (что, в принципе, возможно), а потом начинает их раздавать, то такой выбор лишь кажется случайным. Исход неизвестен только для получившего карты; для раздающего никакого секрета нет.

Квантовая же случайность, подчиняющаяся правилу Борна, непредсказуема. Любая природная случайность так или иначе сводится к некоей истинной случайности, выражающейся через какое-то квантовое состояние $|\Psi\rangle$. Поэтому из всякой вероятности p целесообразно сразу же извлечь квадратный корень - это даст модуль амплитуды, что гораздо глубже характеризует рассматриваемое явление.

Амплитуды можно представить по формуле Эйлера $\lambda_j = |\lambda_j|e^{i\phi_j}$; если модуль амплитуды выражает вероятность обнаружить частицу в состоянии $|j\rangle$ в данный момент, то фаза ϕ_j характеризует стремление волновой функции к собственному изменению во времени. Более точно, скорость этого изменения пропорциональна градиенту фазы по обычному трехмерному классическому пространству.

Если избрать зерно разрешения нашей дискретизации очень мелким, то точки $|j\rangle$ заполняют пространство очень плотно, и мы перейдем к непрерывному представлению вектора состояния, зависящему от обычных координат $r = (x, y, z)$ и от времени t как функции 4 переменных $\Psi(r, t)$. Тогда свободная частица в пустоте, движущаяся в поле с нулевым потенциалом и имеющая импульс $p = (p_x, p_y, p_z)$, будет иметь вектор состояния

$$\Psi(r, t) = C \exp\left(\frac{i}{\hbar}rp - \frac{i}{\hbar}Et\right) \quad (1.3)$$

где rp - скалярное произведение импульса на координату, $E = p^2/2m$ - ее кинетическая энергия. Этот вид состояния был впервые предложен Луи де Бройлем, и называется его именем - волна де Бройля. Мы видим, что градиент фазы пропорционален скорости частицы.

¹Термин *населенность* говорит о глубокой связи квантовой теории с живой природой, прояснить которую и призван наш проект.

Вероятность найти частицу в области $D \subseteq \mathcal{H}$ гильбертова пространства всех квантовых состояний есть интеграл по этой области от квадрата модуля ее состояния: $P(D) = \int_D |\Psi(r, t)|^2 dr$, и полная вероятность, при $D = \mathcal{H}$ есть единица. Но какую бы константу C мы ни выбрали, мы никогда не получим единицу! Это первая нестыковка с непрерывной математикой, говорящая о том, что надо ограничить пространство классических состояний. Однако выражение (1.3), принадлежащее де Бройлю, настолько красиво, что мы будем использовать его и подобные ему, помня, однако, о необходимости урезания формализма.

Если мы захотим измерить частицу, находящуюся в состоянии $|\Psi\rangle$ в другом базисе того же самого пространства C^N , например, в базисе $|\tilde{0}\rangle, |\tilde{1}\rangle, \dots, |N-1\rangle$, это сделать можно, хотя для каждого такого базиса надо иметь свой измерительный прибор. Такое измерение будет случайной величиной, принимающей значения $|\tilde{j}\rangle$ с вероятностями

$$\tilde{p}_j = |\langle \tilde{j} | \Psi \rangle|^2, \quad (1.4)$$

что служит обобщением правила Борна на любой базис измерения.

Измерение еще иногда называют наблюдением, так как оно предполагает наличие того, кто имеет полномочия наблюдать частицу в данном состоянии. Кто может это делать, стандартная квантовая теория не объясняет. Это интересное темное место в ней, которое прикрывается термином "постулат измерения". Мы еще вернемся к его обсуждению.

Правило Борна дает нам единственный путь для понимания связи квантового микроскопического мира с нашим собственным. Мы вынуждены признать, что у одной отдельно взятой частицы нет никакого вектора состояния. Понятие "вектор состояния" не есть характеристика одной частицы; это характеристика целого ансамбля независимых и одинаково "приготовленных" частиц. Например, электрон в атоме водорода имеет определенные состояния только благодаря тому, что таких абсолютно одинаковых атомов - миллиарды миллиардов, и они нам доступны в практически неограниченных количествах, и поэтому мы можем произвести одинаковые эксперименты, набрать статистику, и только после этого делать выводы о том, с каком "состоянии" находится электрон в данном атоме водорода.

Эта принципиально статистическая природа вектора состояния полностью сохраняется и в новой квантовой физике - физике квантового компьютера. Правда, здесь мы сталкиваемся с трудностью. Сложные состояния требуют очень больших, экспоненциально больших ансамблей "одинаково приготовленных" систем, что уже для мало-мальски сложных молекул (как белки) становится проблемой. В сложных системах у нас должен быть какой-то способ перехода от обычных статистических методов к некой форме детерминизма. Этот вопрос мы отложим до третьей главы.

Рассмотрим вопрос о практическом определении амплитуд λ_0, λ_1 в состоянии одного кубита (квантового бита) $|\Psi\rangle = \lambda_0|0\rangle + \lambda_1|1\rangle$. Вынося общий фазовый множитель $e^{i\phi}$ за скобку (он не имеет физического смысла), мы можем считать, что λ_0 - вещественное неотрицательное число, так что нам надо найти три числа: $\lambda_0, |\lambda_1|$ и фазу θ амплитуды $\lambda_1 = |\lambda_1|e^{i\theta}$. Неотрицательные числа $\lambda_0, |\lambda_1|$ мы найдем, измеряя все новые и новые кубиты, приготовленные в состоянии $|\Psi\rangle$, так что относительные

частоты появления нулей и единиц в наших измерениях будут с высокой точностью равны корням из вероятностей получения $|0\rangle$ и $|1\rangle$ при одном измерении. Это - стандартное статистическое определение понятия вероятности.

Как найти θ ? Здесь надо измерять то же самое состояние $|\Psi\rangle$, но в другом базисе, например, в базисе Адамара

$$|\tilde{0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), \quad |\tilde{1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle).$$

Читателю предлагается вычислить вероятности $\tilde{p}_{0,1}$ по формуле (1.4) и показать, что зная эти вероятности, мы можем найти θ .

Описанный прием называется квантовой томографией. Он позволяет, имея большой запас одинаково приготовленных состояний определить их амплитуды².

Пусть H - некоторый оператор в C^N . Сопряженный оператор будем обозначать звездочкой (или крестиком): H^* или H^\dagger . Его матрица получается из матрицы H отражением от главной диагонали и комплексным сопряжением всех элементов. Эрмитовость оператора H означает его самосопряженность $H = H^*$. Тогда имеется система собственных векторов H : $|\phi_0\rangle, |\phi_1\rangle, \dots, |\phi_{N-1}\rangle$, образующая ортонормированный базис C^N . Пусть E_0, E_1, \dots, E_{N-1} - их собственные значения. Тогда наблюдением над частицей, находящейся в состоянии $|\Psi\rangle$, соответствующим H , называется случайная величина, принимающая значения E_j с вероятностями $P_j = |\langle\phi_j|\Psi\rangle|^2$. В этом случае оператор H называют наблюдаемой. Наблюдение фактически совпадает с измерением, разница только в том, что измерение дает одно какое-либо базисное состояние $|\phi_j\rangle$, а наблюдение - его собственное значение.

Унитарным называется оператор U , который сохраняет длины всех векторов в пространстве C^N . Унитарный оператор также как и эрмитов, имеет систему собственных векторов, образующих ортонормированный базис пространства C^N . *Докажите этот факт индукцией по размерности пространства.*

Определяя матричную экспоненту как $\exp(A) = 1 + A + A^2/2! + \dots$ мы формулируем универсальную связь эрмитовых и унитарных операторов, которая задается формулой

$$U = \exp(iH). \quad (1.5)$$

Оператор U , полученный по этой формуле из эрмитова H , унитарен, и любой унитарный оператор может быть получен из эрмитова по этой формуле.

Докажите этот факт, приводя унитарный оператор к диагональной форме; в искомом базисе диагональным окажется и эрмитов оператор. Собственные же значения этих операторов будут связаны точно так же, как и сами операторы: $u_j = \exp(ih_j)$.

Рассмотрим матрицу $|\Psi\rangle\langle\Psi| = \rho_\Psi$, ассоциированную с состоянием $|\Psi\rangle$ вида (1.1). Это матрица плотности Ландау данного состояния. Она эрмитова и ее ранг и след равны единице. *Читателю предлагается доказать это самостоятельно.* Эти три условия на матрицу, в свою очередь, означают, что она имеет вид ρ_Ψ для некоторого

²Различные результаты по квантовой томографии можно найти в работе [4].

вектора $|\Psi\rangle$ вида (1.1). На диагонали матрицы плотности стоят вероятности p_j , а внедиагональные члены, называемые когерентностями, символизируют квантовые свойства данного состояния $|\Psi\rangle$: если оно базисное, у него нет квантовых свойств, оно классическое.

При изменении базиса матрица плотности преобразуется по матричному закону: $\rho_\Psi \rightarrow T\rho_\Psi T^*$, где T - унитарный оператор перехода к новому базису.

В непрерывном случае матрицы плотности - это функция вида $\bar{\Psi}(r_1, t)\Psi(r_2, t)$, где r_1, r_2 - пара возможных положений частицы.

Правило Борна - единственное связующее звено между квантовым формализмом и экспериментами. Мы не можем извлечь никакой информации о состоянии, в котором находится данная частица иначе, чем проведя над ней измерение в каком-либо заранее выбранном базисе. Для определения амплитуд λ_j состояния $|\Psi\rangle$ надо произвести много измерений над многими одинаково приготовленными в этом состоянии частицами. Причем после измерения состояние частицы необратимо меняется, так что мы, вообще говоря, не можем использовать одну и ту же частицу.

Может показаться, что если мы измеряем частицу в каком-либо базисе, то после повторного измерения мы получим тот же самый результат, так как результат проекции состояния на выбранный заранее базисный вектор $|j\rangle$ имеет вид $|j\rangle\langle j|$ (докажите!) и его квадрат равен все той же проекции. Но это - грубая ошибка, характерная для копенгагенской физики, в которой формализм существует отдельно от реальности. В действительности измерение не может существовать отдельно от так называемой унитарной динамики, (см. ниже, решение уравнение Шредингера) как и унитарная динамика - без измерения. Измеряя, например, координату, мы неизбежно придадим частице такой импульс, что она улетит за пределы нашей лаборатории, так что повторно измерить координату нам придется уже у другой частицы; это обсуждается ниже.

Таким образом, состояние $|\Psi\rangle$ - не просто является характеристикой "фабрики", готовящей частицы именно в этом состоянии. Состояние одной частицы является еще и неповторимой характеристикой данной частицы в том смысле, что если нам захочется хоть что-либо узнать именно о ней, а не о всей "фабрике", то после измерения она полностью утратит свое состояние и мы никогда не сможем восстановить это состояние для нее персонально, а должны будем взять другую частицу, приготовленную на данной "фабрике". Квантовый плюрализм, недетерминированность, лежащая в основе статистического характера квантового состояния, удивительным образом сочетается с хрупкостью индивидуальной траектории частицы, которую мы можем узнать только после проведенной последовательности измерений над ней.

1.3 Композитные системы.

Пусть у нас имеются две частицы, первая и вторая, причем у первой классические состояния $|0_1\rangle, |1_1\rangle, \dots, |(N-1)_1\rangle$, а у второй $|0_2\rangle, |1_2\rangle, \dots, |(M-1)_2\rangle$. Тогда у системы, состоящей из этих двух частиц классические состояния будут иметь вид $|j_1 k_2\rangle$, где $j = 0, 1, \dots, N-1$, $k = 0, 1, \dots, M-1$. Будем считать, что каждое такое состояние есть по определению тензорное произведение $|j_1\rangle \otimes |k_2\rangle$ или, опуская знак \otimes , просто

$|j_1\rangle|k_2\rangle$ двух базисных состояний этих частиц, или даже просто $|j_1k_2\rangle$. Если C^N , C^M - гильбертовы пространства состояний первой и второй частицы, построенные как линейные оболочки их базисных векторов, по аналогии мы можем взять линейную оболочку состояний $|j_1\rangle|k_2\rangle$, изоморфную C^{NM} , и назвать ее тензорным произведением пространств состояний каждой из частиц: $C^{NM} = C^N \otimes C^M$.

Типичное состояние $|\Psi\rangle \in C^N C^M$ имеет вид

$$|\Psi\rangle = \sum_{j=0,\dots,N-1,k=0,\dots,M-1} \lambda_{jk} |j_1k_2\rangle \quad (1.6)$$

В дальнейшем будем опускать нижние индексы у j и k , так как состояния частиц различаются просто по их порядку - на первом месте всегда первая частица, на втором - вторая.

Тензорное произведение двух состояний $|\Psi\rangle$ и $|\Phi\rangle$ из C^N и C^M соответственно определяется естественным образом, с априорным предположением о дистрибутивности знака тензорного умножения \otimes относительно сложения:

$$|\Psi\rangle \otimes |\Phi\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} \lambda_j |j\rangle \otimes \sum_{k=0}^{M-1} \mu_k |k\rangle = \sum_{j=0,\dots,N-1;k=0,\dots,M-1} \lambda_j \mu_k |jk\rangle \quad (1.7)$$

Сразу возникающий вопрос о том, исчерпываются ли все элементы тензорного произведения пространств $C^N \otimes C^M$ состояниями вида (1.7) решается отрицательно: читателю предоставляется доказать, что состояние

$$|EPR\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) \quad (1.8)$$

не представимо в виде тензорного произведения, то есть не имеет вида (1.7). Состояния вида (1.7) называются не запутанными, все прочие - запутанными. Таким образом, состояние $|EPR\rangle$ вида (1.8) - запутанное.

Выясните самостоятельно, каких состояний в общем случае больше: запутанных или незапутанных и насколько больше.

В запутанном состоянии невозможно выделить отдельно состояние первой и второй частиц: они не имеют отдельных друг от друга состояний, у них одно, общее состояние. При этом частицы могут быть пространственно удалены друг от друга, например, на сотню километров. Все равно, запутанность между ними может иметь место и эту запутанность можно отделить от классической корреляции специальным экспериментом, который мы подробно разберем в третьей главе.

Случай двух отдельных частиц, разобранный нами, непосредственно и естественно обобщается на n частиц. Тензорное произведение пространств $C^{N_1} \otimes C^{N_2} \otimes \dots \otimes C^{N_n}$, а также состояний и операторов будет обладать свойством ассоциативности. Если мы будем снабжать компоненты тензорных произведений нижним индексом, который однозначно характеризует, к какой частице относится данный сомножитель произведения, то тензорное произведение будет также коммутативно. Однако обычно нижний индекс опускают, заменяя его местом в записи по порядку, например, запись спинового состояния двух электронов $|01\rangle - |10\rangle$ говорит о том, что первая компонента

относится к первому, а вторая - ко второму электрону; в этом случае коммутативности, разумеется, не будет.

Композитная система не обязательно означает несколько отдельных реальных частиц. В одной реальной частице можно выделить разные параметры, так что она станет композитной системой. Например, у одного электрона есть пространственная координата r и спиновое состояние $s \in \{0, 1\}$ - для спиновой компоненты 0 трактуется как спин вверх, 1 - как спин вниз. Тогда один электрон будет рассматриваться как система 2 виртуальных частиц - координаты электрона и его спина, и к такой композитной системе будет применима вся техника тензорных произведений. Другой пример: координата x и координата y у одной и той же частицы.

Дираковские обозначения позволяют определить формальные правила обращения с выражениями, которые являются произведением векторов вида $|\psi\rangle$ и линейных функционалов вида $\langle\phi|$. Сначала заметим, что вектор-строка $\langle\phi|$ может рассматриваться как линейный функционал вида $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{C}$, который действует на векторы $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ по естественному правилу

$$|\psi\rangle \rightarrow \langle\phi|\psi\rangle.$$

Определим для произвольного линейного пространства \mathcal{H} сопряженное ему пространство \mathcal{H}^* как пространство линейных операторов вида $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{C}$. Такие операторы называют линейными функционалами. Если \mathcal{H} - пространство функций на прямой с ограниченным носителем (множеством аргументов, где функция не нулевая), то естественно определить для произвольной функции $g \in \mathcal{H}$ линейный функционал \tilde{g} , который действует на функции $f \in \mathcal{H}$ по правилу $\tilde{g} : f \rightarrow \int_R \tilde{g} f dx$. Тогда мы получим вложение $\mathcal{H} \subset \mathcal{H}^*$. Однако такое вложение не является изоморфизмом, так как, например, функционал $\delta_{x_0} : f \rightarrow f(x_0)$ не может быть представлен как \tilde{g} ни для какой функции $g \in \mathcal{H}$.

Это происходит, опять таки, из-за неадекватности математического аппарата бесконечно малых реальной природе. Если пространство \mathcal{H} конечномерное, изоморфное \mathcal{C}^N , мы будем иметь изоморфизм \mathcal{H} и \mathcal{H}^* , так как теперь у любого линейного функционала имеется матрица, и эта есть матрица - строка, то есть $\langle\psi|$, и все функционалы имеют вид $\langle\phi| \rightarrow \langle\psi|\phi\rangle$ для каких-то $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$.

Если $|i\rangle, |j\rangle$ - векторы из ортонормированного базиса пространства \mathcal{H} , и $A : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ - линейный оператор, то элемент $a_{i,j}$ матрицы этого оператора в данном базисе находится по формуле $\langle i|A|j\rangle$, и мы можем записать матрицу A в виде $A = \sum_{i,j=0,1,\dots,N-1} \langle i|A|j\rangle = \sum_{i,j=0,1,\dots,N-1} a_{i,j}|i\rangle\langle j|$.

Таким образом, дираковские скобки позволяют записывать числа вида $\langle\phi|\psi\rangle$ и матрицы вида $|\psi\rangle\langle\phi|$. Однако если основное пространство \mathcal{H} является тензорным произведением $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_f$ различных пространств, соответствующих разбиению физического множества частиц на подмножества, то из дираковских скобок можно сконструировать более сложные объекты, чем числа и матрицы. Эти объекты называются тензорами.

Рассмотрим формальное выражение вида $T = T_1 T_2 \dots T_k$, где для всякого $q = 1, 2, \dots, k$ сомножитель T_q есть либо $|\psi_i\rangle$, либо $\langle\psi_i|$, для $|\psi_i\rangle \in \mathcal{H}_i$ для какого-либо

$i = 1, 2, \dots, s$, причем для любого $i = 1, 2, \dots, s$ в T может входить не более двух выражений с нижним индексом i , а если их ровно 2, то одно из них имеет вид $|\psi_i\rangle$, а другое $\langle\phi_i|$. Такое выражение T является тензором. Этот тензор мы можем привести к более простому виду, если примем, что выражения T_j , относящиеся к разным подпространствам \mathcal{H}_q , коммутируют между собой, а выражение вида $\langle\psi_i|\phi_i\rangle$ является просто числом - скалярным произведением двух векторов из одного подпространства \mathcal{H}_i .

Пользуясь данным правилом, мы можем привести тензор T к виду

$$a|\psi_{i_1}\rangle|\psi_{i_2}\rangle\dots|\psi_{i_r}\rangle\langle\phi_{j_1}|\langle\phi_{j_2}|\dots\langle\phi_{j_p}|, \quad a \in C,$$

которое можно трактовать как суперпозицию операторов: проекции пространства $\mathcal{H}_{j_1} \otimes \mathcal{H}_{j_2} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_{j_p}$ на вектор $|\phi_{j_1}\rangle|\phi_{j_2}\rangle\dots|\phi_{j_p}\rangle$ и последующего отображения данного вектора в вектор $|\psi_{i_1}\rangle|\psi_{i_2}\rangle\dots|\psi_{i_r}\rangle$ пространства $\mathcal{H}_{i_1} \otimes \mathcal{H}_{i_2} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_{i_r}$.

Например, проекция пространства \mathcal{H} на вектор $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ суть оператор $|\psi\rangle\langle\psi|$. Перемножение тензоров надо производить с учетом оговоренного выше ограничения на число вхождений векторов и функционалов, относящихся к одному пространству. Мы не будем развивать теорию тензоров, так как нам они понадобятся здесь только при частичных измерениях.

Пользуясь понятием тензора, выведите правило нахождения скалярного произведения двух состояний композитной системы: $|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle$ и $|\phi_1\rangle|\phi_2\rangle$. Ответ: оно равно $\langle\psi_1|\phi_1\rangle\langle\psi_2|\phi_2\rangle$.

1.3.1 Частичные измерения. Смешанные состояния

Для многочастичных систем возникает новый вопрос о частичном измерении. Если у нас имеется две частицы, например, два кубита, мы можем измерить только один из них, оставив второй не затронутым. В каком состоянии тогда окажется незатронутый измерением кубит? Для решения этого вопроса обратимся к алгебраической форме результата измерения.

Сначала рассмотрим случай одного кубита и определенного выше измерения его состояния $|\Psi\rangle$ как случайной величины. Из правила матричного умножения сразу вытекает равенство

$$p_j = \langle j|\rho_\Psi|j\rangle$$

След матрицы плотности будет находиться по формуле $tr(\rho_\Psi) = \sum_j \langle j|\rho_\Psi|j\rangle$ и для одного кубита эта сумма будет равна 1. Мы видим, что конфигурация вида $\langle a|b\rangle$ всегда дает число, причем если a и b - векторы из ортонормированного базиса состояний одного кубита, это число равно δ_{ab} - символ Кронекера, равный нулю при $a \neq b$ и единице при $a = b$. Это наблюдение позволяет обобщить правило работы с дираковскими символами на тензорные произведения, если мы примем, что в этом случае a и b должны относиться к одной и той же реальной частице.

Рассмотрим матрицу плотности композитной системы вида

$$\rho = \sum_{j', j'', k', k''} \rho_{j', k', j'', k''} |j', j''\rangle \langle k', k''| \quad (1.9)$$

Допустим, например, что мы измеряем первый кубит и получили значение $|j\rangle$. В каком тогда состоянии будет находиться второй кубит? Нам надо получить матрицу плотности ρ_2 второго кубита так же, как мы получали вероятность в случае, когда у нас был только один кубит: обкладывая исходную матрицу плотности слева и справа. Только теперь обкладывать надо только состоянием первого кубита, равным $|j\rangle$. Принимая во внимание ортонормированность всех состояний, относящихся к одной и той же подсистеме, мы имеем:

$$\rho_2^j = \sum_{j', j'' k', k''} \rho_{j', k', j'', k''} \langle j | j' \rangle |k'\rangle \langle k''| \langle j'' | j \rangle = \delta_{jj'} \delta_{j''j} |k'\rangle \langle k''| = \sum_{k', k''} \rho_{j, k', j, k''} |k'\rangle \langle k''|.$$

Здесь буквы j относятся к первой подсистеме, k - ко второй, так что в середине выражения стоит элемент матрицы плотности тензорного произведения состояний: $|j'\rangle |k'\rangle \langle k''| \langle j''|$, соответствующий паре базисных состояний: $|j'k'\rangle$ и $|j''k''\rangle$. Заметим, что след такой матрицы не обязан быть единичным, так как мы априори выделили результат измерения первого кубита $|j\rangle$.

А теперь, по тому же способу, вычислим результат измерения второго кубита в композитной системе с матрицей плотности (1.9), но уже при условии, что второй кубит нам не доступен (например, он куда-то улетел). Тогда нам надо будет просуммировать результаты всех обкладок, но уже состояниями $|k\rangle$, получая результат в виде:

$$\rho_1 = \text{tr}_2(\rho) = \sum_k \langle k | \rho | k \rangle \quad (1.10)$$

Если $\rho = \sum_{j', k', j'', k''} \rho_{j', k', j'', k''} |j'k'\rangle \langle k''j''|$, можно переписать (1.10) в виде

$$\rho_1 = \sum_k \sum_{j', k', j'', k''} \rho_{j', k', j'', k''} \langle k | j'k'\rangle \langle k''j'' | k \rangle = \sum_{j', j''} A_{j'j''} |j'\rangle \langle j''|, \quad A_{j'j''} = \sum_k \rho_{j'k, j''k}. \quad (1.11)$$

Формула (1.11) дает простое мнемоническое правило для определения результата частичного измерения: для получения элемента $\rho_1(j', j'')$ матрицы плотности первого кубита надо просуммировать все элементы матрицы плотности обоих кубитов с номерами, полученными всевозможными одинаковыми дополнениями пары j', j'' до пары индексов двух-кубитной матрицы плотности.

Однако матрица ρ_1 , полученная по формуле (1.11), вообще говоря, уже не будет иметь вида $|\psi\rangle \langle \psi|$ ни для какого состояния $|\psi\rangle$ первого кубита. Что убедиться в этом, рассмотрим пример: $|\Psi\rangle = |EPR\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$.

Матрица плотности состояния $|EPR\rangle$ суть

$$\begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix} \quad (1.12)$$

Читателю предлагается убедиться в том, что измерение второго кубита в этом состоянии дает матрицу

$$\begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix} \quad (1.13)$$

Матрица (1.13) имеет ранг 2, и потому она не может быть матрицей плотности никакого квантового вектора состояния. Мы, таким образом, приходим к необходимости расширить понятие состояния. Вектора-состояния мы будем называть чистыми, а "состояния", которые описываются матрицами, сходными с (1.13), мы будем называть смешанными.

Итак, смешанное состояние есть результат измерения одной части какого-либо вектора-состояния композитной системы. Допустим, вектор-состояние композитной двухкубитной системы имеет вид (1.6) с $N = M = 2$:

$$|\Psi\rangle = \lambda_{00}|00\rangle + \lambda_{01}|01\rangle + \lambda_{10}|10\rangle + \lambda_{11}|11\rangle.$$

Если мы измеряем только второй кубит, то результат такого измерения должен быть либо $|0\rangle$, либо $|1\rangle$. С какой вероятностью $p_2(0)$ получится $|0\rangle$ для второго кубита? Эта вероятность, по логике измерения, должна быть равна $p_2(0) = \sum_j |\lambda_{j0}|^2$. Аналогично, вероятность получить во втором кубите $|1\rangle$ будет $p_2(1) = \sum_j |\lambda_{j1}|^2$. Суммарная вероятность будет, конечно, единичной. Если получится во втором кубите $|0\rangle$, то в первом, незатронутом измерением непосредственно, должно получиться состояние $|\psi_0\rangle = a_0 \sum_j \lambda_{j0}|j\rangle$, где нормировочный коэффициент $a_0 = (\sum_j |\lambda_{j0}|^2)^{-1/2}$. Аналогично, если во втором кубите получилось состояние $|1\rangle$, то первый кубит окажется в состоянии $|\psi_1\rangle = a_1 \sum_j \lambda_{j1}|j\rangle$, где нормировочный коэффициент $a_1 = (\sum_j |\lambda_{j1}|^2)^{-1/2}$.

Поскольку в общем случае $|\psi_1\rangle$ не совпадает с $|\psi_0\rangle$, мы не можем суммировать эти состояния как вектора в гильбертовых пространствах. Но можно суммировать их матрицы плотности, вводя для каждой из них свой весовой коэффициент: $p_2(0)$ или $p_2(1)$. в итоге получим матрицу "плотности" вида

$$\rho_1 = p_2(0)|\psi_0\rangle\langle\psi_0| + p_2(1)|\psi_1\rangle\langle\psi_1|. \quad (1.14)$$

Читателю предлагается убедиться, что это в точности совпадает с матрицей (1.11).

Таким образом, и в общем случае, когда система разделена на две подсистемы, матрица "плотности" результата измерения второй подсистемы, найденная по формуле (1.11), будет иметь вид

$$\rho_1 = \sum_k p_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k|, \quad (1.15)$$

где $|\psi_k\rangle$ - вектора состояния первой подсистемы, полученные в результате измерения второй подсистемы при условии, что результат этого измерения для второй подсистемы оказался равным $|k\rangle$.

Формула (1.15) задает общий вид смешанного состояния, которое мы будем отождествлять с матрицей плотности ρ_1 . Однако по заданной матрице плотности ρ_1 разложение (1.15) определено не однозначно. Дело в том, что система, находящаяся в

чистом состоянии $|\Psi\rangle$ может также с вероятностью $|\langle\Psi|\Phi\rangle|^2$ находиться также и в другом чистом состоянии $|\Phi\rangle$.

Смешанное состояние означает, что система находится в каком-то чистом состоянии, но мы не знаем, в каком именно. Поэтому если все чистые состояния $|\psi_k\rangle$ в (1.15) взаимно ортогональны, между ними нет когерентности, и в этом случае данное разложение определено однозначно.

Возникает естественный вопрос: как физически отличить ЭПР- пару $\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$ от смеси вида $\frac{1}{2}|00\rangle\langle 00| + \frac{1}{2}|11\rangle\langle 11|$? Измерения в стандартном базисе, как мы видели, не позволяют этого сделать. Но если изменить базисы измерения, это скажется на диагонали матрицы плотности, и мы сможем различить ЭПР- пару от смеси. Читателю предлагается рассмотреть все детали самостоятельно.

В каком случае частичное измерение одного кубита в каком-либо чистом состоянии двухкубитной системы дает в результате не смешанное, а чистое состояние? *Докажите, что это происходит в том и только в том случае, когда исходное состояние является незапутанным.*

Пусть $U_1 : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_1$, $U_2 : \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_2$ - два оператора в разных гильбертовых пространствах. Их тензорное произведение $U_1 \otimes U_2$ действует на тензорное произведение пространств: $U_1 \otimes U_2 : \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Определяется эта функция естественным образом, как линейное продолжение действия на базисных состояниях: $U_1 \otimes U_2 : |jk\rangle \rightarrow U_1|j\rangle \otimes U_2|j\rangle$.

Вид матрицы тензорного произведения для двухкубитного пространства выглядит так:

$$U_1 = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \end{pmatrix}, \quad U_1 \otimes U_2 = \begin{pmatrix} u_{11}U_2 & u_{12}U_2 \\ u_{21}U_2 & u_{22}U_2 \end{pmatrix} \quad (1.16)$$

Докажите это, используя стандартные обозначения базисных векторов в виде столбцов, и переходя к дираковским обозначениям. Используйте естественное упорядочение на базисных вектора из тензорного произведения: для одного кубита $|0\rangle$, $|1\rangle$, для двух кубитов $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$, $|11\rangle$. На пространства большей размерности обобщение очевидно.

Пусть M - множество кубитов рассматриваемой системы, состоящее из n кубитов, а $|\Psi\rangle$ - какое-либо квантовое состояние этих кубитов. Оно называется незапутанным, если существует такое разбиение $M = M_1 \cup M_2$ на два непересекающихся непустых множества и состояния $|\Psi_1\rangle$, $|\Psi_2\rangle$ на этих множествах, такие что $|\Psi\rangle = |\Psi_1\rangle \otimes |\Psi_2\rangle$. В противном случае состояние $|\Psi\rangle$ называется запутанным. Сложностью состояния $|\Psi\rangle$ на множестве M называется размер в кубитах носителя его максимального запутанного тензорного делителя. Иначе говоря, сложность состояния есть максимальное из натуральных чисел s , таких что существует подмножество $M_1 \subseteq M$ и состояния $|\Psi_1\rangle$, $|\Psi_2\rangle$ на M_1 и $M - M_1$ соответственно, такие что $|\Psi\rangle = |\Psi_1\rangle \otimes |\Psi_2\rangle$, M_1 содержит s элементов и $|\Psi_1\rangle$ является запутанным. Такое состояние $|\Psi_1\rangle$ называется квантовым ядром состояния $|\Psi\rangle$, а соответствующее ему множество M_1 - носителем ядра.

Ядер может быть несколько, так как максимальное число s из определения может соответствовать разным наборам M_1 кубитов. Естественно, данное определение может зависеть от очень малых амплитуд, так что сложное состояние может оказаться очень близко к простому. Однако если мы рассматриваем только состояния,

амплитуды λ_j которых имеют "зернистый" вид (3.21), эта близость будет ограничена величиной зерна ϵ . Из дальнейшего будет ясно, что устремлять ϵ к нулю для сложных систем нельзя, и потому сложность определена таким образом корректно. Мы будем обозначать сложность состояния $|\Psi\rangle$ через $C(\Psi)$. Определенная сложность зависит от базиса, в котором мы рассматриваем состояния.

1.3.2 Теорема Шмидта

Запутанное состояние в композитной системе, состоящей из двух компонент S_1 и S_2 , имеет вид (1.6) и непредставимо в виде (1.7). Его хранение в памяти компьютера весьма затратно: надо хранить матрицу λ_{jk} в отличие от состояния (1.7), где надо хранить в памяти всего лишь два вектора. Оказывается, есть возможность более экономичного представления запутанности, однако это представление годится лишь для данного фиксированного состояния, так как это требует изменения базиса в обоих пространствах - специально для данного фиксированного $|\Psi\rangle \in C^N \otimes C^M$.

А именно, имеет место следующая

Теорема (Шмидт). *Для любого состояния $|\Psi\rangle$ вида (1.6) композитной системы существуют новые ортонормированные базисы $|J_0\rangle, |J_1\rangle, \dots, |J_{N-1}\rangle$; $|K_0\rangle, |K_1\rangle, \dots, |K_{M-1}\rangle$ в пространствах - компонентах C^N , C^M , такие что*

$$|\Psi\rangle = \sum_{q=0}^S \alpha_q |J_q\rangle |K_q\rangle \quad (1.17)$$

где $S = \min(N - 1, M - 1)$, а α_q - неотрицательные вещественные числа, такие что $\sum_{q=0}^S |\alpha_q|^2 = 1$.

Доказательство этой теоремы проводится индукцией по $\max(N, M)$. Пусть $|\Psi\rangle = |\Psi_1\rangle |\Psi_2\rangle$ - незапутанное состояние. Тогда теорема выполнена очевидным образом. Разберем случай, когда $|\Psi\rangle$ - запутанное состояние.

Множество незапутанных состояний \mathcal{N} - замкнуто как подмножество евклидова пространства. Действительно, если $|\psi_1^n\rangle |\psi_2^n\rangle \rightarrow |\Psi\rangle$, то последовательности $|\psi_1^n\rangle$ и $|\psi_2^n\rangle$ имеют пределы $|\psi_1\rangle$ и $|\psi_2\rangle$ соответственно, и мы будем иметь $|\psi_1^n\rangle |\psi_2^n\rangle \rightarrow |\psi_1\rangle |\psi_2\rangle$ при $n \rightarrow \infty$.

Значит, существует точка в \mathcal{N} , расстояние от которой до конца вектора $|\Psi\rangle$ минимально, пусть это конец ненормированного вектора $|\Phi_0\rangle$: $|\Psi\rangle = |\Phi_0\rangle + |A\rangle$, так что $\|A\|$ есть расстояние от $|\Psi\rangle$ до \mathcal{N} . Поскольку $|\Phi_0\rangle \in \mathcal{N}$, мы имеем $|\Phi_0\rangle = |J_0\rangle |K_0\rangle$ для каких-то векторов $|J_0\rangle \in C^N$, $|K_0\rangle \in C^M$; эти векторы мы и возьмем в качестве начальных векторов в разложении (1.17). Нам надо доказать, что в разложении $|A\rangle$ не присутствуют ни один из этих векторов, тогда будет сделан шаг индукции, так как с $|A\rangle$ мы потом поступим так же, как и с $|\Psi\rangle$. Если бы в разложении $|A\rangle$ присутствовал один из векторов $|J_0\rangle$, $|K_0\rangle$, мы бы получили противоречие с минимальностью векто-

ра $|A\rangle$, потому что можно было бы "отщепить" от него еще немного, что невозможно в силу выбора $|A\rangle$. Детали предоставляются читателю.

Теорема Шмидта дает численную характеристику меры запутанности композитного состояния $|\Psi\rangle \in C^N \otimes C^M$ как энтропии вероятностного распределения $|\alpha_q|^2$ (определение энтропии дано в Приложении).

У этой Теоремы есть и другое полезное следствие - существование так называемого *SVD*- разложения произвольной матрицы A в виде $SAV = D$, где S , V - унитарные матрицы, а D - диагональная. Это разложение обобщает теорему о приведении к диагональному виду эрмитовых и унитарных матриц; только здесь матрица A - произвольная, даже не обязательно квадратная, а S и V никак не связаны, могут даже иметь разные размерности. Это следствие сразу получается, если представить матрицу A как набор коэффициентов λ_{jk} из разложения (1.6) состояния композитной системы; тогда S и V будут матрицами перехода к базисам $|J_i\rangle$ и $|K_j\rangle$ в условии Теоремы.

Что если в нашем распоряжении есть только одна из двух компонент композитной системы, например, S_1 , а другая S_2 находится вне доступа? В этом случае у нас имеется, фактически, только матрица плотности ρ_1 первой подсистемы, так что мы даже не знаем о существовании второй компоненты. Можно ли в этом случае "восстановить" чистое состояние $|\Psi\rangle$, такое что $\rho_1 = tr_2(|\Psi\rangle\langle\Psi|)$?

Да, это можно сделать, и очень просто. Пусть C^N - пространство квантовых состояний подсистемы S_1 . Возьмем еще один экземпляр S_1 , который обозначим через S'_1 , и соответствующее ему пространство квантовых состояний C^N , вектора которого будем обозначать теми же буквами, что и для S_1 , что не вызовет недоразумений, так как мы в тензорном произведении всегда пишем состояний S_1 первым, а S'_1 вторым. Взяв собственные числа A_i матрицы ρ_1 и соответствующие им собственные вектора $|\phi_i\rangle$, положим $\alpha_i = \sqrt{A_i}$, и определим $|\Psi\rangle \in C^N \otimes C^N$ как $\sum_{i=0}^{N-1} \alpha_i |\phi_i\rangle |\phi_i\rangle$. Тогда из правила нахождения относительной матрицы плотности (1.11) мы получаем $\rho_1 = tr_2(|\Psi\rangle\langle\Psi|)$.

Из этого наблюдения следует и способ нахождения матриц S и V в *SVD* - разложении. Надо превратить матрицу A в состояние $|\Psi\rangle$ композитной системы, взяв в разложении (1.6) ее коэффициенты, затем найти ее матрицу плотности $\rho_\Psi = |\Psi\rangle\langle\Psi|$, относительные матрицы плотности $\rho_2 = tr_1(\rho_\Psi)$ и $\rho_1 = tr_2(\rho_\Psi)$, у которых будут одинаковые наборы собственных значений, совпадающие с числами $|\alpha_i|^2$ в разложении Шмидта для $|\Psi\rangle$, после чего искать разложение Шмидта состояния $|\Psi\rangle$, выбирая в качестве $|J_i\rangle$, $|K_i\rangle$ собственные вектора операторов ρ_1 и ρ_2 .

1.3.3 Парадокс квантовой энтропии

Что такое порядок в сложной системе? Порядок - это альтернатива хаосу. Если система классическая, и $\bar{p} = (p_0, p_1, \dots, p_{N-1})$ - список вероятностей нахождения этой системы в классических состояниях x_0, x_1, \dots, x_{N-1} , то степень хаоса есть энтропия

Шеннона

$$Sh(\bar{p}) = - \sum_{i=0}^{N-1} p_i \ln(p_i),$$

(см. Приложение). При добавлении в систему новых элементов классическая энтропия $Sh(\bar{p})$ может только увеличиться, следовательно, порядок возрастает не может.

Как обобщить энтропию Шеннона на случай квантовой системы? Естественным обобщением является энтропия фон Неймана

$$N(\rho) = -tr(\rho \ln(\rho)),$$

где ρ - матрица плотности, которая в квантовом случае заменяет распределение вероятностей \bar{p} .

Рассмотрим состояние двух кубитов $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$. Его энтропия равна нулю. Действительно, энтропия вообще любого чистого состояния равна нулю. *Докажите это, приведя матрицу ρ к диагональному виду и показав, что энтропия состояния вида $|j\rangle\langle j|$, где $|j\rangle$ - один из базисных векторов, равна нулю.*

Предположим, что мы удалили второй кубит на большое расстояние, так что в наших руках остался только первый кубит. Тогда этот кубит будет находиться в смешанном состоянии $\rho_1 = tr_2(|\Psi\rangle\langle\Psi|)$, и $N(\rho_1) = \ln(2) > 0$. То есть при добавлении второго кубита энтропия квантового состояния уменьшится.

Эффект возрастания порядка при расширении системы - контринтуитивный, чисто квантовый эффект. Он происходит из-за наличия запутанности, которая связывает различные физические части системы многих тел. Этот вопрос мы будем еще обсуждать в третьей главе.

1.4 Физические величины как наблюдаемые

Любой физической величине, кроме времени, соответствует в квантовой теории определенная наблюдаемая. При этом собственные значения этой наблюдаемой будут возможными значениями данной величины, а собственное состояние, в котором она имеет данное значение, есть состояние, в котором данная величина определена однозначно - именно данным значением.

Рассмотрим три примера: наблюдение координаты, импульса и энергии.

1.4.1 Наблюдение координаты

Рассмотрим только случай одномерной частицы, обобщение на трехмерный случай не представляет особых затруднений. Наблюдаемая будет оператором умножения волновой функции на ее аргумент - координату, что в непрерывном представлении имеет вид: $x : f(x) \rightarrow xf(x)$. Вспоминая переход (1.2) от непрерывного представления вектора состояния к дискретному, можно непосредственно проверить, что в кубитовом представлении матрица оператора координаты - диагональная, и по

диагонали стоит арифметическая прогрессия $0, 1/N, \dots, (N-1)/N$. Эту матрицу мы обозначим через x_{discr} . Таким образом, собственными состояниями данного оператора будут базисные состояния n -кубитной системы, которые мы договорились обозначать бинарными разложениями натуральных чисел $|0\rangle, |1\rangle, \dots, |N-1\rangle$, и будем при записи отождествлять их с самими этими числами. Собственными значениями их будут сами числа $0, 1/N, \dots, (N-1)/N$. Эти базисные состояния по определению составляют ортонормированный базис пространства C^N системы n кубитов.

В непрерывной форме им соответствуют так называемые дельта-функции Дирака δ_λ , которые определяются как линейные функционалы вида $\delta_\lambda : f \rightarrow f(\lambda)$. Эти функционалы не являются обычными функциями, их геометрическое представление - бесконечно высокие иглы, растущие из точек λ . Они не могут быть нормированы, их нельзя умножать друг на друга. Это еще один пример того, как математический анализ вступает в противоречие с квантовой физикой. Противоречие возникает из-за непрерывного характера переменной x ; как только мы проведем дискретизацию, это противоречие исчезнет, а "иглы" превратятся в высокие ступеньки $\delta_j(x)$ конечной величины $1/\sqrt{dx}$ где dx - выбранное зерно пространственного разрешения.

Элементом дискретного пространства C^N будут вектора состояния $|\Psi\rangle$ вида (1.1), а сопряженное пространство линейных функционалов будет состоять из строк вида $\langle\Psi|$, действующих на состояния естественным образом: $\langle\Psi| : |\Phi\rangle \rightarrow \langle\Psi|\Phi\rangle$, что делает пространство состояний C^N изоморфным сопряженному (что нарушается в случае непрерывного формализма).

Дискретизация снимает все противоречия физики с математическим аппаратом, и потому мы всегда будем вести речь о конечномерных пространствах, даже используя интегрирование и дифференцирование как приближенные приемы вычисления; такие приемы мы всегда будем контролировать на абсолютно необходимую возможность дискретизации.

1.4.2 Квантовый оператор Фурье и наблюдение импульса

Квантовый оператор импульса в одномерном случае имеет в непрерывном формализме вид

$$p : f(x) \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla f \quad (1.18)$$

Его собственные функции есть комплексные экспоненты $\exp(ipx/\hbar)$, с собственными значениями p .

Докажите, что этот оператор эрмитов, используя эквивалентное определение эрмитовости матрицы A : $\langle i|A|j\rangle = \langle j|\bar{A}|i\rangle$ (черта обозначает комплексное сопряжение); примените формулу вычисления скалярного произведения через интеграл.

Для построения корректной дискретной формы оператора импульса следует воспользоваться преобразованием Фурье,

$$f(x) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_R \exp(-ipx/\hbar) f(x) dx = \phi(p) \quad (1.19)$$

переводящим функции (1.18) в дельта-функции Дирака, а также обратным преобразованием Фурье

$$\phi(p) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_R \exp(ipx/\hbar) \phi(p) dp = f(x) \quad (1.20)$$

делающим обратный переход.

Читателю предлагается убедиться в этом, приняв упрощающее вычисление равенство $\hbar = 1$, которое достигается переходом к подходящей системе физических единиц. Подставьте в формулу (1.19) собственную функцию оператора импульса $f_{p_0}(x) = e^{ip_0x/\hbar}$, и произведите интегрирование по конечному интервалу вида $(-A, A)$. Интеграл берется в конечной форме, и результат при $A \rightarrow +\infty$ будет все больше и больше напоминать иглу, опирающуюся на точку $p = p_0$, и уходящую неограниченно в бесконечность. Таким образом, собственная функция оператора импульса переведется в собственную функцию оператора координаты; название аргументов x или p не играет никакой роли. Прделайте то же самое с обратным преобразованием. Но при интегрировании по всей прямой получится расходимость; более того, ни дельта-функцию, ни комплексную осцилляцию $\exp(ipx)$ нельзя про- нормировать. Все поправляется только переходом к дискретному представлению.

Дискретная форма преобразования Фурье и обратного к нему представляет собой операторы, действующие на базисные состояния n - кубитной системы так:

$$\begin{aligned} QFT : |c\rangle &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{a=0}^{N-1} \exp(-2\pi iac/N) |a\rangle \\ QFT^{-1} : |a\rangle &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{c=0}^{N-1} \exp(2\pi iac/N) |c\rangle \end{aligned} \quad (1.21)$$

Оба эти взаимно обратные операторы (доказать!) при линейном продолжении на все пространство квантовых состояний C^N дадут унитарные операторы - Фурье и обратного к нему.

Для приложений удобно считать, что для переменной a число a/\sqrt{N} является координатой, принадлежащей отрезку $[0, \sqrt{N}]$ (постоянную Планка в надлежащей системе единиц можно считать единицей). Тогда c/\sqrt{N} должна быть связана с импульсом. Естественно допустить, что импульс принадлежит отрезку $[-\sqrt{N}/2, \sqrt{N}/2]$, поскольку частица, расположенная на отрезке $[0, \sqrt{N}]$, может двигаться в обе стороны. Поэтому импульс должен быть равен $\sqrt{N}(c/N - 1/2)$.

Соответственно, дискретная форма оператора импульса будет N - мерным эрмитовым оператором $p_{discr} = QFT^{-1} \sqrt{N}(x_{discr} - I/2) QFT = A^{-1} QFT^{-1} \sqrt{N} x_{discr} QFT A$, где диагональный оператор $A = \text{diag}(\exp(\pi ia))_{a=0,1,\dots,N-1}$. Его собственные вектора будут иметь вид $A^{-1} QFT^{-1} |a\rangle$ вида (1.21) и их собственными значениями будут числа $\sqrt{N}(a - 1/2)$; $a = 0, 1/N, \dots, (N - 1)/N$.

Итак, в дискретном представлении все собственные состояния основных операторов нормированы на единицу, и нет никаких противоречий с математическим анализом. Мы здесь использовали аналитическую технику непрерывных преобразований Фурье для корректной записи ее дискретного аналога. Нетрудно показать, что все

Фурье для корректной записи ее дискретного аналога. Нетрудно показать, что все полезные свойства преобразования Фурье: переход от дифференцирования (применения оператора импульса) к умножению на константу а также выявление скрытого периода комплексной экспоненты сохранятся при переходе от непрерывной формы к дискретной, так что мы можем пользоваться именно дискретными операторами в конечномерных пространствах во всех физических задачах, связанных с квантовой теорией.

Операторы (1.21) называют прямым и обратным квантовым преобразованием Фурье. С их помощью можно построить полиномиальный квантовый алгоритм, находящий разложение числа на нетривиальные множители ([5]). Реализация обратного квантового преобразования Фурье на квантовом компьютере приведена в Приложении; реализация прямого преобразования получается из него обращением всех входящих операторов и их порядка.

1.4.3 Наблюдение момента импульса и спина

Оператор момента $r \times p$ по определению трехмерен. Для его записи дискретной форме надо совершать преобразования Фурье по каждой из трех координат по отдельности, что даст

$$\begin{pmatrix} y_{discr} p_{z \ discr} - z_{discr} p_{y \ discr}, & -x_{discr} p_{z \ discr} + z_{discr} p_{x \ discr}, \\ x_{discr} p_{y \ discr} - y_{discr} p_{x \ discr}. \end{pmatrix} \quad (1.22)$$

Оператор же спина имеет вид $(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, где

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.23)$$

- матрицы Паули.

Наблюдение энергии

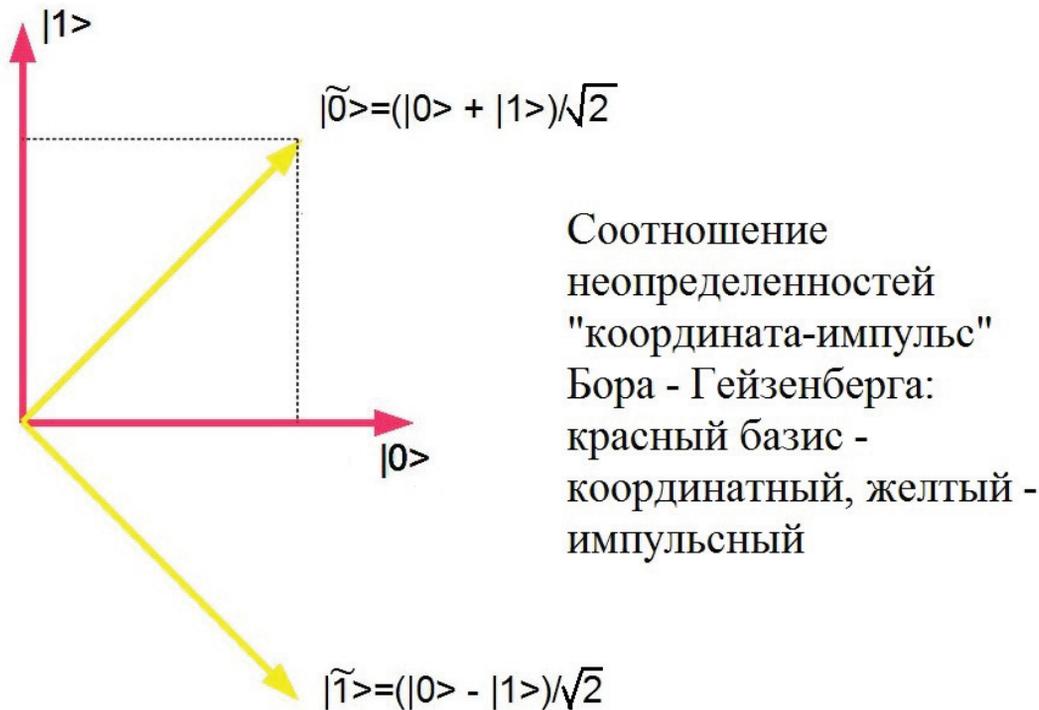
Эрмитов оператор энергии, называемый гамильтонианом, для механической системы есть сумма кинетической и потенциальной энергий: $H = E_{kin} + V$, где для одной частицы $E_{kin} = p^2/2m$, оператор импульса $p = \frac{\hbar}{i}\nabla$, потенциал есть функция, зависящая только от координаты $V = V(r)$, а произведение векторов по умолчанию трактуется как скалярное, то есть $p^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$, $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$, для нескольких частиц кинетические и потенциальные энергии складываются, и энергия межчастичного взаимодействия также входит в гамильтониан как отдельное слагаемое.

В дискретном представлении квантовой механики гамильтониан является эрмитовой матрицей размера $N \times N$.

1.4.4 Одновременное наблюдение нескольких величин

Если A и B - две наблюдаемые, их можно измерить одновременно с абсолютной точностью лишь тогда, когда у них есть общая система собственных векторов, составляющая ортонормированный базис всего пространства. Это имеет место тогда и

Рис. 1.1: Соотношение неопределенностей "координата-импульс" для одного кубита. Если точно определена координата, импульс полностью неопределен, и наоборот.



только тогда, когда они коммутируют, то есть $[A, B] = 0$. В противном случае после измерения одной из них, измерение второй даст большой разброс значений. Поэтому говорят, что некоммутирующие наблюдаемые нельзя измерить одновременно с абсолютной точностью.

Если $[A, B] = C$ и мы обозначим через δA , δB разброс значений данных наблюдаемых при измерении их в каком-либо состоянии, то $\delta A \delta B$ будет пропорционально норме C (докажите!).

Проиллюстрируем соотношение неопределенностей "координата-импульс" на примере одного единственного кубита, базисные значения которого есть возможные значения как координаты, так и импульса некой абстрактной частицы. Как мы видели, переход от координатного базиса к импульсному дается обратным преобразованием Фурье. Для n кубитной системы определения значений координаты это преобразование имеет вид (1.21), а при $n = 1$ сводится к преобразованию Адамара

$$|0\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), \quad |1\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle). \quad (1.24)$$

Измерение состояния $|\Psi\rangle = \lambda_0|0\rangle + \lambda_1|1\rangle$ в обоих базисах изображено на рисунке 1.1.

Докажите также, что $[x, p] = i\hbar$, а коммутаторы матриц Паули подчиняются соотношениям циклического типа, например, $[\sigma_x, \sigma_y] = i\sigma_z$ и т.д. Докажите, что компоненты момента импульса подчиняются таким же коммутационным соотношениям, что и матрицы Паули, только без мнимой единицы. Поэтому спин родственен моменту импульса (но все же отличается от него тем, что он может принимать полуцелые

значения в отличии от момента).

Таким образом, невозможно одновременно с абсолютной точностью измерить пары наблюдаемых "координата-импульс вдоль нее", "кинетическую и потенциальную энергию", "различные компоненты момента". Однако, можно измерить одновременно: координату x и компоненту импульса p_y . Можно также одновременно измерить любую фиксированную компоненту момента и его скалярный квадрат. Докажите это и объясните, почему это не противоречит некоммутативности разных компонент момента.

1.5 Унитарная эволюция

До сих пор мы изучали вектор состояния в фиксированный момент времени, а также то, что происходит с ним при жестком контакте с окружением, вызывающем измерение. Однако контакт с окружением может быть не очень жестким. Например, движение частицы в заданном потенциальном поле тоже является контактом с окружением, однако такого рода контакт не приводит ни к какому измерению вектора состояния.

Ортодоксальная (копенгагенская) квантовая механика просто постулирует, что есть контакт с окружением, приводящий к измерению вектора состояния, а есть контакт, ведущий к так называемой унитарной эволюции, когда изменение вектора состояния происходит по детерминистическому закону, являющемуся решением уравнения Шредингера. Такой постулат необходим при использовании математического анализа и он не очень естественен, так как неизвестно, кто (или что) обладает статусом наблюдателя и может привести к измерению вектора состояния. Например, один электрон не может измерить другой, так как система двух электронов должен подчиняться уравнению Шредингера. А может ли тысяча электронов измерить один единственный? Какое макроскопическое тело должно вступить в контакт с рассматриваемой системой, чтобы вызвать ее измерение? На эти вопросы копенгагенская теория ответа не дает.

Мы, опираясь на дискретное представление вектора состояния, дадим частичный ответ на данный вопрос в третьей главе.

1.5.1 Уравнение Шредингера и решение задачи Коши для него

Итак, состояние квантовой системы, предоставленной самой себе, то есть не подвергающейся измерению со стороны *наблюдателя*, изменяется во времени как решение уравнения Шредингера, которое мы здесь и изучим. Это - главное уравнение квантовой механики, которое фактически определяет границы ее применимости. Измерение требует присутствия *наблюдателя* - субъекта, не подчиняющегося квантовой механике в ее современном виде. Но есть подход к измерению, опирающийся на так называемые кванты амплитуды (см. третью главу и Приложение), и этот подход в основе своей опять таки исходит из уравнения Шредингера.

Итак, уравнение Шредингера имеет вид:

$$i\hbar|\dot{\Psi}\rangle = H|\Psi\rangle, \quad (1.25)$$

где H - оператор энергии - гамильтониан, и решение задачи Коши для этого уравнения имеет вид

$$|\Psi(t)\rangle = U_t|\Psi(0)\rangle, \quad U_t = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Ht\right). \quad (1.26)$$

Докажите, что оператор U_t , называемый оператором эволюции, унитарен. Замечательная особенность оператора эволюции в том, что он действует не на одно лишь начальное состояние $|\Psi(0)\rangle$, как в классическом случае, а на все пространство квантовых состояний, то есть на всевозможные начальные функции $|\Psi(0)\rangle$, причем так, что расстояния в гильбертовом пространстве в точности сохраняются. Это замечательное общее свойство оператора эволюции имеет простое практическое следствие: решать уравнение Шредингера (и его модификацию - квантовое основное уравнение, см. далее) численно можно простым методом Эйлера; единственное, за чем надо следить - за сохранением нормы вектора состояния. Дело в том, что унитарный оператор сохраняет все длины, и потому ошибка, раз возникнув, уже не будет расти; а если она систематическая, то нарастание ошибки происходит в виде арифметической прогрессии.

Однако, при не очень большой размерности пространства состояний не нужен и метод Эйлера. Если нам известна полная диагонализация гамильтониана, то есть его собственные состояния $|\Phi_0\rangle, |\Phi_1\rangle, \dots, |\Phi_{N-1}\rangle$ и их собственные значения $E_0 < E_1 \leq E_2 \leq \dots \leq E_{N-1}$ (их всегда можно расположить в этом порядке), то решение задачи Коши выписывается сразу:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{j=0}^{n-1} \lambda_j e^{-\frac{i}{\hbar}E_j t} |\Phi_j\rangle, \quad \lambda_j = \langle \Phi_j | \Psi \rangle \quad (1.27)$$

(Доказать!)

Таким образом, достаточно решить задачу на собственные значения для гамильтониана: $H|\Phi_j\rangle = \lambda_j|\Phi_j\rangle$, и уравнение Шредингера решено.

1.5.2 Уравнение Шредингера для матрицы плотности

Докажите, что уравнение Шредингера для матрицы плотности $\rho(t)$ имеет вид

$$i\hbar\dot{\rho} = [H, \rho] = H\rho - \rho H. \quad (1.28)$$

Указание: взять сопряжение уравнения (1.25), а затем применить формулу дифференцирования произведения.

Уравнение (1.28) удобнее уравнения (1.25) тем, что его можно обобщить на случай открытой квантовой системы, в которой происходит не только унитарная эволюция, но и постоянные измерения текущего состояния со стороны окружения. Как мы видели выше, измерение какой-либо компоненты сложной системы ведет к появлению смешанных состояний, которые уже не описываются вектором состояния, а требуют описания в виде матрицы плотности - именно в этом удобство уравнения (1.28).

Тем не менее, мы будем изучать уравнение Шредингера для вектора состояния (1.25), поскольку оно имеет фундаментальный смысл, описывая эволюцию вектора состояния. Переход к описанию в виде матрицы плотности смешанных состояний несет в себе генетические недостатки копенгагенской квантовой теории, встраивая измерения в процесс естественной эволюции. Обобщение (1.28) - основное квантовое уравнение, которое мы изучим ниже, описывает марковский квантовый случайный процесс, при котором окружение не имеет долговременной памяти. Оно имеет большое практическое значение, однако именно уравнение Шредингера для вектора состояния дает лучшую стартовую площадку для того развития квантовой теории, которое диктуют сложные системы.

1.5.3 Матричная динамика

Уравнение (1.25) означает, что вектор состояния преобразуется во времени путем домножения на некую матрицу эволюции $\exp(-\frac{i}{\hbar}Ht)$. Мы предполагаем, что H - постоянная матрица, но она может быть и зависимой от времени - в последнем случае экспоненту надо трактовать как хронологическую экспоненту; мы не будем заниматься этим вопросом, так как такая трактовка ничего не изменит по существу.

Пусть элементы матрицы эволюции обозначаются как u_{ij} , а начальное состояние $|\Psi\rangle = |\Psi(0)\rangle$ имеет вид (1.1). Тогда правило матричного умножения дает равенство $\lambda_i(t) = \sum_{j=0}^{N-1} \lambda_j(0)u_{ij}$. Рассмотрим его подробнее. Оно означает, что результирующая амплитуда $\lambda_i(t)$ любого состояния $|i\rangle$ получается суммированием разных вкладов: от каждого состояния $|j\rangle$, от его амплитуды $\lambda_j(0)$ этот вклад получается домножением на u_{ij} . Таким образом, число u_{ij} является амплитудой перехода $|j\rangle \rightarrow |i\rangle$.

А теперь рассмотрим два последовательных интервала времени: $[0, t]$ и $[t, 2t]$. Результирующий вектор состояния $|\Psi(2t)\rangle$ будет получаться умножением начального вектора на вторую степень матрицы эволюции U_t^2 . По правилу матричного умножения мы имеем

$$\lambda_i(2t) = \sum_{j,k=0}^{N-1} \lambda_j(0)u_{kj}u_{ik} \quad (1.29)$$

то есть переход осуществляется в два этапа: сначала от состояния $|j\rangle$ к состоянию $|k\rangle$, а затем от $|k\rangle$ к $|i\rangle$. Обобщая это на случай конечного времени $T = nt$ мы получим переход от состояния $|j\rangle$ в состояние $|i\rangle$ вдоль пути

$$|j\rangle \rightarrow |k_1\rangle \rightarrow \dots \rightarrow |k_{n-1}\rangle \rightarrow |i\rangle \quad (1.30)$$

по $n-1$ звенной ломаной, так что результирующая амплитуды найдется по формуле

$$\lambda_i(nt) = \sum_{j,k_1,k_2,\dots,k_{n-1}} \lambda_j(0)u_{ik_{n-1}} \dots u_{k_2k_1} u_{k_1j} \quad (1.31)$$

Из этого мы можем сделать простой вывод. Правило нахождения амплитуды результирующего перехода состоит в том, что а) надо сложить амплитуды перехода вдоль всех путей, ведущих от всех начальных точек в конечную и б) вдоль любого из этих путей амплитуды перехода перемножаются. Это правило лежит в основе "метода циферблата", предложенного Фейнманом в книге [2] для простого объяснения закона квантовой эволюции.

1.5.4 Интегралы по путям

Что получится в пределе, когда мы устремим элементарное время t к нулю, а число звеньев n к бесконечности, так что $T = tn$ будет постоянным? Ломаные траектории (1.30) заменятся на непрерывные кривые вида $\gamma : x = x(t), t \in [0, T]$. Для простоты снова рассмотрим случай одномерной частицы. Суммирование в (1.31) можно разбить на две суммы: одна по j , другая - по всем промежуточным точкам k_1, k_2, \dots, k_{n-1} . Первая сумма даст интеграл

$$\Psi(y, t) = \int_R K(y, x, t) \Psi(x, 0) dx, \quad (1.32)$$

а вторая превратится в правило вычисления матрицы сложного перехода в непрерывном случае:

$$K(y, x, t) = \int_{\gamma: x \rightarrow y} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S[\gamma]\right) \mathcal{D}\gamma, \quad (1.33)$$

где $S[\gamma]$ - действие вдоль траектории γ , которое вычисляется по формуле $S[\gamma] = \int_0^T L(\dot{x}, x, t) dt$, где $L(\dot{x}, x, t) = E_{kin} - V$ - лагранжиан, равный разности кинетической и потенциальной энергии частицы, движущейся из точки $x(0) = x$ в точку $x(T) = y$. Эта функция $K(y, x, t)$ называется ядром Фейнмана, а интеграл (1.33) - фейнмановским интегралом по траекториям.

Если начальное состояние частицы $\Psi(x, t)$ - дельта-функция, сосредоточенная в точке x_0 , то фейнмановское ядро есть волновая функция в момент t . Для случая свободной частицы $V = 0$, так что действие будет интегралом от кинетической энергии. Можно показать (см. [3]), что ядро для свободной частицы имеет вид $c \cdot \exp(-im(x - x_0)^2/2\hbar t)$ для константы c , зависящей лишь от времени t . Это определяет распывание квантового состояния свободной частицы, первоначально сосредоточенной в точке x_0 : она распространится на всю ось $(-\infty, +\infty)$ за любой, сколь угодно короткий промежуток времени $t > 0$, что иллюстрирует соотношение неопределенности "координата-импульс".

Рассмотрев подынтегральное выражение в (1.33) мы можем увидеть некоторое несоответствие с формулой (1.26), а именно: здесь нет знака минус, и при вычислении показателя экспоненты вместо гамильтониана, как в (1.26) используется лагранжиан, у которого потенциальная энергия стоит со знаком минус. Как это объяснить?

Рассмотрим уравнение Шредингера для частицы в потенциале V . Если не обращать внимание на кинетическую энергию, со знаками будет все в порядке: минус впереди показателя экспоненты компенсирует минус в лагранжиане. Займемся кинетической энергией. Ее выражение в (1.26) как $p^2/2m$ совпадает с выражением через лагранжиан в (1.33): $m\dot{x}^2/2$, но не сходится знак. Однако, в уравнении Шредингера (1.25) импульс входит как квантовый импульс $p = \frac{\hbar}{i} \nabla$ а в (1.33) - как классический импульс $m\dot{x}$. Для того, чтобы перейти от него к квантовому, надо совершить обратное преобразование Фурье, которое изменит знак: $p^2/2m$ превратится в $-p^2/2m$, что в точности нужно для выполнения (1.26).

Разумеется, это рассуждение не есть доказательство того, что фейнмановские

интегралы по путям эквивалентны уравнению Шредингера, формальное доказательство приведено в книге [3], к которой мы и отсылаем читателя за деталями.

Фейнмановские интегралы являются, таким образом, непрерывным аналогом матричной динамики, который подчеркивает естественность перехода от непрерывных величин к дискретным. Эти интегралы естественно обобщаются на случай композитных систем многих частиц, или заряженных частиц и электромагнитного поля, что позволяет вычислять, например, амплитуду испускания фотона релаксирующим атомом (см. книгу [3]), а также и обобщать квантовую динамику на релятивистский случай, когда движения зарядов происходят со скоростью, сравнимой со скоростью света.

Важнейшим достоинством интегралов Фейнмана является простое объяснение перехода от квантового описания динамики к классическому. Рассмотрим формулу для ядра (1.33). Здесь производится интеграция по всем путям, идущим от начальной точки к конечной. Но среди этих путей есть один выделенный путь γ_{class} - классическая траектория. Эта траектория выделяется из множества всех других тем, что она удовлетворяет принципу нулевой вариации действия Мопертьюи:

$$\delta S[\gamma_{class}]/\delta\gamma = 0, \quad (1.34)$$

который ошибочно называют принципом наименьшего действия (действие там отнюдь не наименьшее, его вариация при вариации траектории нулевая). Можно доказать (см., например, [3]), что уравнение (1.34) эквивалентно второму закону Ньютона.

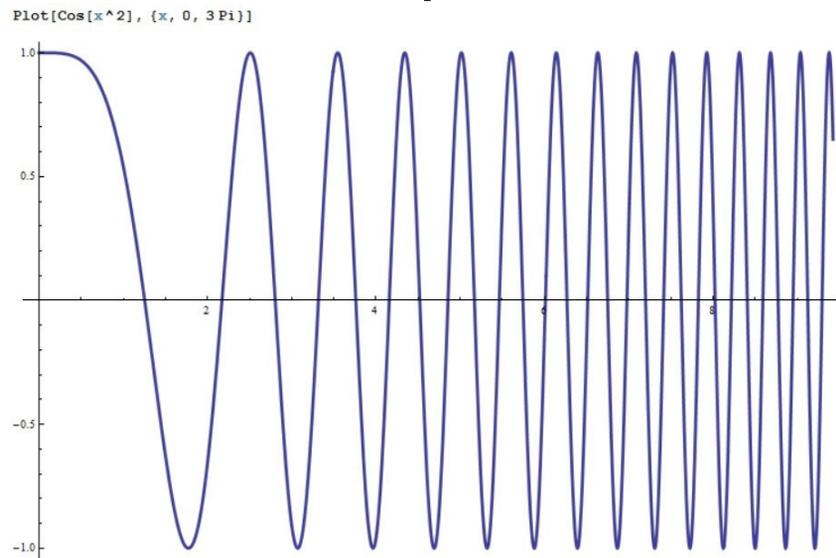
Допустим, мы моделируем какой-либо процесс, выбирая шаг по времени dt . Если этот процесс можно адекватно представить, выбрав такое dt , при котором изменение действия dS будет намного больше постоянной Планка $\hbar \approx 10^{-27}$ ерг сек., то в формуле (1.33) "выживут" только те траектории, которые близки к γ_{class} , потому что действие по порядку величины сравнимо с его вариацией, так что для окружения (окружение - это семейство траекторий, близких к) неклассической траектории, окажется очень малым из-за быстрой осцилляции экспоненты и вытекающего из этого деструктивного характера интерференции - сумма будет содержать львиную долю сокращений и окажется гораздо меньше вклада окружения классической траектории.

Если же для адекватного описания процесса необходимо взять такой малый шаг по времени dt , что изменение действия на нем dS будет сравнимо с \hbar , придется учитывать и неклассические траектории. Мы можем описывать полет пули с помощью квантовой механики, и тогда на малом dt пуля будет вести себя как квантовый объект; точность конечного результата будет такой же, как и при классическом подходе, но вычислительные сложности сделают такой путь неразумным. Иное дело - движение электрона в атоме - здесь надо сделать dt очень малым, так что пренебречь неклассическими траекториями уже будет невозможно.

Итак, мы здесь опираемся на возможность простого отбрасывания очень малых амплитуд - мощный эвристический подход, который в дальнейшем снова приведет нас к необходимости некоего детерминизма, но уже не сводимого к ньютоновской механике - пост-квантового детерминизма для сложных систем.

Попробуем с помощью фейнмановских интегралов по траекториям выяснить, как будет выглядеть состояние свободной точечной частицы, движущейся вдоль оси OX ,

Рис. 1.2: Вещественная часть ядра Фейнмана свободной частицы.



в момент $t > 0$, если в нулевой момент она находилась в начале координат. Мы предположим, что траектории экземпляров этой частицы при малом t являются отрезками прямой, причем скорость ее движения вдоль этих отрезков постоянна. Тогда на отрезке длины x скорость будет равна x/t , и подставляя в выражение для лагранжиана данное значение скорости, мы получим ядро Фейнмана в виде $a \exp(\frac{imx^2}{2\hbar t})$, где a константа. График вещественной части данной функции изображен на рисунке 1.2.

Покажите, что это состояние согласуется с волной де Бройля (1.3) в следующем смысле: экземпляры частицы, достигшие точки x за время t , будут иметь тот же период осцилляций по де-Бройлю, что и по Фейнману в 1.2.

Для свободной частицы очень существенно наличие экземпляров, обладающих разными скоростями, причем распределение по всем скоростям должно быть равномерным, так что любая скорость в виртуальном роде экземпляров должна быть представлена одинаковым числом экземпляров.

Динамику свободной частицы нельзя заменить простыми перемещениями от одной точки к соседней на множестве точек вида $x = \epsilon, 2\epsilon, 3\epsilon, \dots$, так как свободная частица обладает способностью "прыгать" сразу через много точек. Эта особенность должна учитываться при моделировании свободного движения в терминах перемещений фотона между оптическими полостями, что разбирается во второй главе.

1.6 Открытая квантовая система. Квантовое основное уравнение

Что происходит при контакте рассматриваемой системы со средой, не имеющей долговременной памяти, но способной вызывать измерения какой-то части системы? Этот вопрос имеет большое практическое значение. Например, если атом испускает фотон, и этот фотон улетает прочь, находясь в запутанном состоянии с атомом, измерение этого фотона автоматически приведет к появлению смешанного состояния атома, то есть вызовет декогерентность, при которой атом надо описывать матрицей плотности.

Мы вообще можем не знать, что происходит с вылетевшим фотоном; может быть, его никто и не наблюдает, а он отразится от далекого зеркала и прилетит к нам вновь - все равно если его нет рядом, мы должны рассматривать состояние имеющегося у нас атома как смешанное. Прилетит вновь испущенный когда-то и никем не измеренный фотон - хорошо, система "атом-фотон" опять будет в чистом состоянии, а если прилетит другой фотон вместо нашего, попавшего в чей-то детектор, вот тогда у нас будет матрица плотности смешанного состояния композитной системы. То есть мы можем определить, подвергался ли фотон измерению только тогда, когда он к нам прилетит вновь. Если мы устроим эксперимент так, что на каждом его повторении к нам будет прилетать фотон, мы можем, изменяя базис, определить методом томографии, было ли измерение, то есть тот ли это фотон, который когда-то вылетел из нашего атома, или другой: при детектировании фотон исчезает.

Однако этот метод - статистический. С его помощью мы можем только проверить, есть ли систематическое измерение вылетающих фотонов в однотипных экспериментах, или измерений нет, и все фотоны отражаются от зеркала, прилетая к нам обратно. Для конкретного случая нельзя сделать такое заключение: выводы квантовой теории всегда только статистические.

Изменение во времени матрицы плотности системы, взаимодействующей со стационарным окружением, не имеющим долговременной памяти, описывается обобщением уравнения Шредингера для матрицы плотности, которое называется квантовым

основным уравнением Коссаковского - Линдблада - Глаубера - Сударшана:

$$i\hbar\dot{\rho} = [H, \rho] + i\mathcal{L}(\rho), \quad \mathcal{L}(\rho) = \sum_{j=1}^{N^2-1} \gamma_j (A_j \rho A_j^+ - \frac{1}{2} \{A_j^+ A_j, \rho\}) \quad (1.35)$$

где операторы A_j называются факторами декогерентности, и должны, вместе с идентичным оператором, образовывать ортонормированный базис в N^2 - мерном пространстве Лиувилля операторов размера $N \times N$, в котором скалярное произведение определяется по формуле $\langle A|B \rangle = \text{tr}(A^+ B)$. Здесь через крестик мы, следуя традиции, обозначаем сопряженный оператор, а неотрицательные числа γ_j являются интенсивностями действия фактора декогерентности A_j .

Это уравнение является обобщением на квантовый случай основного марковского уравнения $\dot{P} = AP$ для распределения вероятностей P ; если в случайных процессах рассматривается заданная динамика вероятностных распределений, то есть динамика главной диагонали матрицы плотности, то в квантовой физике рассматривается вся матрица плотности, причем исследуются физические причины именно такой динамики.

Численное решение уравнения (1.35) может быть проведено по методу Эйлера. Дело в том, что основное слагаемое в правой части $[H, \rho]$ соответствует унитарной динамике; эта динамика не увеличивает величину ошибки, поэтому здесь не возникают паталогические случаи ее быстрого роста и, как правило, нет необходимости в применении более точных методов типа Рунге-Кутты. Решение можно представить в виде последовательности шагов, каждый из которых соответствует времени t_j , начинается с матрицы плотности $\rho(t_j)$ и состоит из двух действий:

1. Вычисляется унитарная динамика матрицы плотности

$$\tilde{\rho}(t_{j+1}) = \rho(t_j) + \frac{1}{i\hbar} [H, \rho(t_j)] dt.$$

2. Вычисляется действие супероператора Линдблада \mathcal{L} на промежуточную матрицу плотности $\tilde{\rho}(t_{j+1})$:

$$\rho(t_{j+1}) = \tilde{\rho}(t_{j+1}) + \frac{1}{\hbar} \mathcal{L}(\tilde{\rho}(t_{j+1})) dt.$$

Матрица плотности $\rho(t)$ в любой момент времени должна быть положительно определенной, эрмитовой, и иметь единичный след. Последние два условия, при наличии случайных ошибок, можно легко обеспечить переходом от слегка испорченной матрицы $\rho(t)$ к исправленной матрице $(\rho(t) + \rho^+(t))/\text{tr}(\rho(t))$. Для обеспечения положительной определенности при случайных ошибках можно вычислять один раз, например, за 20 шагов, собственные значения, а затем, при появлении малого отрицательного значения, корректировать эти значения, перераспределяя ошибку на все другие собственные вектора.

1.7 Фейнмановский квантовый компьютер

На примере системы n кубитов мы видели, что размерность N пространства квантовых состояний растет как экспонента $N = 2^n$ от числа n реальных частиц. Поэтому даже расчет простейшей молекулы на квантовом уровне представляет большие трудности, а расчет химических реакций вообще выходит за пределы возможностей суперкомпьютеров - не только существующих, но и любых имеющих быть построенными на принципах классической теории вычислений. Именно поэтому до сих пор нет компьютерного симулятора химии, и эта наука остается в большой степени эмпирической.

Естественная идея: использовать саму квантовую механику для производства вычислений, высказывалась несколькими учеными, например, Ю.Маниным и П.Беньофом (см. [6]). Однако Р.Фейнман первым предложил план создания квантового компьютера на основе интерфейса квантовых гейтов, из которых он строится примерно так же, как классический компьютер из транзисторов - путем их соединения в единую схему (см. [7]). Эту схему, ставшую канонической, мы здесь и рассмотрим.

Фейнмановский квантовый компьютер состоит из квантовой части, состоящей из кубитов, и классической части, которая указывает, какие операторы и в какой последовательности надо совершить над текущим состоянием квантовой части.

Состояние классической части компьютера однозначно определяет, какие операторы и к каким кубитам надо применять для получения очередного состояния квантовой части.

Квантовый алгоритм - это набор команд, указывающий как изменяется сама классическая часть. Если бы у нас не было никакой квантовой части, все вычисление свелось бы к изменению самой классической части и имело бы ровно тот же смысл, что и манипуляции с переключением передач и рулением в автомобиле с выключенным двигателем. Включение двигателя есть подключение квантовой части. В этом случае автомобиль будет подчиняться управлению.

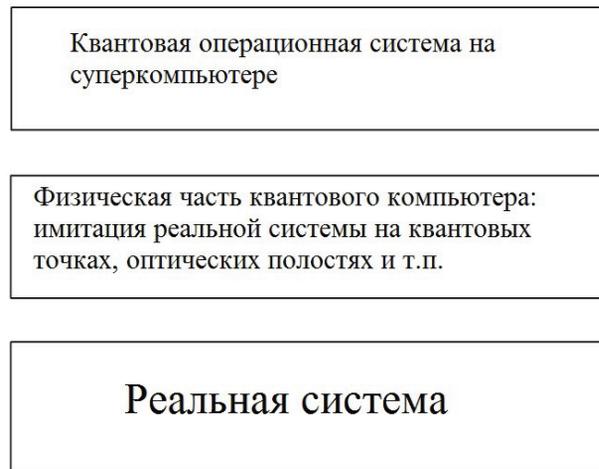
Таким образом, если выполнять последовательные действия над квантовой частью, на которые указывает классическая часть, мы получим квантовое вычисление, определяемое данным алгоритмом.

Квантовый алгоритм, по существу, является классическим алгоритмом, непосредственно действующим лишь на классическую часть компьютера.

Схема моделирования реальности на квантовом компьютере изображена на рисунке 1.3. Две верхние части составляют квантовый компьютер, нижняя изображает реальную систему, которой мы хотим управлять. При моделировании эволюции реальной системы, например, динамики молекулы белка, мы могли бы попытаться обойтись без квантовой части вообще, и попробовать воспроизводить динамику непосредственно в классической части, как это делается, например, при молекулярном моделировании.

Но такое моделирование будет слишком грубым, и на нем нельзя построить эффективного управления реальной системой. Уже для простых химических реакций классическое управление не справляется с задачей управления. Причина состоит в

Рис. 1.3: Моделирование реальности на квантовом компьютере



ограниченности классической памяти. Нам нужна средняя часть всей схемы - квантовая часть компьютера, которая бы воспроизводила, пусть в общих чертах, существенные особенности реальной системы, особенности ее квантовой природы. Эти особенности: запутанные состояния - их невозможно адекватно представить в классической части, каким бы изощренным алгоритмом мы не пользовались. Именно здесь нам нужен полноценный квантовый компьютер.

Переходы между всеми тремя уровнями в схеме моделирования нетривиальны. Если оставить только первые два, и отключить из рассмотрения реальную систему, у нас получится демонстрационная версия квантового компьютера. На ней можно пытаться воспроизводить квантовые эффекты на уровне искусственно сделанной системы кубитов квантовой части.

Важнейшим из таких эффектов являются так называемые быстрые квантовые алгоритмы. Они выходят за рамки обычных представлений квантовой механики, потому что результаты вычислений по этим алгоритмам невозможно воспроизвести ни в какое разумное время, не имея квантовой части. Феномен быстрых квантовых алгоритмов поэтому является очень строгим тестом, позволяющим определить границы применения самого квантового формализма.

1.8 Квантовые гейты

Пользовательский интерфейс квантового компьютера по Фейнману основан на квантовых гейтах и массивах из них (quantum gate arrays). Квантовый гейт - это унитарный оператор, действующий в пространстве состояний одного, двух или трех кубитов, который можно реализовать физически. Если взять все однокубитовые гейты и добавить к ним почти любой двух-кубитовый, например, гейт CNOT: $|x, y\rangle \rightarrow |x, y \oplus x\rangle$, можно получить полную систему гейтов: через гейты из этого набора можно выразить любое унитарное преобразование с любой, наперед

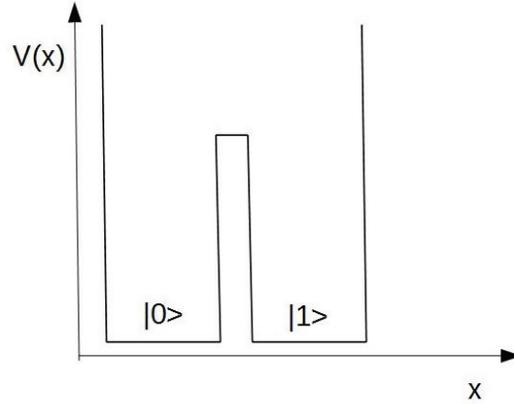


Рис. 1.4: Квантовая точка в виде двух-ямного потенциала

заданной точностью (см. [8])³.

Таким образом, первая задача реализации фейнмановской схемы квантовых вычислений: реализация однокубитных гейтов и CNOT. Рассмотрим гейт CiNOT, близкий к CNOT: $CiNOT|x, y\rangle = e^{i\pi x/2}CNOT|x, y\rangle$. Мы покажем, как реализовать однокубитный гейт $iNOT : |x\rangle \rightarrow i|x \oplus 1\rangle$ и квантовый гейт CiNOT на зарядовых состояниях электронов в квантовых точках. Имея однокубитные гейты и CiNOT, можно реализовать и CNOT, так как он получается из CiNOT применением к первому кубиту однокубитного относительного вращения фазы $e^{-i\pi x/2}$. Данная реализация CNOT - одно из первых предложений реализации запутывающих гейтов на зарядовых состояниях (см. [10]), ее схема наиболее проста, хотя представляет определенные технологические трудности.

Введем понятие квантовой точки. Это малая область в твердотельной структуре, в которой создан потенциал в виде двух ям с достаточно высоким потенциальным барьером между ними, причем в этом потенциале может находиться один электрон (см. рисунок 1.4).

Нахождение электрона в правой яме означает состояние $|0\rangle$, в левой $|1\rangle$.

Гамильтониан такой системы имеет вид $H = c_1I - b\sigma_x$, где σ_x - определенная в (1.23) первая матрица Паули, $b > 0$. Читателю предоставляется показать, что собственными состояниями этого гамильтониана будут

$$|\phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), \quad |\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle), \quad (1.36)$$

причем их собственные значения упорядочены так, что $E_0 < E_1$, так что $|\phi_0\rangle$ будет основным, а $|\phi_1\rangle$ - возбужденным состоянием. Применяя формулу (1.27), мы находим решение задачи Коши для уравнения Шредингера с таким гамильтонианом в виде

$$|\Psi(t)\rangle = A_0 e^{-\frac{iE_0 t}{\hbar}} |\phi_0\rangle + A_1 e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} |\phi_1\rangle = e^{-\frac{iE_0 t}{\hbar}} (A_0 |\phi_0\rangle + e^{-\frac{i(E_1 - E_0)t}{\hbar}} A_1 |\phi_1\rangle) \quad (1.37)$$

и теперь, учитывая что состояния $e^{i\theta}|\Psi\rangle$ физически неразличимы для любого вектора

³На комбинациях гейтов можно построить огромное разнообразие интересных операторов. Читатель, любящий алгебраические упражнения, может обратиться к книге [9], содержащей много интересных задач на квантовые вычисления.

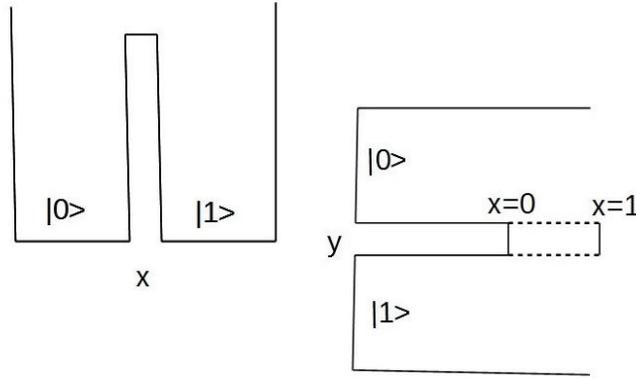


Рис. 1.5: SiNOT на зарядовых состояниях

$|\Psi\rangle$, мы приходим к выводу, что для реализации гейта NOT: $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$, $|1\rangle \rightarrow |0\rangle$ достаточно просто подождать время $\frac{1}{2}\tau = \pi\hbar/(E_1 - E_0)$.

Из формулы (1.37) следует, что базисные состояния электрона в квантовой точке осциллируют, то есть переходят одно в другое $|0\rangle \rightarrow |1\rangle \rightarrow |0\rangle$ и $|1\rangle \rightarrow |0\rangle \rightarrow |1\rangle$ с периодом $\tau = 2\pi\hbar/(E_1 - E_0)$, который мы назовем периодом осцилляций.

Здесь мы игнорировали фазовый множитель $e^{-\frac{iE_0 t}{\hbar}}$, который не имеет физического смысла, если оператор NOT совершается для любых состояний. Но предположим, что NOT совершается условно, например, только если какой-либо другой кубит имеет значение 1, а если его значение 0, то NOT над x не совершается. В этом случае надо учитывать общий набег фазы, и учитывать данный множитель. Найдите E_0 и E_1 и напишите точное выражение для оператора, реализуемого данной подпрограммой при $x = 1$ за время $\tau/2$. Ответ: это оператор $i\sigma_x$. В следующей главе мы покажем, как реализовать оператор, близкий к CNOT на атомных возбуждениях, там гамильтониан будет иметь обратный знак, и аналогичный оператор будет иметь вид $-i\sigma_x$.

Реализация гейта SiNOT требует двух квантовых точек, расположенных перпендикулярно друг к другу, как показано на рисунке 1.5. Кулоновское взаимодействие двух электронов, каждый из которых находится в одной из этих точек, приводит к эффекту изменения потенциального барьера в точке y . Потенциальный барьер между ямами в точке y оказывается выше, если электрон точки x находится в состоянии $|1\rangle$, по сравнению с ситуацией, когда электрон точки x находится в состоянии $|0\rangle$ в силу того, что отталкивание электронов выше на близком расстоянии.

Допустим сначала, что положение электрона x нам удалось каким-то образом зафиксировать, так что он не туннелирует между своими ямами. Тогда можно подыскать такое время τ_{SiNOT} , что через это время произойдет преобразование SiNOT. Действительно, пусть разность энергетических уровней y - электрона, соответствующая положениям x - электрона $|0\rangle$ и $|1\rangle$, равна $dE^0 = E_1^0 - E_0^0$ и $dE^1 = E_1^1 - E_0^1$ соответственно. Тогда периоды осцилляций для y - электрона при нахождении x - электрона в положении $|0\rangle$ и $|1\rangle$ будут, соответственно $\tau_0 = 2\pi\hbar/(dE^0)$ и $\tau_1 = 2\pi\hbar/(dE^1)$. Можно, варьируя расстояние между точками, подобрать эти значения таким образом, чтобы

для некоторого значения времени τ_{CiNOT} в него укладывалось бы четное число осцилляций с верхним индексом 0 и нечетное - с верхним индексом 1, что и даст нам требуемый оператор $CNOT$ при фиксации положения x - электрона. Детали представляются читателю.

Как предотвратить туннелирование x - электрона? Это можно сделать, повысив потенциальный барьер между ямами в x - точке так, чтобы за время туннелирования между ними x - электрона было существенно меньше τ_{CiNOT} , а затем, после совершения $CiNOT$, снова снизить этот барьер до обычного уровня, что делается внешним потенциалом. Так реализуется гейт $CiNOT$. Проблема состоит в том, что электрон, находящийся в возбужденном состоянии $|\phi_1\rangle$ в одной точке, способен испустить фотон, перейдя в состояние $|\phi_0\rangle$, что помешает реализации гейта $CiNOT$ по данной схеме. Подобная проблема возникает всегда при реализации запутывающих гейтов - ошибки. Для коротких вычислений они могут быть пренебрежимыми, однако для практически важных длинных вычислений они представляют проблему. Мы еще вернемся к этой теме позже, при изучении более реалистичных моделей квантовых компьютеров.

1.9 Алгоритм Гровера

Мы разберем лишь один быстрый квантовый алгоритм, найденный Ловом Гровером в 1996 году (см. [11]) - алгоритм GSA (Grover search algorithm). Этот алгоритм содержит минимальное число деталей, и потому на нем можно самым наглядным образом показать важнейшее свойство квантовой динамики - способность концентрировать амплитуду на отдельных состояниях, причем тех, которые заранее не известны. Скорость такой концентрации необычайно велика, так что этот процесс невозможно воспроизвести на классическом компьютере.

GSA - фундаментальный квантовый алгоритм. Он может служить моделью сложных процессов на квантовом уровне, что будет более подробно разобрано в третьей главе. Там же будут рассматриваться превращения амплитуды квантовых состояний при вычислении по этому алгоритму. Здесь же мы опишем GSA с "внешней" стороны, в терминах гильбертова формализма. Это описание коротко и красиво, и потому начнем с него.

Пусть задана булева функция f от n переменных, причем уравнение

$$f(x) = 1 \tag{1.38}$$

имеет ровно один корень x_{tar} , который нам надо найти, обращаясь к функции f наименьшее число раз. Если бы у нас был классический компьютер, число таких обращений было бы по порядку величины не меньше $N = 2^n$, так как это классическая переборная задача, в которой нет лучшего способа нахождения ответа кроме прямого перебора всех возможных вариантов - всех булевых n - ок. Это очевидно, если f задана нам в виде "черного ящика"; в случае, если у нас имеется явная схема из функциональных элементов, вычисляющая f , необходимость перебора строго не доказана, просто никакого более быстрого метода поиска решения (1.38) до сих пор не найдено.

На квантовом компьютере можно найти x_{tar} за $[\pi\sqrt{N}/4]$ обращений к функции f . Если у нас имеется классическое устройство, вычисляющее $f(x)$ для любого $x \in \{0, 1\}^n$, из него можно сделать квантовый алгоритм, вычисляющий функцию вида

$$f_{quant} : |x, y\rangle \rightarrow |x, f(x) \oplus y\rangle \quad (1.39)$$

Продemonстрируем идею такого построения на примере простейшей тождественной функции $I : |x\rangle \rightarrow |x\rangle$. Тогда I_{quant} называется *CNOT* и действует как $CNOT|x, y\rangle = |x, x \oplus y\rangle$. Можно показать для различных технологий квантовых компьютеров независимо, что такой унитарный оператор, теоретически, можно реализовать в любой из технологий; за деталями читатель может обратиться к архиву препринтов.

Отражением пространства квантовых состояний вдоль вектора $|a\rangle$ называется зеркальное отражение относительно подпространства, ортогонального $|a\rangle$:

$$I_a|b\rangle = \begin{cases} |b\rangle, & \text{если } \langle a|b\rangle = 0, \\ -|a\rangle, & \text{если } |a\rangle = |b\rangle \end{cases} \quad (1.40)$$

Определенное так отображение линейно продолжается на все пространство; это продолжение мы будем обозначать тем же символом I_a .

Имея оператор f_{quant} , который действует на все линейные комбинации базисных состояний, а не только на одно базисное, как в классическом случае, мы можем построить оператор отражения $I_{x_{tar}}$ вдоль вектора $|x_{tar}\rangle$, хотя сам этот вектор нам и неизвестен. Для этого введем анциллу (вспомогательный кубит), инициализировав ее состоянием $|anc\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$, и применим к состоянию вида $|\Psi\rangle|anc\rangle$ оператор f_{quant} . Из определений вытекает, что получится состояние $I_{x_{tar}}|\Psi\rangle|anc\rangle$ и анциллу можно выкинуть, не опасаясь порчи текущего состояния, поскольку анцилла, сыгравшая свою роль во введении минуса при базисном состоянии $|x_{tar}\rangle$ в суперпозиции $|\Psi\rangle$, снова является незапутанной с основным массивом кубитов.

Здесь надо сделать важное замечание. Если бы мы инициализировали анциллу состоянием $|0\rangle$, а затем совершили бы преобразование f_{quant} , чтобы затем изменить знак при x_{tar} оператором σ_z , примененным к анцилле (что было бы естественно в классическом компьютере), то это создало бы, вообще говоря, запутанное состояние между основным массивом кубитов и анциллой, и просто выкинуть анциллу было бы нельзя: ее измерение привело бы к необратимой порче основного состояния, и мы не получили бы $I_{x_{tar}}|\Psi\rangle$ в итоге. Здесь необходимо было бы применить f_{quant} еще раз, чтобы анцилла снова перешла в отдельное состояние $|0\rangle$, то есть на одну инверсию вдоль $|x_{tar}\rangle$ мы потратили бы два вызова функции f_{quant} вместо одного при нетривиальной инициализации анциллы; при такой инициализации изменение нужного знака в линейной комбинации на входе происходит с одновременной чисткой анциллы.

Построим состояние вида $|\tilde{0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} |j\rangle$ - это можно сделать, совершая преобразование Адамара

$$H = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \quad (1.41)$$

над каждым кубитом в состоянии основного массива n кубит $|\tilde{0}\rangle = |00\dots 0\rangle$, где все кубиты имеют значение $|0\rangle$ (докажите!). Такой оператор иначе можно записать как тен-

зорную n -ую степень оператора H ; его еще называют оператором Уолша-Адамара: $WH = H^{\otimes n}$.

Читатель может попробовать (это необязательно) выяснить общий вид элемента матрицы оператора WH : $w_{i,j}$. Указание: надо использовать кубитовое представление натуральных чисел i и j .

Далее, мы можем реализовать гейт Тоффоли $T : |x, y, z\rangle \rightarrow |x, y, xy \oplus z\rangle$ на любой технологии квантового компьютера, на которой можно реализовать $CNOT$ (можно показать, что T выражается через $CNOT$ и однокубитные гейты).

Покажем, как совершить преобразование $I_{\tilde{0}}$.

Рассмотрим оператор $R : |x, y, z\rangle \rightarrow T_{x,z,y} CNOT_{x,z} T_{x,y,z} |x, y, z\rangle$. Заведем дополнительно $n+1$ анциллу, инициализированную состоянием $|0\rangle|\tilde{0}\rangle$. Обозначим первый кубит анциллы через res , а остальные занумеруем числами $1, 2, \dots, n$. Будем совершать преобразование R последовательно над i -м кубитом основного массива, кубитом res и $i+1$ -м кубитом анциллы, $i = 1, 2, \dots, n$, затем $-\sigma_z(res)$. Покажите, что в кубите res будет 1 тогда и только тогда, когда $x \neq 1$. Для обязательной очистки анциллы совершим все описанные преобразования в обратном порядке.

Теперь мы можем совершить и $I_{\tilde{0}}$, заметив, что $I_{\tilde{0}} = H^{\otimes n} I_{\tilde{0}} H^{\otimes n}$.

После этого будем делать последовательные применения оператора $G = -I_{\tilde{0}} J_{x_{tar}}$, начиная с $|\tilde{0}\rangle$ $[\pi\sqrt{N}/4]$ раз. Покажем, что результат с высокой точностью совпадет с $|x_{tar}\rangle$. Действительно, вся эволюция вектора состояния n -кубитной системы будет происходить в вещественной линейной оболочке двух почти ортогональных векторов $|\tilde{0}\rangle$ и $|x_{tar}\rangle$, причем G будет дважды инвертировать ориентацию этой двумерной вещественной плоскости. Значит, G есть ее поворот на некий угол β , найти который можно, следя за одной единственной точкой, например, за концом вектора $|\tilde{0}\rangle$. Легко показать (сделайте это!), что $\beta = 2 \arcsin(1/\sqrt{N})$. Теперь из высокой точности равенства $\alpha \approx \arcsin(\alpha)$ следует искомое равенство

$$|x_{tar}\rangle \approx G^\tau |\tilde{0}\rangle,$$

что и требовалось.

Итак, квантовый алгоритм Гровера требует порядка \sqrt{N} обращений к оракулу, то есть ускоряет вычисление неизвестного решения (1.38) на уровне, недоступном никакому классическому компьютеру. Можно показать (см. [12]), что данный алгоритм является оптимальным в следующем точном смысле. Любой иной алгоритм, работающий существенно быстрее, будет давать неверный ответ для переборной задачи (1.38) для подавляющего большинства функций f^4 .

Если уравнение (1.38) имеет несколько решений: x_1, x_2, \dots, x_l , то в точности повторив схему GSA, только взяв $\tau = [4\pi\sqrt{N/l}]$, мы получим в результате хорошее приближение состояния $|X_{tar}\rangle = \frac{1}{\sqrt{l}} \sum_{j=1}^l |x_j\rangle$, после чего измерение позволит нам найти одно из x_j . Читателю предлагается проверить этот факт, убедившись, что все рассуждения сохраняются, только x_{tar} надо заменить на X_{tar} с соответствующей коррекцией времени τ .

⁴См. также [13], [14].

Если l нам неизвестно (практически важный случай), можно итерировать схему GSA, производя τ_s операций GSA для $\tau_s = 2^s$, последовательно, для $s = 1, 2, \dots$. Покажите, что число шагов такого итерационного применения GSA будет иметь порядок $O(\sqrt{N/l})$, то есть корня из классического времени. Это - максимально возможное квантовое ускорение для большинства классических алгоритмов при неограниченной длине вычисления (см. первый параграф Приложения); если же рассмотреть короткие классические алгоритмы, их в большинстве случаев, нельзя ускорить на квантовом компьютере даже на один шаг (см. [15]).

1.10 Алгоритм Гровера как квантовая модель сложного процесса

Алгоритм Гровера GSA надо рассматривать как образец правильного применения квантовой теории к сложным системам. Этот алгоритм можно схематически представить в виде

$$\underbrace{G_{x_{in}} G_{x_{in}} \dots G_{x_{in}}}_{\tau} WH \quad (1.42)$$

где $\tau = [\pi\sqrt{N}/4]$, оператор Уолша-Адамара $WH = H^{\otimes n}$, оператор

$$G_{x_{in}} = -WH \cdot I_{x_{in}} WH \cdot I_{x_{tar}},$$

$|x_{in}\rangle$ - базисное состояние, и алгоритм начинает работу с с этого состояния $|x_{in}\rangle$, давая в результате $|x_{tar}\rangle$ с высокой точностью. Мы рассматривали этот алгоритм при $|x_{in}\rangle = |\bar{0}\rangle$, но можно в качестве $|x_{in}\rangle$ выбрать любое базисное состояние. Читателю предлагается доказать это обобщение алгоритма Гровера, используя тот факт, что оператор $WH I_{x_{in}} WH$ является отражением $I_{\tilde{x}_{in}}$ пространства вдоль вектора $|\tilde{x}_{in}\rangle = WH |x_{in}\rangle$. Все рассуждения, приведенные в параграфе 1.9, полностью сохраняются.

Мы обозначим такую обобщенную форму алгоритма Гровера через $GSA_{x_{in}}$; этот алгоритм в каждом шаге зависит от x_{in} , и начинается с состояния $|x_{in}\rangle$.

Таким образом, чистый результат работы $GSA_{x_{in}}$ есть переход вида

$$GSA_{x_{in}} : |x_{in}\rangle \rightarrow |x_{tar}\rangle. \quad (1.43)$$

Пусть у нас имеются два оракула F и f причем $f(x) = 1$ имеет единственное решение x_{tar} , а $F(x) = 1$ - единственное решение x_{in} . Пусть оракул функции f представлен в виде $f = f_l f_{l-1} \dots f_1$ элементарных классических операций над бинарной строкой, которая преобразуется в строку такой же длины операциями f_i , $i = 1, 2, \dots, l-1$, а операция f_l преобразует строку длины n в один бит. Пусть оракул функции F представлен аналогичным образом как $F = F_l F_{l-1} \dots F_1$.

Рассмотрим бинарные строки x_{tar} и x_{in} . Пусть список $i_1, i_2, \dots, i_s \in \{1, 2, \dots, n\}$ состоит из всех номеров битов, значения которых у этих строк различны. Рассмотрим классический оператор $S = S_f = \sigma_x(i_1)\sigma_x(i_2)\dots\sigma_x(i_s)$, инвертирующий в точности те биты, в которых в x_{tar}

стоят единицы. Оператор S преобразует бинарные строки длины n в строки той же длины.

Тогда мы имеем $F_i = S f_i S$, $S f S = F_l F_{l-1} \dots F_1$. Имея начальное состояние $|x_{in}\rangle$, можно построить оракул для $Q u_f$, и если мы, к тому же имеем оракул для $Q u_f$, мы можем реализовать $GSA_{x_{in}}$, и найти x_{tar} .

Пусть $G : \{0, 1\}^{2n} \rightarrow \{0, 1\}$ - заданная функция, такая что для любого базисного состояния $|x_{in}\rangle$ уравнение $G(x_{in}, x_{tar}) = 1$ имеет единственное решение $|x_{tar}\rangle$ - это состояние сложной системы, в которое она переходит при условии, что в начальный момент она была в состоянии $|x_{in}\rangle$.

Функция G осуществляет отбор конечного состояния по его косвенным характеристикам, но с абсолютной точностью, не давая при этом его точного значения. Для нахождения состояния системы на шаге i - x_{tar}^i надо применить $GSA_{x_{in}}$ к состоянию системы на шаге $i - 1$ - $|x_{tar}^{i-1}\rangle = |x_{in}^i\rangle$. Так мы получим последовательность состояний нашей системы вида

$$|x_0\rangle = |x_{in}^0\rangle \rightarrow |x_{tar}^0\rangle = |x_{in}^1\rangle \rightarrow |x_{tar}^1\rangle = |x_{in}^2\rangle \rightarrow \dots \quad (1.44)$$

Это - общая модель эволюции сложной квантовой системы во времени, в которой она переходит из одного базисного классического состояния в другое, причем в течение данного перехода возникают сложные запутанные состояния частиц в ней, которые редуцируются на каждом шаге, приводя к очередному классическому, полностью декогерентному состоянию.

Оператор Уолша-Адамара WH означает переход от классического описания состояния системы к квантовому. Например, если один бит равен нулю, состояние такого бита является основным, и оно симметрично при квантовом представлении. Если же состояние бита равно единице, то такое состояние - возбужденное, и оно антисимметрично, если его рассмотреть как квантовое (см. формулу (1.36)). Таким образом, оператор Адамара, осуществляющий переход от $|0\rangle$ к симметричному состоянию $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ и переход от $|1\rangle$ к антисимметричному $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$ есть *квантование одного бита*.

Оператор $G_{x_{in}}$ осуществляет запутывание частиц, входящих в систему таким образом, что целевое состояние $|x_{tar}\rangle$ на каждом шаге получается оптимальным образом⁵, что говорит о важности данной модели квантовой эволюции.

Вывод состоит в следующем. Эволюция сложной системы состоит из шагов, на каждом из которых сначала происходит квантование отдельных частиц нашей системы, а затем запутывание их состояний, целью которого является выявление - по величине амплитуды - одного базисного состояния, которое и будет следующим состоянием всей системы. При этом запутывание операторами G необязательно должно длиться именно время τ , важна именно концентрация амплитуды на следующем состоянии системы.

При жестких ограничениях на время когерентности, мы получим описание всей эволюции в классических терминах, как траекторию в пространстве классических состояний системы, где краткий миг когерентности завершается получением вполне

⁵Оптимальность GSA доказана с разных точек зрения, см., например, [12].

определенного классического состояния. К этому вопросу мы еще вернемся в главе 3.

1.11 Алгоритм Залки-Визнера

Алгоритм GSA, изученный нами в предыдущем параграфе, оперирует с кубитами, переводя их классические (базисные) состояния в квантовые с помощью оператора Адамара. Этот прием иллюстрирует важнейшие особенности описания эволюции на квантовом уровне, однако с большой потерей точности. Реальная частица может занимать несколько классических положений, а не только два, как кубит.

Мы рассмотрим алгоритм Z моделирования квантовой унитарной эволюции, предложенный в работе [16] (см. также [17]), который фактически обобщает GSA на случай многих классических состояний каждой частицы. В нем вместо оператора Адамара, "размазывающего" амплитуду по двум возможным состояниям кубита, на каждом шаге вычисляется волновая функция частицы, способной находиться во многих классических пространственных состояниях.

Алгоритм Z отличается от прямого решения уравнения Шредингера на классическом компьютере лишь тем, что амплитуды λ_j текущего квантового состояния $|\Psi(t)\rangle$ не вычисляются напрямую, а моделируются квантовой динамикой кубитов в дискретном представлении $|j\rangle = |0\rangle, |1\rangle, \dots, |N-1\rangle$ пространства классических состояний в вычислительной памяти n кубит, $N = 2^n$, при котором волновая функция представляется в виде $|\Psi(t)\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} \lambda_j |j\rangle$.

Напомним, что реальное одномерное пространство классических состояний сначала переводится линейным преобразованием \mathcal{D} в отрезок $[0, \sqrt{N}]$, который затем дискретизируется кубитовым представлением чисел с точностью приближения $1/N$: $x_k \approx k/N$, $k = 0, 1, \dots, N-1$. Такое представление волнового вектора требует соответствующей дискретизации операторов. Дискретная форма оператора координаты x_{discr} и оператора импульса p_{discr} была рассмотрена в параграфе 1.4.2.

Оператор потенциальной энергии V при этом становится диагональной матрицей $diag(V(X_0), V(X_1), V(X_2), \dots, V(X_{N-1}))$, $X_k = \sqrt{N}x_k$ со значениями потенциальной энергии на главной диагонали, диагональное представление оператора кинетической энергии (в пространстве своих собственных векторов оператора импульса) также диагонально: $K_{diag} = diag(-\hbar^2 p_0^2/2m, -\hbar^2 p_1^2/2m, -\hbar^2 p_2^2/2m, \dots, -\hbar^2 (p_{N-1})^2/2m)$, где $p_k = \sqrt{N}(x_k - 1/2)$, так что в координатном базисе кинетическая энергия представится оператором

$$K = A^{-1}QFT^{-1} K_{diag} QFT A, \quad (1.45)$$

где $A = diag(\exp(\pi ia))_{a=0,1,\dots,N-1}$.

Тогда часть эволюции, соответствующая оператору потенциальной энергии $\exp(-iVt/\hbar)$ при простом виде потенциала будет реализуемо как квантовая подпрограмма, квантовое преобразование Фурье может быть также реализовано по схеме Шора ([5] - см. Приложение), и оператор, соответствующий кинетической энергии и времени t также может быть реализован в виде квантовой подпрограммы. Применяя

приближение Троттера

$$\exp(A + B) \approx [\exp(A dt) \exp(B dt)]^{t/dt},$$

мы получим алгоритм Z вычисления эволюции в виде:

$$U_t = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H t\right) \approx [\exp\left(-\frac{i}{\hbar} K dt\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} V dt\right)]^{t/dt} \quad (1.46)$$

Мы получаем модель унитарной динамики с квадратичным замедлением по сравнению с реальным процессом. *Докажите это, используя разложение экспоненты до первого порядка по dt . Зафиксируйте порядок ошибки $\epsilon = \text{const}$ и, применяя точность приближения Тейлора для экспоненты, установите число операций, нужное для нахождения приближения результирующего состояния. Это число будет равно t/dt , откуда и получится квадратичное замедление по времени по сравнению с временем t реального процесса.*

Алгоритм Z может быть обобщен на случай нескольких частиц. При этом преобразование Фурье надо применять по каждой координате каждой частицы по отдельности. Этот алгоритм требует памяти, растущей пропорционально первой степени от числа реальных частиц, но не может использоваться для управления сложной системой, так как он предполагает априорное моделирование процесса с переносом результата на новый аналогичный процесс, тогда как в реальности любой сложный процесс не является в точности воспроизводимым, и потому управление им требует моделирования именно в реальном времени.

Сравнивая это вычисление с вычислением по алгоритму GSA, которое имеет вид $G^\tau = (-I_0 I_{x_{tar}})^\tau$, мы видим полную аналогию с формулой (1.46). При этом роль оператора Уолша-Адамара в представлении $I_0 = WH \cdot I_0 \cdot WH$ играет квантовый оператор Фурье в (1.45). Для одного кубита оператор Фурье как раз и совпадает с оператором Адамара (см. реализацию оператора Фурье в Приложении), так что алгоритм Z может считаться обобщением GSA на случай многих классических состояний каждой из частиц.

Итак, мы видим, что имеется два приема сверхбыстрой, недоступной классическому компьютеру, концентрации амплитуды на целевом неизвестном состоянии. Первый - алгоритм GSA, второй - квантовое преобразование Фурье. Можно показать (см. Приложение), что самым грубым приближением преобразования Фурье является как раз оператор Уолша-Адамара, что сводит эти два приема воедино. Быстрый алгоритм факторизации целых чисел Шора фактически использует те же фундаментальные особенности квантовой динамики, что и GSA. Арсенал квантовых методов ускорения классических вычислений ограничен, таким образом, этим общим приемом концентрации амплитуды для задач переборного типа, в соответствии с общим результатом [15]. В задачах, которые не ускоряются распараллеливанием, квантовый компьютер не проявляет преимуществ по сравнению с классическим, за исключением только лишь удивительного его свойства нелокальности.

1.12 Реалистическая схема квантового компьютера

Проект квантового компьютера за последние 20 лет перешел из стадии бури и натиска в форму длительной работы, которая захватывает все большее число исследователей в разных областях. По мере того, как в ходе экспериментальных работ выяснялся истинный масштаб проблемы декогерентности, которая в конце 90-х еще считалась технической, росла необходимость более глубокого осмысления того, что мы имеем в виду под "квантовым компьютером", и как именно его следует создавать. В частности, мы уверены в том, что проект его построения должен основываться не только на достижениях квантовой физики 20 века, которая, в основном, занималась сравнительно простыми системами и процессами, но и на идеологии вычислений и реальных компьютеров. Эта реальная идеология в области сложных процессов уже дала нам новые возможности по сравнению с аналитическим аппаратом квантовой теории прошлого.

Огромный опыт, накопленный в квантовой физике в 20 веке, дает возможность с оптимизмом смотреть на возможности создания экспериментального образца hardware для квантового компьютера уже в ближайшее время. Однако компьютер не есть одно hardware, для его работы необходимо математическое обеспечение - операционная система. Если в для классических вычислений создание операционной системы - такая же масштабная задача, как и построение физической части, то квантовая операционная система представляет собой гораздо большую трудность, так как от нее зависит и сам hardware.

Мы можем схематически представить квантовый компьютер в виде трехэтажной структуры, где нижним этажом будет собственно квантовый процессор, что бы он собой не представлял, вторым этажом будет системная часть математического обеспечения - драйверы квантовых устройств и общая программа управления вычислением, и высшим этажом будет пользовательский интерфейс, непосредственно взаимодействующий с человеком (см. 1.6).

Р.Фейнман в работе [7] предложил пользовательский интерфейс, основанный на массиве квантовых гейтов, реализующих простейшие унитарные операторы на малом числе кубитов. Этот интерфейс прямо следует из современного понимания квантовой теории и потому является в настоящее время основным. Его нужно реализовать, в первую очередь, для того, чтобы понять границы его возможностей. А границы у гейтового интерфейса есть, и они связаны с границами применимости копенгагенской теории, о которых мы уже говорили.

Принципиальный недостаток фейнмановского интерфейса состоит в том, что он рассчитан только на моделирование унитарной динамики чистых состояний, так что для реальных систем с декогерентностью требует специальных дополнительных методов борьбы с ней. Коды коррекции квантовых ошибок ([18]) требуют точной работы квантового компьютера с памятью больше ста кубитов без таких кодов, что уже является проблематичным требованием. С другой стороны, декогерентность как влияние окружающей среды само по себе упирается в методологически темное место в самой квантовой теории - проблему коллапса волновой функции при наблюдении системы. Квантовое основное уравнение или операторы Крауса ([19]), применяемое для описания декогерентности, при детальном моделировании на основе фейнмановского

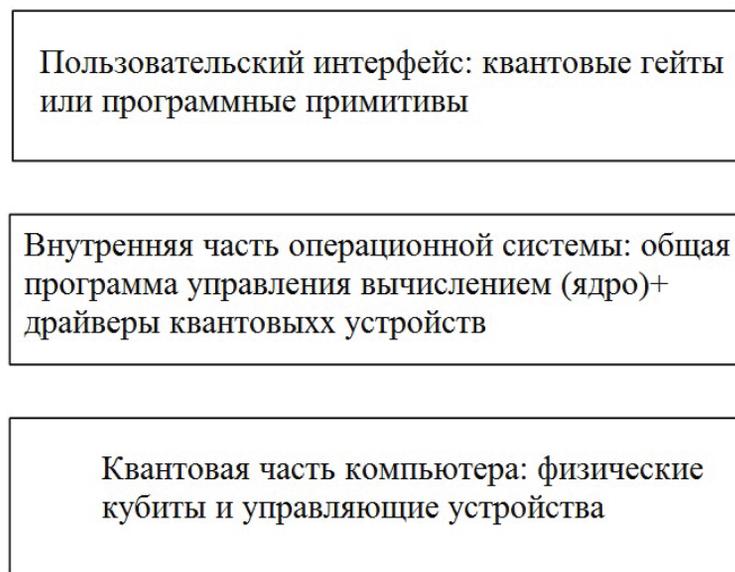


Рис. 1.6: Схема квантового компьютера

интерфейса, снова приводят нас к тому же недостатку, что и при решении уравнения Шредингера. Кроме того, к декогерентности оказываются особенно чувствительными именно те квантовые состояния, которые возникают при реализации квантовых вычислений, поэтому такой путь вообще является проблематичным.

Этот недостаток традиционного подхода побуждают нас к поиску более практичной схемы моделирования реальности на квантовом компьютере, которая бы совмещала теоретические представления квантовой физики с временем течения реальных процессов. Квантовая операционная система, предназначенная для управления реальным процессом должна работать в режиме реального времени, что предполагает вместо массивов гейтов использование специальных программных примитивов: подпрограмм, имитирующих реальный процесс на квантовом компьютере. Эти примитивы должны учитывать и специфику рассматриваемого процесса. В главе 2 мы рассмотрим только элементарные динамические примитивы, лежащие в основе химии и необходимые для отображения ассоциации-диссоциации атомов и их взаимодействия с полем. В иных областях, возможно, потребуются иные примитивы.

При этом управляющие команды операционной системы должны сами воспроизводить такой процесс в некоторой, ограниченной форме, касающейся нескольких реальных частиц. Операционная система, как программа, написанная для классического суперкомпьютера, должна давать процесс, обладающий высокой степенью адгезии по отношению к моделируемому реальному процессу. Только в этом случае квантовый компьютер станет настоящим рабочим инструментом.

Такое требование сходства управления и моделирования отсутствует в классических компьютерах потому, что классическая физика допускает одинаковое описание наблюдателя и наблюдаемой системы, так что наблюдение не меняет ее состояния. В квантовом случае это не так, и потому некоторая степень воспроизводимости квантовой модели в классической операционной системе необходима. Мы не знаем точно, как квантовая физика работает в сложных процессах, и потому требуется страховать

нашу модель классическими средствами отображения реальности.

1.12.1 Ядро операционной системы квантового компьютера

Ядром квантовой операционной системы является программа, написанная для классического суперкомпьютера, которая должна управлять общим ходом вычислений. Если программные примитивы с высокой точностью моделируют динамику малого фрагмента всей модели, то ядро операционной системы должно управлять динамикой квантового состояния всей рассматриваемой системы, причем на достаточно большом отрезке времени, для того, чтобы модель отражала содержательные черты реальной системы.

Здесь мы подходим к черте, за которой наши знания о микромире теряют силу. Мы не знаем, как квантовая теория работает в области сложных процессов. У нас имеется лишь математическая схема квантовых алгоритмов - в фейнмановском интерфейсе и предположении о существовании актуальных бесконечностей, вроде экспоненциальной размерности гильбертова пространства квантовых состояний.

Квантовый компьютер становится, таким образом, экспериментальной установкой, проверяющей границы математических абстракций анализа, причем в условиях, когда мы точно знаем, что эти абстракции лишь приблизительно соответствуют реальности - на примере ненормируемости собственных функций $c \cdot \exp(ipx/\hbar - iEt/\hbar)$ оператора импульса $-i\hbar\nabla$. Математическая корректность квантовой механики достигается, как известно, только при дискретном представлении пространства классических состояний частицы в виде точек вида k/N , где $k = 0, 1, \dots, N - 1$, $N = 2^n$, для k , бинарное разложение которого представляет базисный вектор $|k\rangle$ в n кубитном пространстве. Тогда линейным преобразованием в классическом пространстве мы переводим отрезок $[-A, A]$, на котором разыгрывается динамический сценарий, в множество точек k/N , а переход к импульсному базису производится в виде квантового преобразования Фурье. В этом случае мы имеем $|\Psi\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} \lambda_j |j\rangle$ и можем применять фейнмановский интерфейс для моделирования динамики волнового вектора по схеме, изложенной в параграфе 1.11.

Однако, как мы видели, для управления на квантовом уровне этого недостаточно. Мы должны сделать следующий шаг, еще более сужающий стандартный квантовый формализм. Операционная система должна быть способна моделировать квантовую эволюцию на некотором отрезке времени, хотя бы приблизительно, без участия квантовой части компьютера. Между классическим вычислением и квантовым процессом не должно быть той пропасти, которая предполагается в фейнмановской схеме квантового компьютера, потому что эксперименты однозначно говорят в пользу невозможности прямого масштабирования этой схемы. Мы можем рассчитывать на успех только при соблюдении плавного перехода от моделирования квантовой динамики на классическом компьютере к квантовому моделированию.

Для классического моделирования квантовой динамики имеется одно довольно прозрачное ограничение - на допустимый ненулевой размер амплитуды. Эту проблему мы рассмотрим в третьей главе.

Глава 2

Конечномерные модели КЭД

В этой главе мы опишем возможные программные примитивы для пользовательского интерфейса квантового компьютера. Этот интерфейс близок к описанию химии: здесь атомы в квантовых точках, которые мы считаем резонаторами, могут возбуждаться, когда электроны переходят на возбужденный уровень с поглощением фотона, релаксировать с испусканием фотона, фотоны и электроны могут переходить от атома к атому, и сами атомы могут переходить из одной точки в другую.

Если точек мало, физическая реализация такой модели предполагает наличие оптического резонатора в каждой точке, для предотвращения мгновенного вылета фотонов за пределы области эксперимента. Но если мы будем усложнять систему точек, модель будет все больше и больше напоминать открытое пространство, и тогда ограничение динамики фотонов стенками резонаторов постепенно должно уступить место ограничению в виде интерференционных эффектов в открытом пространстве.

Поэтому сначала мы изучим поведение атомов и поля в одном резонаторе, затем будем расширять нашу модель, вводя все новые и новые степени свободы и описывать возникающие здесь эффекты.

Некоторые особенности поведения квантовых систем можно предсказать заранее, так как их механизм имеет классическое объяснение. Другие особенности не имеют такого объяснения и даже противоречат классической интуиции - их мы называем квантовыми эффектами. Квантовые эффекты можно разделить на три группы:

1. Парадоксальное изменение во времени величины амплитуды: эффект DAT (dephasing assisted transport), квантовое бутылочное горлышко, быстрые квантовые алгоритмы, темные состояния атомов, оптическая темнота сетей, термические аттракторы.

2. Квантовое превосходство за счет парадоксального дальнего действия: распределенные вычисления, телепортация.

3. Возможность введения микро-причинности в связанных состояниях атомных ансамблей.

Важнейшей темой для квантовой операционной системы является явное включение в нее электромагнитного поля на уровне его квантов - фотонов. Классическое состояние поля есть отображение вида $R^4 \rightarrow R^4$ пространства - времени в 4-вектор

поля: $\phi(R, t)$, $\vec{A}(R, t)$. Для получения дискретизации K этого классического пространства состояний поля надо а) разбить пространство R^3 и время t на конечное число отрезков, предварительно ограничив рассматриваемую область, как это делалось в первой главе, б) проделать ту же процедуру и с самим значением поля, то есть со скалярным потенциалом ϕ и векторным потенциалом \vec{A} (см. [3]). И только после такой гигантской процедуры рассмотреть отображения вида $|\Psi_{field}\rangle : K \rightarrow C$, то есть вектор состояния поля.

Мы видим необозримую сложность такой процедуры. Она преодолевается в квантовой электродинамике с помощью ряда приемов, сводящихся к учету интерференции, сразу удаляющей океан паталогических состояний и радикально упрощающей возникающие состояния, на которых концентрируется львиная доля амплитуды. Например, можно показать, что вектор состояния одного фотона есть отображение, концентрирующее амплитуду на классическом состоянии $\epsilon \exp(i\omega(x - ct))$, где ϵ - малое число (откуда иногда делают формально некорректный вывод о том, что это и есть волновая функция фотона).

Сложность квантового представления поля - основная причина того, что поле фактически не включается в модели молекул, или включается в сильно урезанном виде - как кулоновское. Такие модели не могут правильно отобразить динамику, потому что она связана с векторным потенциалом \vec{A} , тогда как кулоновское электростатическое поле связано со скалярным потенциалом ϕ .

Приемы традиционной квантовой электродинамики не подходят для исследования квантового компьютера именно из-за своей специализации, нацеленной на только лишь малое число зарядов, или большое число зарядов с *одинаковым поведением*, то есть на простые системы.

К счастью, есть путь редукции сложности представления поля, открытый Джейнсом и Каммингсом. Эту схему мы и изучим в данной главе.

2.1 Моды электромагнитного поля

Уравнения Максвелла, описывающие электромагнитное поле, можно свести к наборам связанных друг с другом гармонических осцилляторов. Применяя к этим осцилляторам каноническое преобразование в виде преобразования Фурье, можно свести поле к наборам независимых гармонических осцилляторов, каждый из которых характеризуется определенной модой, то есть парой вида $(\vec{p}, \vec{\epsilon})$, где \vec{p} - вектор "импульса поля", равный по модулю $\hbar\omega/c$, где c - скорость света, ω - частота соответствующего осциллятора, $\vec{\epsilon}$ - направление поляризации. За деталями читатель может обратиться к книге [3].

Квантовое представление поля заключается в квантовании каждого из этих независимых осцилляторов; читатель может сам проделать вычисления, следуя указаниям в параграфе "Квантовый гармонический осциллятор" в Приложении. Тогда каждая мода распадается на кванты возбуждений - фотоны данной моды, и мы считаем вектор \vec{p} - вектором импульса фотона этой моды, а ω - его частотой. Фотоны разных мод различимы между собой, а фотоны в одной моде неотличимы друг от друга. Таким образом, базисными состояниями одной моды поля будут состояния вида $|n\rangle$,

где n - число фотонов в данной моде. Эти состояния называются состояниями Фока.

Квантовое состояние данной моды поля будет, таким образом, суперпозицией фоковских состояний. Например, для любого комплексного числа α состояние

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (2.1)$$

называется когерентным состоянием поля; оно испускается идеальным лазером.

Читателю предлагается вычислить среднее число фотонов в состоянии $|\alpha\rangle$ и определить, для какого из операторов a , a^+ данное состояние является собственным. Определение операторов a и a^+ дано в Приложении, параграф А.2.

Заметим, что фоковские состояния не зависят ни от классической пространственной координаты, ни от времени: при каноническом преобразовании мы перешли к базисным состояниям, которые соответствуют импульсам, так что фиксация моды есть фиксация "импульса" гармонического осциллятора, представляющего поле. Отметим также, что каноническое преобразование не есть переход к другому базису в гильбертовом пространстве - базис тот же самый, просто порядок векторов в нем другой, то есть кубиты числовых представлений, которые как раз и определяют порядок на базисных векторах, уже имеют другой смысл. Это будет более подробно обсуждаться в третьей главе.

Деление поля на моды условно и зависит от выбора зерна пространственного разрешения dx , которое, в частности, зависит от детектора. Например, если рассматривать поле, заключенное внутри оптической полости (резонатора), фотоны в нем будут неразличимыми. Но если выпустить их из полости и детектировать на некотором расстоянии, то они могут стать и различимыми: их траектории далеко разойдутся и они попадут в разные детекторы.

2.2 Модель Джейнса-Каммингса

Трудность экспериментального учета электромагнитного поля состоит в том, что его кванты возбуждения путешествуют со скоростью света, так что едва появившись, фотон через секунду уже преодолеет большую часть расстояния от Земли до Луны. Метод удержания фотонов идейно прост: надо расположить друг напротив друга зеркала, отражающие фотон, так, чтобы он бегал между ними и не улетал далеко в течение достаточно большого времени. Это устройство называется интерферометром Фабри-Перо. Два зеркала образуют своеобразную полость, или резонатор, в который фотон можно запустить с помощью лазера, и извлечь с помощью зеркала с переменной отражательной способностью; такое зеркало называется ячейкой Поккельса. На ячейку можно подать напряжение, тогда она начнет отражать упавший на нее фотон; при выключенном же напряжении она становится прозрачной и фотон проходит через нее свободно. Боковые стенки полости также делают из отражающего свет материала.

Если в такую оптическую полость поместить атом, он сможет взаимодействовать с полем внутри полости, если для каких-то уровней энергии его электронов, которые

мы обозначаем через $|0\rangle$ - условно основной, и $|1\rangle$ - условно возбужденный уровни, энергия перехода между этими уровнями $\Delta E = \hbar\omega$ такова, что ω очень точно приближает частоту фотона в полости. При этом при поглощении фотона атом переходит от основного состояния $|0\rangle$ к возбужденному $|1\rangle$, и наоборот, при обратном переходе атома происходит испускание фотона. Полный цикл взаимодействия атома с полем, включающий поглощение атомом фотона и последующее его испускание, называется осцилляцией Раби. Для того, чтобы произошла одна такая осцилляция, например, в атоме рубидия Rb^{85} , где частота перехода между уровнями составляет примерно $\omega_{Rb} \approx 10^{10} \text{ sek}^{-1}$ фотон должен удерживаться в полости достаточно долго, так что за это время он успевает отразиться от зеркал несколько десятков тысяч раз. Поэтому зеркала должны быть очень качественными; их делают из сверхпроводящего материала, например, ниобия, и они функционируют при очень низкой температуре жидкого гелия.

Но качества зеркал недостаточно, так как фотон может просочиться из полости за счет своей интерференционной природы. Эта природа следует из принципа интерференции, который мы кратко описали в первой главе. Я рекомендую читателю обратиться к детальному разъяснению действия этого принципа по отношению к фотонам, приведенному в книге Р.Фейнмана [2]. Для того, чтобы фотон долго оставался в полости, необходимо, чтобы создаваемое им электрическое поле конструктивно интерферировало само с собой внутри полости, и деструктивно - вне ее. Это обеспечивается длиной полости - расстоянием между зеркалами L . Длина должна быть кратной полуволне длины фотона, то есть $L = k\lambda/2$, где $\lambda = 2\pi c/\omega$, $k = 1, 2, \dots$

Помещенный в полость атом взаимодействует с полем с энергией взаимодействия g , которая вычисляется по формуле

$$g = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{V}} dE(x), \quad (2.2)$$

где V - эффективный объем полости (объем, где присутствует фотон), d - абсолютная величина дипольного перехода \bar{d} между $|0\rangle$ и $|1\rangle$, $E(x)$ - фактор расположения атома внутри полости. Цель состоит в том, чтобы сделать g как можно больше, для возможно быстрого проявления свойств взаимодействия света и вещества. Поэтому длина полости должна выбираться так, что $k = 1$, и $L = \lambda/2$. В этом случае конструктивная интерференция электрического поля фотона внутри полости максимальна, и его напряженность распределена по синусоиде, так что $E(x) = \sin(\pi x)/L$.

Дипольный переход считается по формуле $\bar{d} = \int_{R^3} \psi_0^* \bar{r} \psi_1 d\bar{r}$, где ψ_0 , ψ_1 - волновые функции состояний электрона в основном и возбужденном состояниях внутри атома, зависящие от трехмерного вектора \bar{r} . Фактический вывод формулы (2.2) можно найти в книге [3]. Константа g , вообще говоря, комплексна, но можно с помощью домножения базисного вектора $|1\rangle$ на подходящее комплексное число $e^{i\phi}$ добиться, чтобы g было вещественным неотрицательным числом, что мы и будем в дальнейшем предполагать.

Таким образом, взаимодействие поля с атомом внутри полости есть взаимодействие атома с квантовым гармоническим осциллятором, описанным в Приложении. Из параграфа А.2 Приложения вытекает, что условная "координата" x поля с точностью до констант выражается через операторы рождения a^+ и уничтожения a фотона в поле как $x = a^+ + a$.

Введем, аналогично полевым операторам, операторы σ^+ , σ - атомные операторы возбуждения и релаксации; у нас получится набор операторов поля и атомов вида

$$\begin{aligned} a : |n\rangle_{ph} &\rightarrow \sqrt{n}|n-1\rangle_{ph}, & a^+ : |n\rangle_{ph} &\rightarrow \sqrt{n+1}|n+1\rangle_{ph}, \\ \sigma : |0\rangle_{at} &\rightarrow 0, & |1\rangle_{at} &\rightarrow |0\rangle, \\ \sigma^+ : |0\rangle_{at} &\rightarrow |1\rangle_{at}, & |1\rangle_{at} &\rightarrow 0, \end{aligned} \quad (2.3)$$

так что число фотонов $n = 0, 1, 2, \dots$, а число, характеризующее атомное возбуждение, принимает только два значения 0 или 1, причем релаксация σ атома, уже находящегося в основном состоянии $|0\rangle_{at}$, приводит к уничтожению состояния как такового (ноль в пространстве состояний), а возбуждение уже возбужденного состояния атома дает тот же результат; в остальных случаях операторы действуют естественным образом.

Введем условную "координату" атомного возбуждения X по аналогии с полевой "координатой": $X = \sigma^+ + \sigma$. Пусть взаимодействие поля с атомом обозначается через $G(x, X)$, где x , X - условные "координаты" поля и атомного возбуждения соответственно. Раскладывая эту функцию в ряд Тейлора, мы видим, что самый младший член взаимодействия, содержащий обе координаты, имеет вид $g x X = g(a^+ + a)(\sigma^+ + \sigma)$. Это называется дипольным приближением взаимодействия атома и поля. Оно справедливо, если размер атома существенно меньше длины волны фотона; такое предположение выполняется в большинстве практически важных случаев, например, в химии.

Если учесть следующие члены в разложении Тейлора функции $G(x, X)$, получатся более высокие члены в приближении взаимодействия; ими мы не будем заниматься.

Собственные энергии атома и поля, согласно Приложению, даются формулами $E_{at} = \hbar\omega\sigma^+\sigma$, $E_{ph} = \hbar\omega a^+a$. Энергию вакуумного состояния $\hbar\omega/2$ мы опускаем, так как в данном случае она не играет роли.¹ Суммируя их с энергией взаимодействия, мы получаем гамильтониан Джейнса-Каммингса для двух-уровневого атома в оптической полости:

$$H_{JC} = \hbar\omega a^+a + \hbar\omega\sigma^+\sigma + g(a^+ + a)(\sigma^+ + \sigma). \quad (2.4)$$

Решать задачу Коши для уравнения Шредингера с таким гамильтонианом довольно сложно. Дело в том, что взаимодействие содержит члены $a\sigma$ и $a^+\sigma^+$, которые по отдельности не сохраняют энергию. Это означает, что для потенциально бесконечной матрицы оператора H_{JC} нет конечномерных инвариантных подпространств, и приходится иметь дело с бесконечностями, что затруднительно и неверно по существу.

К счастью, эта трудность обходится для большей части приложений, где сила взаимодействия g мала по сравнению с энергией возбуждения $\hbar\omega$ атома. Если $g/\hbar\omega \ll 1$, не сохраняющие энергию члены можно отбросить, и гамильтониан примет гораздо

¹Читателю предоставляется проверить, что добавление константы к гамильтониану, то есть переход от H к $H + cI$, приводит только к появлению дополнительного фазового множителя вида $e^{-ict/\hbar}$ в решении уравнения Шредингера, который не имеет физического смысла и исчезает при переходе к уравнению Шредингера для матрицы плотности.

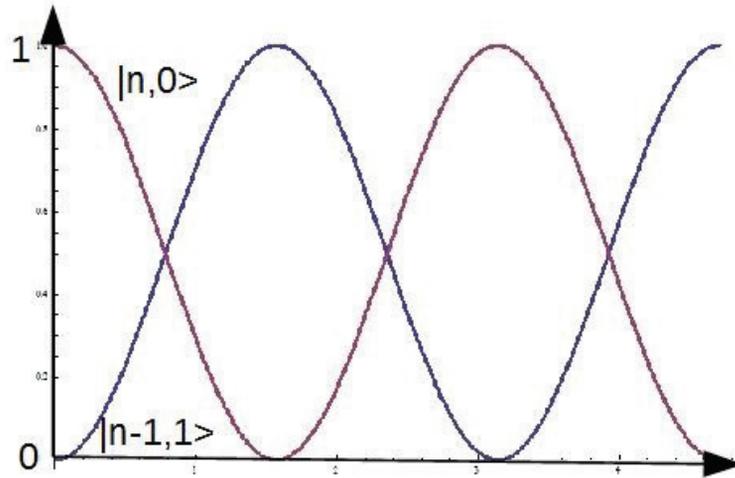


Рис. 2.1: Осцилляции Раби между населенностями состояний $|n, 0\rangle$ и $|n - 1, 1\rangle$.

более удобный вид

$$H_{JC}^{RWA} = \hbar\omega a^+ a + \hbar\omega \sigma^+ \sigma + g(a^+ \sigma + a \sigma^+). \quad (2.5)$$

Это так называемое приближение вращающейся волны RWA, его вывод можно найти в Приложении.

Наша физическая система - композитная. Она состоит из двух частей: поля и атома. Договоримся обозначать базисные состояния, выписывая сначала число фотонов в поле, а затем - атомное возбуждение: $|n, m\rangle$, так что $n = 0, 1, 2, \dots$, $m = 0, 1$, и опускать нижние индексы ph и at . При записи операторов примем обычно соглашение: если не указан оператор, действующий на другой элемент композитной системы, он предполагается оператором идентичным: I_{at} или I_{ph} . Таким образом, например, запись $a^+ a$ надо трактовать как $a^+ a \otimes I_{at}$, а запись $a \sigma^+$ - либо как $a \otimes \sigma^+$, либо как матричное произведение $a \otimes I_{at} \cdot I_{ph} \otimes \sigma^+$. Проверьте, что оба пути дают один и тот же результат.

Для гамильтониана H_{JC}^{RWA} пространство квантовых состояний распадается в прямую сумму инвариантных двумерных подпространств \mathcal{H}_n , каждое соответствует энергии $E_n = \hbar\omega n$, и порождается векторами $|n, 0\rangle$, $|n - 1, 1\rangle$. Гамильтониан, ограниченный на \mathcal{H}_n , имеет вид

$$H_n = \begin{pmatrix} \hbar\omega n & g\sqrt{n} \\ g\sqrt{n} & \hbar\omega n \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

Выражение (2.6) говорит о том, что состояния $|n, 0\rangle$ и $|n - 1, 1\rangle$ переходят одно в другое в ходе эволюции, причем их населенность меняется по синусоидальному закону (см. рисунок 2.1).

Отсюда видно, что населенности состояний $|n, 0\rangle$ и $|n - 1, 1\rangle$ чередуются, колеблясь в противофазе. Если на одной из вершин графика населенности состояния $|n, 0\rangle$ каким-то образом извлечь из полости фотоны (это делается с помощью специального

оптического зеркала - ячейки Поккельса), то атом останется в полости в основном состоянии. Это важное замечание пригодится нам в дальнейшем, при конструировании квантового гейта coCSign.

2.3 Декогерентность в модели Джейнса-Каммингса

Оптические полости никогда не могут быть идеальными: фотоны способны как "просачиваться" сквозь их стенки - за счет интерференции, так и попадать в полость извне - также за счет интерференции. Кроме того, в экспериментах в полость попадают фотоны, испущенные лазером, равно как и детектируются с помощью фотодетектора фотоны, вылетающие из полости. Все эти процессы есть взаимодействие с окружением, и потому они должны описываться квантовым основным уравнением (1.35).

Рассмотрим сначала самый простой случай, когда в полости в первоначальный момент находится один фотон и атомов нет вообще. Гамильтониан тогда имеет вид $H_{ph} = \hbar\omega a^\dagger a$, а линдбладовский оператор утечки фотона из полости $A_1 = a$ является здесь единственным фактором декогерентности. Предполагается, что фотон, вылетевший из полости, оказывается в некотором, воображаемом, резервуаре, который мы будем называть стоком, причем этот процесс утечки необратим, и вылетевший фотон уже никогда не сможет вернуться обратно в полость. Физически это означает, например, что вылетевший фотон попадает в фотодетектор, где и оканчивает свое существование как отдельная частица. Базисные состояния фотона имеют вид $|0\rangle$ - фотона в полости нет, и $|1\rangle$ - фотон в полости. Матрица плотности имеет вид

$$\begin{pmatrix} p_0(t) & \beta(t) \\ \bar{\beta}(t) & p_1(t) \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

где $p_0(0) = 0$, $p_1(0) = 1$. Уравнение (1.35) в нашем случае имеет вид

$$i\hbar\dot{\rho} = [H_0, \rho] + i\gamma(a\rho a^\dagger + \frac{1}{2}(\rho a^\dagger a + a^\dagger a\rho))$$

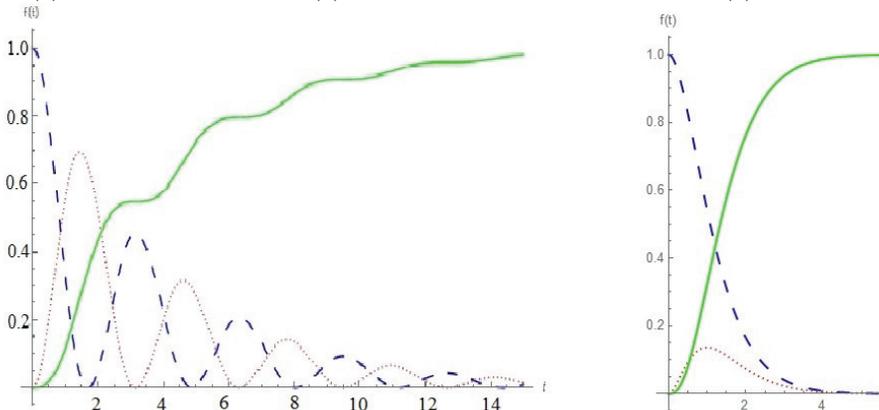
и его можно решить аналитически. Это решение дает $\beta(t) = 0$, $p_1(t) = e^{-\gamma t} \rightarrow 0$ ($t \rightarrow \infty$), $p_0(t) = 1 - p_1(t) \rightarrow 1$ ($t \rightarrow \infty$) (прделайте выкладки самостоятельно).

Рассмотрим теперь немного более сложный процесс утечки фотона из полости с одним двухуровневым атомом, первоначально находящимся в возбужденном состоянии $|1\rangle$ в отсутствие фотонов в полости. Линдбладовский оператор утечки фотона из полости $A_1 = a$ является здесь снова единственным фактором декогерентности. Эту задачу также можно решить аналитически (см. [20]). Базисных состояний системы будет теперь три: $|10\rangle$ - фотон в полости, атом в основном состоянии, $|01\rangle$ - атом возбужден, фотона нет, $|00\rangle$ - фотона нет и атом в основном состоянии. Матрица плотности, соответственно, будет иметь вид

$$\begin{pmatrix} p_{00}(t) & \xi(t) & \alpha(t) \\ \bar{\xi}(t) & p_{01}(t) & \beta(t) \\ \bar{\alpha}(t) & \bar{\beta}(t) & p_{10}(t) \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

При численном моделировании важно иметь в виду следующее

Рис. 2.2: Динамика диагонали матрицы плотности: левый рисунок - для $g_{out} = 0.5, g_1 = 1$, правый - для $g_{out} = 1, g = 1$. Зеленым цветом изображена зависимость $p_{00}(t)$, пунктиром - $p_{01}(t)$, точечным пунктиром $p_{10}(t)$.



Замечание. Здесь мы фактически редуцировали пространство состояний, исходя из физического смысла задачи до размерности 3. Поэтому применять наше условие о трактовке слагаемых гамильтониана как $a^+a \otimes I_{at}$ (см. выше) уже нельзя. Для того, чтобы это условие можно было применить, надо добавить к нашим состояниям еще одно: $|11\rangle$ - фотон в полости и атом возбужден, так как тензорное произведение пространств состояний поля и атома требует еще и этого состояния, которое у нас никогда не появится в реальной эволюции.

Результат показан на рисунке 2.2.

Заметим, что в обоих рассмотренных случаях - полость без атома и полость с одним атомом, сток со временем наполняется полностью, то есть $p_{00}(t) \rightarrow 1$ ($t \rightarrow \infty$), хотя скорость его наполнения зависит от интенсивности γ вылета фотона из полости. Читателю предлагается осмыслить тот факт, что $\alpha(t) = \beta(t) = 0$ при любых t . Отсутствие когерентностей связано с необратимостью вылета фотона из полости: вылетевший фотон никак не может интерферировать с оставшимся в полости. Отметим также, что в случае отсутствия атома в полости наполнение стока тем больше, чем больше его интенсивность γ .

2.4 Квантовое бутылочное горлышко

Для модели Джейнса-Каммингса имеет место один важный контр-интуитивный эффект с чисто квантовым механизмом - квантовое бутылочное горлышко.

Если мы присоединим к нашей полости сток (sink) явным образом, взаимодействие полости со стоком будет описываться квантовым основным уравнением с одним фактором декогерентности $A_1 = a_{sink}^+ a$, означающим исчезновение фотона в полости и появление его в стоке, то есть необратимый улет фотона из полости. Интенсивность γ этого фактора есть интенсивность улета фотона из полости. Эту интенсивность можно менять, например, ставя дополнительные ячейки Погкельса в полость, что повышает γ , или уменьшая площадь ячейки, что уменьшает γ .

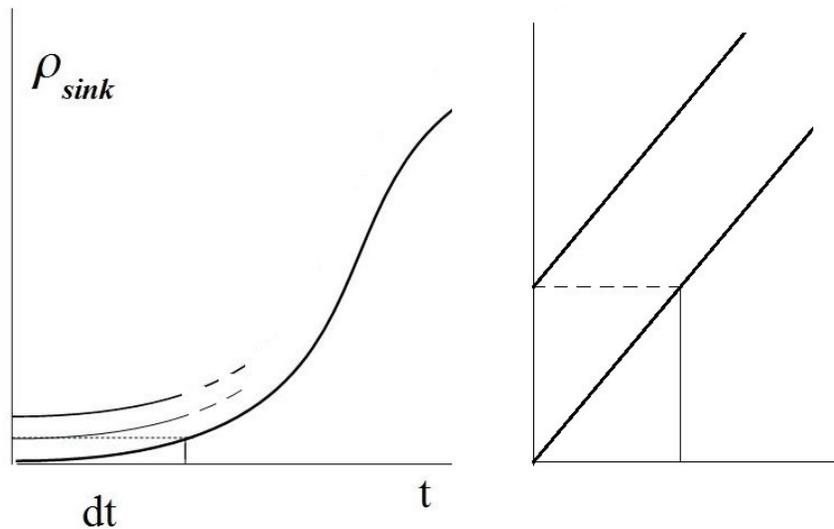


Рис. 2.3: Квантовое бутылочное горлышко: ρ_{sink} - наполнение стока - слева в квантовом случае, справа - в классическом. В квантовом случае наполнение стока тормозится из-за того, что график касается оси абсцисс.

Базисными состояниями системы будут $|n\rangle_{cav}|n'\rangle_{sink}|m\rangle_{at}$, где n, n' - число фотонов в полости и в стоке. Ограничим размерность, предположив наличие RWA и выбирая начальное состояние в виде $|0\rangle|0\rangle|1\rangle$ - когда фотонов нет, а атом возбужден; в этом случае динамика будет развиваться в трехмерном пространстве, порожденном векторами $|001\rangle, |010\rangle, |100\rangle$. Пусть $\rho(t)$ - матрица плотности нашей системы. Населенность стока $\langle 010|\rho(t)|010\rangle$ (вероятность нахождения в нем фотона) характеризует динамику вылета фотона из полости.

Оказывается, что присутствие атома в полости меняет динамику наполнения стока очень существенно: наполнение стока зависит от интенсивности вылета фотона немонотонно. При некоторой величине γ сток наполняется наиболее быстро, но при дальнейшем увеличении γ его наполнение парадоксальным образом снижается, причем при $\gamma \rightarrow \infty$ наполнение стока падает практически до нуля! Это и есть квантовое бутылочное горлышко.

Объяснение этого эффекта дано на рисунке 2.3. График наполнения стока касается оси абсцисс, так как без стока динамика присутствия фотона в полости имела бы квадратичный вид в силу правила Борна. После применения супероператора Линдблада в течение времени dt фотон в полости исчезает, что означает сдвиг элемента матрицы плотности снова в ноль; эффект для стока будет, таким образом, бесконечно малой второго порядка по dt . Так как при численном решении квантового основного уравнения повышение интенсивности фактически эквивалентно уменьшению времени одного шага dt при фиксации интенсивности улета γ , то повышение интенсивности стока ведет к уменьшению наполнения полости, что и показывает численное моделирование данного эффекта. Эффект квантового бутылочного горлышка имеет место и для нескольких полостей, соединенных волноводами (см. 2.9). Результат моделирования этого эффекта для 2 полостной системы показан на рисунке 2.4.

Этот эффект похож на "замораживание" квантового состояния постоянными из-

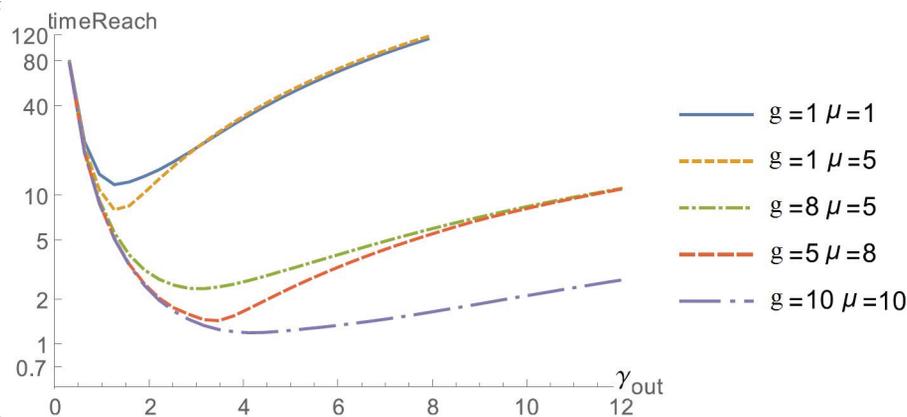


Рис. 2.4: Квантовое бутылочное горлышко для системы двух полостей с атомами, взаимодействующими с полем с энергией g , соединенных волноводом с энергией перехода μ (в условных единицах). Время наполнения стока до $s = 0.995$ в зависимости от силы стока γ_{out} всегда имеет локальный минимум в противоположность классическому случаю, где эта функция всегда убывает. При $\gamma_{out} \rightarrow \infty$ в квантовом случае график стремится к бесконечности. Рисунок взят из статьи [20].

мерениями - эффект Зенона, однако бутылочное горлышко более конкретно и потому может иметь применение в различных областях; например, в атомных превращениях.

Пусть атом, находящийся в возбужденном состоянии, может трансформироваться, превратившись в иной объект, и потерять, тем самым, возможность взаимодействия с полем полости. Такой трансформацией может быть химическая реакция или распад атомного ядра. Вылет фотона из полости можно назвать ее оптическим "охлаждением". Проявление эффекта бутылочного горлышка здесь состоит в том, что усиление интенсивности оптического "охлаждения" ведет не к уменьшению вероятности трансформации атома, а напротив - к ее увеличению.

Эффект полностью сохраняется и в случае многоатомных ансамблей. Возможно, квантовый эффект бутылочного горлышка способен играть какую-то роль и в процессах макроскопических масштабов, представляющих практический интерес, приводя к контринтуитивным последствиям.

2.5 Модель Тависа-Каммингса

Модель Джейнса-Каммингса-Тависа (ТС) описывает динамику группы n двухуровневых атомов в оптической полости, взаимодействующих с одномодовым полем внутри нее с энергиями g_1, g_2, \dots, g_n . Значение этой модели в том, что она позволяет описать очень сложное в вычислительном плане взаимодействие света и вещества в рамках конечномерной вычислительной модели, допускающей, к тому же, физические прототипы, среди которых самый разработанный имеет вид оптической полости - резонатора и группы атомов, удерживаемых в нем оптическими пинцетами.

Введем вспомогательные операторы $\bar{\sigma} = \sum_{j=1}^n g_j \sigma_j$, $\bar{\sigma}^+ = \sum_{j=1}^n g_j \sigma_j^+$. Гамильтониан Тависа-Каммингса (см. [21],[22],[23]) H_{TC}^{RWA} для n двухуровневых атомов в оптиче-

ской полости, частота которой совпадает с частотой фотона атомного возбуждения имеет вид:

$$H_{TC} = H_c + H_a + H_i, \quad H_c = \hbar\omega a^+ a, \quad H_a = \hbar\omega \sum_{j=1}^n \sigma_j^+ \sigma_j, \quad H_i = (a^+ + a)(\bar{\sigma}^+ + \bar{\sigma}). \quad (2.9)$$

В условиях применимости RWA приближения: $g_j/\hbar\omega \ll 1$ для всех j энергия взаимодействия поля и атомов принимает вид $H_i^{RWA} = g_j(a\bar{\sigma}^+ + a^+\bar{\sigma})$.

Итак, атомы в данной модели взаимодействуют друг с другом только через поле, то есть через обмен фотонами.²

2.6 Темные состояния кубитовых систем

Наличие нескольких атомов в полости создает совершенно новую ситуацию, делая возможным существование особых состояний атомной системы, при которых интерференция атомов блокирует их взаимодействие с полем. Например, состояние $|s\rangle = |01\rangle - |10\rangle$ двухатомной системы при $g_1 = g_2$, называемое синглетом, не может ни испустить, ни поглотить фотона, так как возможное испускание фотона одним из атомов блокируется аналогичной возможностью со стороны другого. Действительно, поскольку фотоны в полости для всех атомов общие, испускание фотона вторым атомом есть применение $\sigma_2 a^+$, оно приведет от $|0\rangle_{ph}|s\rangle$ к состоянию $|1\rangle_{ph}|00\rangle$, а испускание фотона первым атомом (применение $\sigma_1 a^+$) даст $-|1\rangle_{ph}|00\rangle$, в итоге никакого испускания фотона не произойдет вообще!

Темным состоянием атомной системы называется такое состояние, в котором атомы не могут испустить фотона. Прозрачным называется такое состояние, в котором атомы не могут поглотить фотона. Невидимым - такое, в котором атомы не могут ни поглотить, ни испустить фотона, то есть вообще не взаимодействуют с полем. Эти определения зависят от применимости RWA.

Рассмотрим сначала случай применимости RWA.

Испускание фотона есть оператор $\bar{\sigma} a^+$, и потому подпространство темных состояний $Dark^{RWA}$ есть ядро оператора $\bar{\sigma}$: $Dark^{RWA} = Ker(\bar{\sigma})$. Аналогично, подпространство прозрачных состояний $Trans^{RWA} = Ker(\bar{\sigma}^+)$ и подпространство невидимых $Invis^{RWA} = Ker(\bar{\sigma}) \cap Ker(\bar{\sigma}^+)$.

Теперь рассмотрим случай точного гамильтониана H_{TC} . Здесь оператор испускания фотона уже имеет вид $\bar{\sigma}^+ + \bar{\sigma}$ и совпадает с оператором поглощения фотона. Поэтому в точном решении темные, прозрачные и невидимые состояния - одно и то же $Dark = Trans = Invis = Ker(\bar{\sigma}^+ + \bar{\sigma})$. Поскольку для любого атомного состояния $|\Psi\rangle_{at}$ его образы при применении операторов $\bar{\sigma}^+$ и $\bar{\sigma}$ не имеют общих ненулевых базисных компонент, мы получаем $Ker(\bar{\sigma}^+ + \bar{\sigma}) = Ker(\bar{\sigma}) \cap Ker(\bar{\sigma}^+)$ и $Dark = Invis^{RWA}$.

²В модель ТС можно включить и прямое, диполь-дипольное взаимодействие атомов друг с другом, добавив в гамильтониан слагаемые вида $\beta_{i,j}(\sigma_i \sigma_j^+ + \sigma_i^+ \sigma_j)$, а также учесть аналогичным образом и нелинейные оптические эффекты.

Пусть $|j\rangle$ - базисное состояние системы n кубит; введем обозначение $N = 2^n$ - это размерность всего пространства квантовых состояний n -кубитной системы. Обозначим через $1(j)$ вес Хамминга этого состояния, то есть число единиц в его записи; тогда число нулей в ней будет $0(j) = n - 1(j)$. Определим бинарное отношение на базисных состояниях, обозначаемое через $Emission(j, j')$, которое будет истинным тогда и только тогда, когда j' получается из j заменой одной единицы нулем. Иными словами, j' получается из j действием понижающего оператора на один из атомов, находящихся в возбужденном состоянии. В этом случае $1(j') = 1(j) - 1$. Испускание фотона атомной системой, находящейся в состоянии $|j\rangle$, имеет вид

$$|0\rangle_p |j\rangle \longrightarrow |1\rangle_p |j'\rangle, \quad (2.10)$$

где истинно $Emission(j, j')$.

Для базисного состояния $|j'\rangle$ назовем j' -семьей множество базисных состояний $|j\rangle$, таких что истинно $Emission(j, j')$. Иными словами, j' -семья состоит из базисных состояний $|j\rangle$, для которых переход вида (2.10) является испусканием фотона. j' -семью мы обозначаем через $[j']$ и называем состояние $|j'\rangle$ ее родоначальником.

Заметим, что две различные семьи могут иметь не более одного общего члена.

Рассмотрим теперь произвольное атомное состояние $|\Psi\rangle = \sum_j \lambda_j |j\rangle$. Из определения испускания фотона следует, что состояние $|\Psi\rangle$ темное в RWA приближении тогда и только тогда, когда выполнена система уравнений вида

$$\sum_{s \in [j']} \lambda_s = 0, \quad (2.11)$$

для всех $j' = 0, 1, \dots, 2^n - 1$. Заметим, что достаточно потребовать выполнение данных равенств только для $j' = 0, 1, \dots, 2^n - 2$, так как семья $[2^n - 1]$ пуста: в базисное состояние, состоящее из одних возбужденных атомов при испускании фотона никакое состояние перейти не может.

Обозначим через B_k^n множество базисных n -кубитных состояний j , таких что $1(j) = k$, и через \mathcal{H}_k^n - порожденное B_k^n подпространство. Тогда для любого базисного состояния j' его семья целиком принадлежит $B_{1(j')+1}^n$. Следовательно, всякое темное состояние является суперпозицией темных состояний, принадлежащих подпространствам \mathcal{H}_k^n , $k = 0, 1, \dots, n - 1$. Обозначим через D_k^n подпространство \mathcal{H}_k^n , состоящее из темных состояний в RWA приближении. Тогда $D_k^n = \mathcal{H}_k^n \cap Ker(\bar{\sigma})$.

Мы всегда будем нумеровать кубиты слева направо, обозначая символом $*$ пропущенный кубит, так что, например, вместо $|0\rangle_1 |1\rangle_3$ пишем $|0 * 1\rangle$.

Примерами состояний из D_k^n являются так называемые (n, k) -синглеты: состояния, полученные тензорным произведением k штук состояний вида $|0\rangle_p |1\rangle_q - |1\rangle_p |0\rangle_q$, где $1 \leq p < q \leq n$ и $n - 2k$ состояний вида $|0\rangle_q$, $1 \leq q \leq n$. Для $n = 4$, $k = 2$ (n, k) -синглетами будут следующие состояния

$$\begin{aligned}
(4, 2)_1 &= (|0 * 1 * \rangle - |1 * 0 * \rangle)(| * 0 * 1 \rangle - | * 1 * 0 \rangle) \\
&= |0011\rangle - |0110\rangle - |1001\rangle + |1100\rangle, \\
(4, 2)_2 &= (|0\rangle|1\rangle - |1\rangle|0\rangle)^{\otimes 2} = |0101\rangle - |0110\rangle - |1001\rangle + |1010\rangle, \\
(4, 2)_3 &= (|0 * * 1 \rangle - |1 * * 0 \rangle)(| * 0 1 * \rangle - | * 1 0 * \rangle) \\
&= |0011\rangle - |0101\rangle - |1010\rangle + |1100\rangle.
\end{aligned} \tag{2.12}$$

Эти состояния будут линейно зависимы, но любые два из них - линейно независимы и образуют базис D_2^4 , что легко проверить непосредственно.

Заметим, что при $n = 2k$ все (n, k) - синглеты невидимы без RWA приближения.

Теорема о структуре темных состояний

1. $\dim(D_k^n) = \max\{C_n^k - C_n^{k-1}, 0\}$.
2. Любое состояние из D_k^n является линейной комбинацией (n, k) - синглетов

Доказательство этой теоремы приведено в Приложении - А.4.

Отметим, что для трех-уровневых систем доказать аналогичное данной теореме утверждение пока не удалось³.

Описание собственных состояний для гамильтониана Тависа- Каммингса приведено в диссертации Михаеля Тависа [23]; оно весьма сложно. Однако практический смысл имеет именно описание темных состояний атомных ансамблей. Добавление к этим состояниям фотонов позволяет получать собственные состояния этого гамильтониана, имеющие ясный практический смысл: в таких состояниях нет взаимодействия поля с атомами. Такое взаимодействие является главным каналом декогерентности - разрушения сложных квантовых состояний в результате контакта с окружением. Поэтому темные состояния представляют естественное подпространство, свободное от декогерентности, что важно для квантовых вычислений. Темные состояния являются также естественными аккумуляторами малых порций энергии, что может представлять интерес при создании нано-роботов.

2.7 Термическая стабилизация

Рассмотрим полость с атомами, помещенную в "ванну" из фотонов, так что имеется постоянный приток и постоянный сток фотонов в полость и из полости соответственно с интенсивностями γ_{in} и γ_{out} (см. 2.5). Соответствующее квантовое основное уравнение (1.35) будет иметь два фактора декогерентности: $A_{out} = a$, $A_{in} = a^\dagger$.

Если для начального состояния $\rho(t)$ системы "атомы+поле" решение (1.35) сходится к некоторой матрице $\rho(t) \rightarrow \rho_{stat}$ ($t \rightarrow \infty$), то данную матрицу ρ_{stat} мы назовем термическим стабилизатором для $\rho(0)$, и все стабилизаторы будем называть термически стабильными состояниями такого уравнения (1.35).

³В работе [24] приведено внешнее, алгебраическое описание темных состояний; но из него нельзя непосредственно получить того явного описания, которое дается приведенной Теоремой даже для двухуровневых атомов.

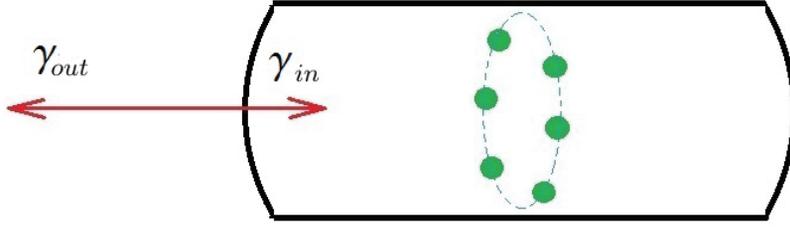


Рис. 2.5: Полость в фотонной "ванне"

Определим стационарное состояние поля с температурой T как смешанное состояние с гиббсовским распределением компонент Фока:

$$\mathcal{G}(T)_f = c \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{\hbar\omega n}{KT}} |n\rangle\langle n|, \quad (2.13)$$

где K - константа Больцмана, c - нормировочный множитель. Введем обозначение $\gamma_{in}/\gamma_{out} = \mu$. Состояние $\mathcal{G}(T)_f$ будет тогда существовать только при $\mu < 1$, поскольку в противном случае температура будет бесконечно большой и состояние $\mathcal{G}(T)_f$ будет ненормируемым.

Населенность фотонного фоковского состояния $|n\rangle$ при температуре T пропорциональна $\exp(-\frac{\hbar\omega n}{KT})$. В нашей модели мы полагаем $\frac{\gamma_{in}}{\gamma_{out}} = \exp(-\frac{\hbar\omega}{KT})$, откуда $T = \frac{\hbar\omega}{K \ln(\gamma_{out}/\gamma_{in})}$.

Сначала заметим, что для нулевой температуры $T = 0$ фотонной "ванны" чистые стационарные состояния квантового основного уравнения (1.35) в модели ТС (ТС-RWA) имеют вид $|0\rangle_{ph}|D\rangle$, где $|D\rangle$ есть темное состояние в соответствующей модели ТС (ТС-RWA). Смешанные стационарные состояния есть смеси таких состояний.

Действительно, стационарные состояния есть решения квантового основного уравнения (1.35) при $\dot{\rho} = 0$, так что $\dot{\rho} = 0$. Представив чистое стационарное состояние $|S\rangle$ в виде суммы по энергиям поля:

$$|S\rangle = |0\rangle_{ph}|\Phi^0\rangle_{at} + |1\rangle_{ph}|\Phi^1\rangle_{at} + \dots + |n\rangle_{ph}|\Phi^n\rangle_{at} + \dots, \quad (2.14)$$

где нижний индекс обозначает поле и атомное состояние, мы видим, что в (2.14) есть лишь один ненулевой член - первый. Из этого немедленно следует, что состояние $|S\rangle$ темное.

Теорема 1 Термически стационарное состояние атомов и поля при температуре T имеет вид $\rho_{stat} = \rho_{ph} \otimes \rho_{at}$, где ρ_{at} есть состояние атомов, а состояние поля $\rho_{ph} = \mathcal{G}(T)_f$ есть стационарное при данной температуре.

Доказательство

Мы разложим гамильтониан $H = H_{at} + H_{ph}$ на атомную часть H_{at} и чисто полевою компоненту $H_{ph} = \hbar\omega a^\dagger a$, и введем обозначения $U_{dt}(\rho) = e^{-\frac{i}{\hbar}H_{at}dt} \rho e^{\frac{i}{\hbar}H_{at}dt}$, $U'_{dt}(\rho) = e^{-\frac{i}{\hbar}H_{ph}dt} \rho e^{\frac{i}{\hbar}H_{ph}dt}$ для действия слагаемых унитарной компоненты правой части квантового основного уравнения (1.35) на коротком отрезке времени dt .

Мы обозначим через $L'_{dt}(\rho) = \rho + dt \mathcal{L}(\rho)$ действие линдбладовского супероператора на матрицу плотности в течение времени dt . С точностью dt мы имеем тогда приближенное равенство

$$\rho(t) \approx (U_{dt} U'_{dt} L'_{dt})^{t/dt}(\rho), \quad (2.15)$$

аналогичное формуле Троттера, которое вытекает из приведенного в первой главе эйлерова метода решения уравнения (1.35).

Поскольку операторы L'_{dt} и U'_{dt} действуют только на полевую компоненту состояния, а U_{dt} - как на полевую, так и на атомную компоненту, стационарное состояние ρ_{stat} при случайно выбранных константах взаимодействия g , и γ_{in} , γ_{out} не должно меняться при действиях операторов $L''_{dt} = U'_{dt} L'_{dt}$, и U_{dt} .

Зафиксируем произвольно базисные состояния атомов I, J и рассмотрим минор ρ_{IJ} матрицы плотности ρ , образованный коэффициентами базисных состояний $|I, i\rangle\langle J, j|$, где $|i\rangle, |j\rangle$ - фокковские состояния поля. Оператор L'_{dt} , действующий на фотонную компоненту, фактически действует на минор ρ_{IJ} .

Обозначим через $\tilde{\rho}$ результат применения оператора L'_{dt} к минору $\rho_{IJ} = \rho$, так что $\tilde{\rho}_{i,j}$ обозначают матричные элементы этого результата и ρ_{ij} - матричные элементы начального состояния ρ ; мы будем нумеровать строки и столбцы этой матрицы начиная с нуля, так что $i, j = 0, 1, 2, \dots$, и опускать обозначения атомных состояний I, J , которые всегда будут одними и теми же. Учитывая определение операторов рождения и уничтожения фотонов, мы имеем:

$$\tilde{\rho}_{ij} = \rho_{ij} + \gamma_{out}(\sqrt{i+1}\sqrt{j+1}\rho_{i+1,j+1} - \frac{i+j}{2}\rho_{ij}) + \gamma_{in}(\sqrt{i}\sqrt{j}\rho_{i-1,j-1} - (\frac{i+j}{2} + 1)\rho_{ij}). \quad (2.16)$$

Мы также имеем $L''_{dt}(\rho) = \rho$, $L''_{dt}(\tilde{\rho}) = \tilde{\rho}$. Оператор U'_{dt} не изменяет диагональных элементов матрицы, а недиагональные он умножает на коэффициент $e^{\pm i\omega(i-j)dt}$. Поскольку коэффициент ω , определяющий фазу, не связан с γ_{in} и γ_{out} из выражения (2.16), это умножение не сможет скомпенсировать в первом порядке по dt изменение ρ_{ij} в (2.16); таким образом, недиагональные элементы матрицы ρ нулевые. Рассмотрим диагональ этой матрицы. Из равенства (2.16) мы имеем:

$$\tilde{\rho}_{ii} = \rho_{ii} + \gamma_{out}((i+1)\rho_{i+1,i+1} - i\rho_{ii}) + \gamma_{in}(i\rho_{i-1,i-1} - (i+1)\rho_{ii}). \quad (2.17)$$

Из уравнения (2.17) мы можем найти рекуррентное уравнение для диагональных элементов, но можно найти их вид и проще. Мы применим к диагонали ρ представление квантовой гидродинамики. Поток вероятности от базисного состояния $|i\rangle\langle i|$ к состоянию $|i+1\rangle\langle i+1|$ есть $(i+1)\rho_{ii}\gamma_{in}$, и обратный поток есть $(i+1)\rho_{i+1,i+1}\gamma_{out}$, из чего мы получаем, что ρ_{ii} пропорционально μ^i , что и требуется.

Подставим теперь выражения для диагональных элементов в выражение (2.17), и найдем $\tilde{\rho}_{ii} = \rho_{ii}$. Так как выбор I, J был произвольным, мы получаем $\rho_{stat} = \mathcal{G}(T)_f \otimes \rho_{at}$, что и требовалось Теорема 1 доказана.

Теорема 2

Если ансамбль состоит из одного атома, то любое термически стационарное состояние имеет вид $\rho_{stat} = a\mathcal{G}(T)_f \otimes (|0\rangle\langle 0| + \mu|1\rangle\langle 1|)_{at}$, где a - нормировочная константа.

Доказательство. Поскольку $[H, \rho_{stat}] = 0$, мы должны рассмотреть спектральное разложение матрицы ρ_{stat} по операторам $|\tilde{0}_n\rangle\langle\tilde{0}_n|$, где $|\tilde{0}_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_n\rangle + |1_n\rangle)$, $|\tilde{1}_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_n\rangle - |1_n\rangle)$ для базисных состояний $|0_n\rangle = |n+1\rangle_{ph}|0\rangle_{at}$, $|1_n\rangle = |n\rangle_{ph}|1\rangle_{at}$, образующих базис двумерного подпространства, инвариантного относительно гамильтониана Джейнса-Каммингса для одноатомного ансамбля. Тогда мы получаем

$$\rho_{stat} = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n |\tilde{0}_n\rangle\langle\tilde{0}_n| + \nu_n |\tilde{1}_n\rangle\langle\tilde{1}_n|. \quad (2.18)$$

Так как по Теореме 1 $\rho_{stat} = \mathcal{G}(T)_f \otimes \rho_{at}$ и фотонная часть $\mathcal{G}(T)_f$ диагональна, в выражении (2.18) нет слагаемых вида $|0_n\rangle\langle 1_n|$ и $|1_n\rangle\langle 0_n|$, так что $\lambda_n = \nu_n$. Используя определение $\mathcal{G}(T)_f$, мы получим требуемое. Теорема 2 доказана.

2.8 Термические аттракторы для двух атомов

Случай двухатомного ансамбля радикально отличается от рассмотренного одноатомного. Уже для двух атомов термическая стабилизация не сводится к сходимости матрицы плотности к термически стационарному состоянию. Термическая стабилизация для нескольких атомов в общем случае носит динамический характер. Решение $\rho(t)$ уравнения (1.35), вообще говоря, сходится к аттрактору - замкнутой траектории в операторном пространстве Лиувилля (см. 1.6). Причина этого - существование темных состояний, которые в случае двух атомов имеют вид синглета $|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle)$.

Мы рассмотрим случай нулевой температуры, когда есть только вылет фотонов из полости. Выберем начальное состояние как $\rho(0) = |\Psi\rangle\langle\Psi|$, для $|\Psi\rangle = |vac\rangle_{ph}|\psi\rangle_{at}$ с вакуумным состоянием поля, где $|\psi\rangle = \alpha|s\rangle + \beta|00\rangle$. Как обычно, мы предполагаем, что энергия основного состояния атомов нулевая. Так как в выбранном начальном состоянии фотон не может быть испущен, мы имеем: $\rho(0) = |\alpha|^2|s\rangle\langle s| + e^{-i\omega t}\alpha\bar{\beta}|s\rangle\langle 00| + e^{i\omega t}\bar{\alpha}\beta|00\rangle\langle s| + |\beta|^2|00\rangle\langle 00|$. Это и есть простейшая форма термического аттрактора для двухатомного ансамбля. Для четырех и более атомов аналогичным образом можно построить и более сложные аттракторы (см. [20]).

Интересно, что аттракторы существуют только при нулевой температуре фотонной "ванны", когда отсутствует приток фотонов, поскольку эти аттракторы связаны с темными состояниями атомного ансамбля; для ненулевого притока фотонов из "ванны" в системе будут наблюдаться только термически стационарные состояния.

2.9 Модель Тависа-Каммингса-Хаббарда

Оптическая полость - искусственное устройство, к тому же достаточно сложное; было бы неплохо с помощью него приблизиться к взаимодействию атомов с полем в естественных условиях. Такое приближение можно получить, если допустить возможность движения как фотонов, так и атомов в пространстве, в частности, выход их за пределы полости. Сначала мы попробуем расширить модель Тависа-Каммингса,

взяв несколько полостей, и соединив их оптическим волокном в граф, так что амплитуда перехода фотона из полости i в полость j будет равна $\mu_{i,j}$; мы также будем считать эти числа вещественными и неотрицательными. Таким образом, атомы не могут покидать своих полостей, а фотоны могут путешествовать по оптическим волокнам из полости в полость по всему графу; это модель Тависа-Каммингса-Хаббарда (ТСН). Пусть $H_{ТСН}^i$ обозначает гамильтониан Тависа -Каммингса для полости с номером $i = 1, 2, \dots, m$. Будем также снабжать нижними индексами номера полости соответствующие ей полевые операторы $a_i^{(+)}$.

Гамильтониан модели ТСН имеет вид

$$H_{ТСН} = \sum_{i=1}^m H_{ТСН}^i + \sum_{1 \leq i < j \leq m} \mu_{ij} (a_i^+ a_j + a_i a_j^+). \quad (2.19)$$

Эта модель ближе к реальности, чем однополостная, так как здесь уже допускается возможность для фотонов стать различимыми, оказавшись в разных полостях.

В модели ТСН также, как и для однополостного случая, имеет место эффект квантового бутылочного горлышка - см. рисунок 2.4.

2.10 Запутывающий гейт в модели JCH

Квантовый компьютер представляет собой вторжение квантовой теории в область сложных процессов, где действие ее основных законов пока не изучено. Поэтому конструирование наиболее простых схем таких вычислений, в которых квантовые законы проявлялись бы как можно яснее, является актуальной задачей. Темное место здесь - декогерентность, возникающая из-за взаимодействия зарядов и поля, кванты которого тесно связывают квантовый компьютер с окружением. Это делает необходимым учет и контроль, или даже явное использование фотонов в квантовых протоколах.

Фотоны как носители информации дают возможность использовать линейные оптические приборы для реализации однокубитных гейтов, но конструирование запутывающих операций трудно, так как фотоны непосредственно не взаимодействуют друг с другом. Есть популярная KLM- схема (см. [25]), где используются измерения в качестве эрзаца взаимодействия, и ее усовершенствование [26] с телепортацией (см. [27]), значительно повышающее ее эффективность, а также ряд вариантов этой схемы для атомов (см., например, [28]). Однако использование классических вероятностных схем при практической реализации предъявляет повышенные требования к эффективности, по крайней мере, теоретической, квантовых гейтов на единичных частицах. Использование классической вероятности затеняет главный вопрос квантового компьютера: как когерентность работает для сложных систем из разных частиц?

Здесь больше подходят наиболее первопринципные методы, главным из которых являются оптические полости с несколькими атомами, взаимодействие которых с одномодовым полем четко описывается из первых принципов (о возможностях данного типа устройств см., например, [29]). Так, гейт CNOT был реализован с использованием внешних - колебательных - степеней свободы атома (см. [30]). Однако суть

квантового компьютеринга - в когерентном поведении не отдельного кубита, а в масштабировании фейнмановского квантового процессора, реализующего теоретические возможности унитарной динамики во всем гильбертовом пространстве состояний, дающее, например, алгоритм Гровера [11] на том же оборудовании, что и алгоритм Шора [5]. Использование внешних факторов для демонстрации динамики отдельных атомов и поля полезно именно для отдельных атомов, но вносимые неизбежные помехи наверняка скажутся при масштабировании.

Поэтому ценность представляют схемы реализации гейтов, использующие минимальные средства, которые хорошо описываются из первых принципов. Одна из таких схем предложена в статье Х.Азумы [31], где в качестве кубитов используются двух-рельсовые состояния единичных фотонов. В этой схеме взаимодействие фотонов с атомами используется лишь для совершения запутывающего преобразования $CSign$, для которого требуется две оптические полости; необходимы также два светоделителя и фазовращатели.

Мы опишем упрощение схемы Азумы, где используется только одна полость, а светоделители заменены временным сдвигом для фотонов, поступающих в нее. Логическими кубитами у нас будут асинхронные состояния атомов в рабиевских осцилляциях. Эту схему можно переделать для чисто фотонных носителей, со временным сдвигом, определяющим значение кубита. Однако атомы как носители информации обладают тем преимуществом, что их гораздо легче контролировать, как и испускаемые ими фотоны. Достоинство предлагаемой схемы в ее простоте. Недостаток, тот же, что и в схеме [31] - зависимость от временной точности срабатывания ячейки Поккельса или ее аналога, время работы которой надо сделать существенно меньше времени рабиевской осцилляции атома в полости.

По техническим причинам мы будем реализовывать гейт $coCSign : |x, y\rangle \rightarrow (-1)^{x(y\oplus 1)}|x, y\rangle$, меняющий знак при единственном состоянии $|10\rangle$, родственной гейту $CSign$, который реализован в [31]; разницы нет никакой, так как $coCSign = CSign\sigma_x(y)$, а однокубитные гейты реализуются линейными оптическими устройствами.

2.11 Расчет фазовых сдвигов

Ядро данной схемы - оптическая полость с одним двухуровневым атомом с энергетической щелью $\hbar\omega$ между основным $|0\rangle$ и возбужденным $|1\rangle$ уровнями, где ω совпадает с частотой фотона определенной моды, удерживаемого в полости. Константа взаимодействия g между атомом и полем предполагается малой: $g/\hbar\omega \ll 1$ (практически, это отношение должно быть не больше 10^{-3}) для возможности применения RWA приближения, в котором гамильтониан Джейнса-Каммингса системы "атом+поле" ([22]) имеет вид

$$H = H_{JC} = H_0 + H_{int}; \quad H_0 = \hbar\omega a^+ a + \hbar\omega \sigma^+ \sigma, \quad H_{int} = g(\alpha^+ \sigma + a \sigma^+), \quad (2.20)$$

где a, a^+ - операторы уничтожения и рождения фотона, σ, σ^+ - релаксации и возбуждения атома. Будем записывать базисные состояния атома и поля в виде $|n\rangle_{ph}|m\rangle_{at}$, где $n = 0, 1, 2, \dots$ - число фотонов в полости, $m = 0, 1$ - число атомных возбуждений. У нас будет $n = 0, 1, 2$. Мы будем рассматривать несколько полостей, и снабжать операторы

полости i нижним индексом i , так что общий гамильтониан будет равен сумме $\sum_i H_i$; взаимодействие атомов с полем H_{int} во всех областях будет тогда равно, соответственно, сумме $\sum_i H_{int i}$. Гамильтониан в ходе выполнения гейта *coCSign* будет меняться: к его слагаемому H_{int} будет добавляться слагаемое вида $H_{jump} = \nu(a_i a_j^+ + a_j a_i^+)$, означающее переход фотона из полости i в полость j и наоборот, но энергия независимых атомов и поля H_0 не изменится (модель Джейнса-Каммингса-Хаббарда JCH). Поэтому набег фазы, связанный с H_0 , будет общим для всех состояний, и его можно игнорировать. Далее мы будем считать набег фазы относительно либо тождественного оператора I , либо относительно σ_x , так как все операции, рассмотренные ниже, сводятся либо к первой, либо ко второй с изменением фазы, так что набег фазы при применении, например, $-i\sigma_x$ составит $-\frac{\pi}{2}$.

Пусть $\tau_1 = \pi\hbar/g$, $\tau_2 = \pi\hbar/g\sqrt{2}$ - периоды рабиевских осцилляций для общей энергии $\hbar\omega$ и $2\hbar\omega$ соответственно. Операторы $U_t = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$, индуцируемые эволюцией в важные моменты времени, будут зависеть от общей энергии полости. Если она равна $\hbar\omega$, в базисе $|\phi_0\rangle = |1\rangle_{ph}|0\rangle_{at}$, $|\phi_1\rangle = |0\rangle_{ph}|1\rangle_{at}$, мы имеем:

$$U_{\tau_1/2} = -i\sigma_x, U_{\tau_1} = -I, U_{2\tau_1} = I, \quad (2.21)$$

где σ_x - матрица Паули, и аналогичные соотношения с заменой τ_1 на τ_2 при общей энергии полости $2\hbar\omega$.

При перемещении фотона из полости j в полость i и наоборот, что реализуется одновременным включением ячеек Поккельса или подобных им устройств в данных полостях, реализуется добавка H_{jump} к взаимодействию H_{int} , которая при отсутствии в полостях атомов реализует в точности ту же динамику, что и рабиевские осцилляции, но с периодом $\tau_{jump} = \pi\hbar/\nu_{i,j}$. Мы будем считать, что $\nu \gg g$, так что возможно перемещение фотона из полости в полость так, чтобы атом вообще не влиял на этот процесс, так что набег фаз можно считать по формулам, аналогичным (2.21). Как отмечено в работе [31] это трудно реализовать в эксперименте, однако есть основания считать это технической трудностью. В случае выполнения этого условия набег фазы при операторе σ_x , примененной к фотонам двух полостей составит, так же как и для половины рабиевской осцилляции, $-\pi/2$.

В силу несоизмеримости периодов рабиевских осцилляций τ_1 и τ_2 мы можем выбрать такие натуральные числа n_1 и n_2 , что будет выполняться с высокой точностью приближенное равенство

$$2n_2\tau_2 \approx 2n_1\tau_1 + \frac{\tau_1}{2}, \quad (2.22)$$

которое и будет основой для нелинейного фазового сдвига, необходимого для реализации *coCSing*.

2.12 Реализация coCSign

Состояние кубита $|0\rangle$ реализуется в нашей модели как состояние оптической полости вида $|0\rangle_{ph}|1\rangle_{at}$, а состояние кубита $|1\rangle$ - как $|1\rangle_{ph}|0\rangle_{at}$. Таким образом, для состояния $|10\rangle$, которому требуется инвертировать фазу, имеет вид $|10\rangle_{ph}|01\rangle_{at}$, где первый фотонный кубит относится к полости x , а второй - к полости y . Заметим, что через

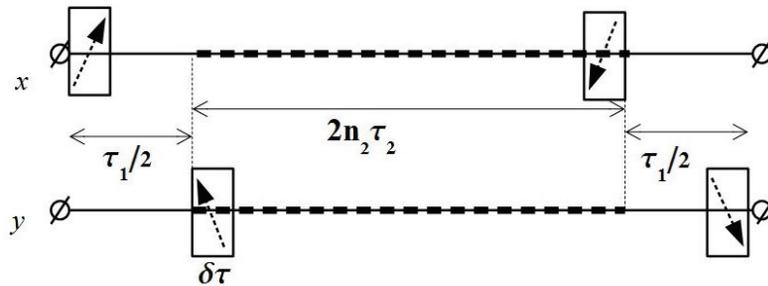


Рис. 2.6: Последовательность операций при реализации гейта coCSign : $|x, y\rangle \rightarrow (-1)^{x(y\oplus 1)}|x, y\rangle$ на асинхронных атомных возбуждениях в оптических полостях, $\delta\tau = \tau_{\text{jump}}/2$

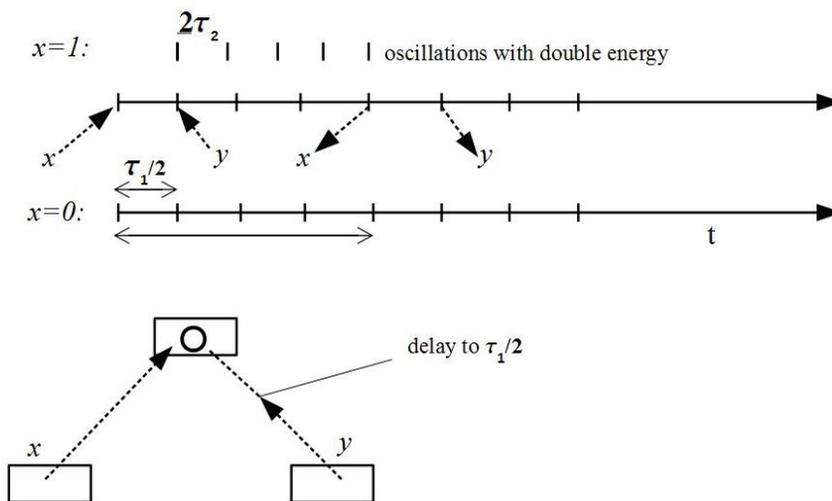


Рис. 2.7: Реализация гейта coCSign

время $\tau_1/2$ ноль и единица меняются местами с набегом фазы, который входит в H_0 , и потому игнорируется.

Последовательность операций, реализующих coCSign , изображена на рисунке 2.6, а участвующие полости - на рисунке 2.7. Сначала мы запускаем во вспомогательную полость с атомом в основном состоянии и вакуумным состоянием поля фотон из полости x , затем, с задержкой $\tau_1/2$ - фотон из полости y , затем, через время $2n_2\tau_2$, перемещаем фотон из вспомогательной полости в полость x , затем, через время $\tau_1/2$ перемещаем фотон из вспомогательной полости в полость y . Из нашего выбора времен перемещений фотонов вытекает, что в данные моменты в участвующих полостях будет либо один фотон, либо ни одного, поэтому включение ячеек Поккельса на малом временном отрезке $\delta\tau = \pi\hbar/2\nu \ll \tau_1$ даст именно перемещение фотонов.

Из предыдущих расчетов следует, что при энергии центральной полости $\hbar\omega$ (начальные состояния $|00\rangle$, $|11\rangle$) набег фазы при переносе фотона туда и обратно составит $-\pi$, а во взаимодействии с атомом $-\pi$, так что суммарный набег фазы будет нулевой, как и в случае нулевой энергии центральной полости (начальное состояние

$|01\rangle$). Для энергии $2\hbar\omega$ - в случае $x = 1, y = 0$ перенос двух фотонов даст нуль, а взаимодействие даст $-\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{2} = -\pi$, что и требовалось.

В статье [32] приведен расчет, из которого следует, что для достижения удовлетворительной точности подобных запутывающих гейтов на нелинейности в полостях достаточно взять числа несоизмеримых периодов n_1, n_2 , не превосходящие нескольких десятков, что соответствует числу наблюдаемых рабиевских осцилляций в оптических полостях.

2.13 Реализация однокубитных гейтов

Для квантового вычисления, кроме запутывающего гейта coCSign , необходимы также однокубитные гейты. Мы покажем, как можно реализовать два гейта: вращатель фазы $|x\rangle \rightarrow e^{i\phi x}|x\rangle$ и оператор Адамара $H : |x\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + (-1)^x|1\rangle)$.

Во-первых, заметим, что определенные нами логические кубиты различаются только временем появления явного фотона в полости. Пусть к полости подсоединены два волновода, 1 и 2. Используя быстрое включение и выключение ячейки Поккельса, как и выше, мы можем направить фотон по волноводу 1, в случае, если логический кубит равен нулю, и по волноводу 2, если он равен единице.

Фазовращатель изменяет фазу логического кубита, наращивая ее на угол ϕ , в том и только в том случае, когда он равен единице. Для такого изменения фазы достаточно удлинить волновод 2, в который попадет фотон, если логический кубит равен единице. Излишек длины наматывается на катушку, так что на выходе у нас снова будут те же фотоны, но сдвиг фазы по волноводу 2 будет равен ϕ . Так как период рабиевских осцилляций τ значительно превосходит длину волны фотона, такое удлинение пути фотона во втором волноводе никак не скажется на определении логических кубитов.

Теперь перейдем к гейту Адамара H . Для его реализации мы используем линейный светоделитель, изображенный на рисунке 2.8. Это устройство реализует преобразование фотонов в волноводах 1 и 2 вида:

$$|n_1 m_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!m!}} (a_1^+)^n (a_2^+)^m |0_1 0_2\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{n!m!}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (a_1^+ + a_2^+) \right]^n \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (a_1^+ - a_2^+) \right]^m |0_1 0_2\rangle, \quad (2.23)$$

где нижний индекс обозначает номер волновода. При $n = 1, m = 0$ или $n = 0, m = 1$, то есть для одного логического кубита, это преобразование в точности даст оператор Адамара.

Таким образом, однокубитные гейты, необходимые для реализации, например, алгоритма Гровера, можно сделать на оптических полостях, в рамках модели Джейнса-Каммингса-Хаббарда. Основная трудность - в быстроте срабатывания ячейки Поккельса, что представляется технически преодолимым делом. Достоинство предложенной схемы реализации гейтов - в ее простоте и возможности точного следования теоретической модели ЖСН, что, несмотря на упомянутую техническую трудность

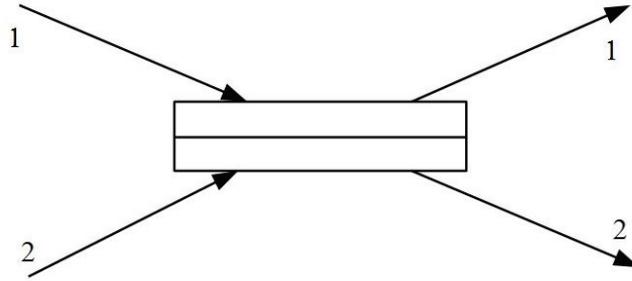


Рис. 2.8: Светоделитель.

внушает оптимизм в плане масштабируемости и сравнения теории квантового компьютера с экспериментами на большом числе кубитов.

2.14 Оптическая проводимость графов

Если в полостях нет атомов, то мы получаем граф G , в вершинах которого находятся полости, а ребрами являются оптические волокна - волноводы, по которым из вершины в вершину могут перемещаться фотоны. Такая модель является очень грубым представлением движения отдельного фотона в пространстве (с ограничениями, отмеченными в первой главе), так что распределение амплитуд его нахождения в разных полостях можно считать его вектором состояния.

Пусть все ребра обладают одинаковой проводимостью μ . Если в системе есть только один фотон, мы можем нумеровать базисные состояния номером той вершины, где он находится $|i\rangle$, $i = 1, 2, \dots, N$. Будем считать 1 - начальной, а N - конечной вершиной. Определим понятие оптической проводимости графа с фиксацией начала и конца. Для этого введем дополнительную полость - сток, так же, как и выше, и концевую вершину соединим волноводом со стоком, так что оператор $A_1 = a_{N\text{sink}}^+$ будет представлять вытекание фотона из последней полости в сток (sink). Физически сток будет не полостью, а детектором, соединенным с концевой полостью оптоволоконном. Задавая начальное состояние в виде нахождения фотона в начальной полости $|1\rangle$, мы, решая квантовое основное уравнение с таким фактором декогерентности, получим, как и выше, матрицу плотности $\rho(t)$.

Вероятность того, что фотон вылетел из последней полости в детектор к моменту времени t находится по формуле $P(t) = \langle \text{sink} | \rho | \text{sink} \rangle$, и является функцией распределения времени щелчка детектора. Функция $P(t)$ называется оптической проводимостью графа G при данной фиксации начальной и конечной вершин. Данная функция зависит не только от фиксации начала и конца графа G , но и от интенсивности вылета фотона из последней полости в детектор γ_{out} , которую мы будем предполагать ненулевой.

Правдоподобной кажется следующая

Гипотеза. Если оптическая проводимость двух графов при некоторых фикс-

саццях начал и концов одинакова при некоторой интенсивности стока γ_{out} , то эти графы изоморфны.

Данная гипотеза не доказана. Однако численное моделирование ее подтверждает. Практический алгоритм, определяющий изоморфизм на основании этой гипотезы, описан в следующем параграфе.

2.14.1 Оптическое определение изоморфизма графов

Пусть G_1 и G_2 - два графа, оба с выделенными началами 0_1 и 0_2 , и концами $(N-1)_1$, $(N-1)_2$ соответственно. Объединив эти графы и отождествив их концы, мы получим большой граф \mathcal{G} , который обозначим через (G_1G_2) . Его начальными вершинами мы будем считать 0_1 и 0_2 , а концом - отождествленные концы графов $(N-1)_1$, $(N-1)_2$.

Мы зададим начальное состояние фотона в графе (G_1G_2) в виде синглетного состояния, распределенного на двух начальных вершинах: $|\Psi(0)\rangle = |s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_1\rangle - |0_2\rangle)$, и дадим системе эволюционировать, детектируя фотон, вылетающий из конца графа (G_1G_2) также, как и выше.

Если проводимость графов G_1 и G_2 одинакова, мы будем иметь для графа (G_1G_2) с таким начальным условием $P(t) = 0$ для любого t , так как каждая порция амплитуды, пришедшая к концу графа (G_1G_2) через его подграф G_1 , сократится с такой же порцией амплитуды, пришедшей через подграф G_2 . И наоборот, если проводимость исходных графов разная, $P(t)$ будет ненулевой неубывающей функцией.

Напротив, если проводимость исходных графов различна, амплитуда конечного состояния $|N-1\rangle$ будет в какой-то момент ненулевой, и $P(t)$ будет отличной от нуля.

Таким образом, оптический алгоритм определения изоморфизма выглядит так. Мы выбираем какое-то начало и конец для первого графа, а затем перебираем все возможные начала и концы для второго, всякий раз сравнивая проводимости графов с данным выбором по изложенной схеме. Если для какого-то выбора окажется, что проводимость совпадает, то, в случае справедливости основной Гипотезы, графы G_1 и G_2 изоморфны.

Если бы чувствительность детектора была абсолютной и наша гипотеза оказалась справедливой, мы получили бы полиномиальный алгоритм распознавания изоморфизма графов на квантовом компьютере, так как перебор всевозможных пар начал и концов графов G_1 и G_2 происходит за время порядка четвертой степени от размера графов. Однако вопрос о гипотезе открыт, и чувствительность детектора ограничена. Таким образом, данный алгоритм имеет статус только практического метода распознавания изоморфизма, возможно, в его частичном виде.

2.14.2 Оптическая полупроводимость

Для любого графа G можно исследовать не только равенство нулю функции проводимости $P(t)$, но и ее поведение при $t \rightarrow \infty$. Назовем проводимость данного графа

полной, если $P(t) \rightarrow 1$ ($t \rightarrow \infty$), и неполной, если $P(t) \rightarrow a$, ($t \rightarrow \infty$), $0 < a < 1$. Граф с неполной проводимостью можно назвать графом-полупроводником; в этом случае число a будет его показателем полупроводимости.

В качестве примера графа-полупроводника рассмотрим снова граф $(G_1 G_2)$, построенный в предыдущем параграфе отождествлением концов двух графов G_1 и G_2 в том случае, когда эти графы изоморфны, причем при изоморфизме выбранные начало и конец одного переходят в выбранные начало и конец другого соответственно.

Зададим начальное состояние по другому: $|\Psi(0)\rangle = |0_1\rangle$. Тогда, поскольку графы G_1 и G_2 изоморфны, при таком задании начального состояния проводимость $P(t)$ на бесконечности будет сходиться к $1/2$. Действительно, выбранное начальное состояние $|0_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|s\rangle + |t\rangle)$, где синглетное и триплетное состояния суть $|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_1\rangle - |0_2\rangle)$, $|t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_1\rangle + |0_2\rangle)$. Триплетное состояние $|t\rangle$ дает полный сток из-за симметрии амплитуд возникающих состояний, в то время как синглет $|s\rangle$ дает полное сокращение амплитуды в общем конце графов, опять таки в силу симметрии. Таким образом, для таких графов \mathcal{G} , склеенных из двух одинаковых "половинок", показатель полупроводимости равен $1/2$.

Интересно, что если в графе G_2 поменять местами начало и конец, и только затем произвести склейку концов графов, показатель полупроводимости a результирующего графа \mathcal{G} будет выше, но не станет единичным: $1/2 < a < 1$. Таким образом, показатель полупроводимости может служить своеобразным индикатором наличия изоморфных подграфов в исходном графе.

2.15 Коллективные осцилляции

Многоатомные ансамбли - более содержательный объект для исследований, чем одноатомные. Если атомы одинаковы, то идентичными будут и испущенные ими фотоны, а фотоны "поддерживают" друг друга при одновременном испускании, из-за чего осцилляции в многоатомных ансамблях могут быть более устойчивыми, чем в одноатомных.

Для много-атомных ансамблей можно ввести естественное обобщение атомных состояний вида $(\lambda|01\rangle + \mu|10\rangle)_{at}$ - для случая, когда амплитуда распределена между атомами равномерно.

Пусть $B = \{1, 2, \dots, n\}$ - множество всех атомов, $J(B)$ есть множество классических бинарных состояний атомов из множества B . Определим равномерное состояние атомов из множества B как

$$\{|k_B\rangle = \frac{1}{\sqrt{C_n^k}} \sum_{j \in J(B)} 1(j)=k |j\rangle, \quad (2.24)$$

где $1(j)$ есть вес Хамминга бинарного кортежа j , то есть число единиц в нем. Заметим, что равномерные состояния взаимно ортогональны в силу того, что у них нет общих базисных компонент. Для символов $\{, \}, \succ, \prec$ примем дираковские правила, аналогичные правилам обращения с символами $|, \rangle, \langle$.

Пусть L_{eq}^B - равномерное подпространство, то есть линейная оболочка состояний вида $|p\rangle\{k_B \succ$ для всех $k = 0, 1, \dots, |B|$; $p = 0, 1, \dots$, где $|p\rangle$ - фоковское состояние фотонов. Рассмотрим ограничение гамильтониана H_{TC} на L_{eq}^B , которое обозначим через \tilde{H}_{TC}^B . Тогда можно записать этот гамильтониан в новом базисе, состоящем из равномерных состояний. Эта матрица будет иметь вид

$$(\tilde{H}_{i_p, i_B; j_p, j_B}^B) = (\langle i_B \rangle \langle i_p | H_{TC} | j_p \rangle \{ j_B \succ),$$

где i_p, i_B - начальное число фотонов и атомных возбуждений, j_p, j_B - конечное. Для вычисления ее элементов заметим сначала, что ненулевые члены матрицы должны удовлетворять равенствам

$$i_p - j_p = i_B - j_B = \pm 1,$$

первое из которых есть закон сохранения энергии, а второе вытекает из вида гамильтониана H_{TC} . Ненулевые элементы матрицы удобно выразить через числа

$$p = \min\{i_p, j_p\}, \quad b = \min\{i_B, j_B\}.$$

Тогда имеем

$$\tilde{H}_{i_p, i_B; j_p, j_B}^B = \begin{cases} h\omega(p + b), & \text{если } i_B = j_B, \quad i_p = j_p, \\ g(n - b) \sqrt{\frac{p+1}{C_n^b C_n^{b+1}}}, & \text{в противном случае.} \end{cases} \quad (2.25)$$

Первое равенство - для диагональных элементов, есть просто энергия данного состояния. Второе получено так. Коэффициент g есть сила взаимодействия атомов с полем, $\sqrt{p+1}$ - эффект тождественности фотонов (в операторах рождения-уничтожения), произведение биномиальных коэффициентов в знаменателе берется из нормировочных констант в определении равномерных состояний (2.24), множитель $(n-b)$ - число слагаемых в сумме, равное числу возможных атомов, возбуждение которых снимается при испускании фотона в рассматриваемом процессе.

Используя n - атомную систему, можно получить искусственный "атом" с $n + 1$ уровнями: $\{0 \succ, \{1 \succ, \{2 \succ, \dots, \{n \succ$, так, что энергетические щели между двумя соседними уровнями будут одинаковыми: $E_k - E_{k-1} = \hbar\omega$, $k = 1, 2, \dots, n$.

Для равномерных состояний имеет место аналог осцилляций Раби - коллективные осцилляции. Пусть $n = 2k$ четно. Разобьем атомы на две группы, и будем обозначать первую группу нижним индексом 1, а вторую - нижним индексом 2. Рассмотрим два базисных состояния: $|\psi_1\rangle = |0\rangle_{ph}|00\dots 0\rangle_1|11\dots 1\rangle_2$ и $|\psi_2\rangle = |0\rangle_{ph}|11\dots 1\rangle_1|00\dots 0\rangle_2$. В этих состояниях нет свободных фотонов; в первом первая группа атомов в основном состоянии, а вторая - в возбужденном, а во втором - наоборот. Если начать эволюцию с одного из этих состояний, например, с $|\psi_1\rangle$, оно сразу же превратится в суперпозицию, атомная часть каждого члена которой является равномерным состоянием атомов, причем здесь будут присутствовать все равномерные состояния. Однако через определенный промежуток времени вся амплитуда сконцентрируется на втором состоянии - на $|\psi_2\rangle$, затем все повторится, и т.д., то есть мы получим коллективный аналог рабиевских осцилляций.

Однако характер коллективных осцилляций будет непохож на рабиевские для одного атома. Пики амплитуды на наших двух состояниях будут с ростом n становиться все более и более резкими, и характер осцилляций, таким образом, будет далек от

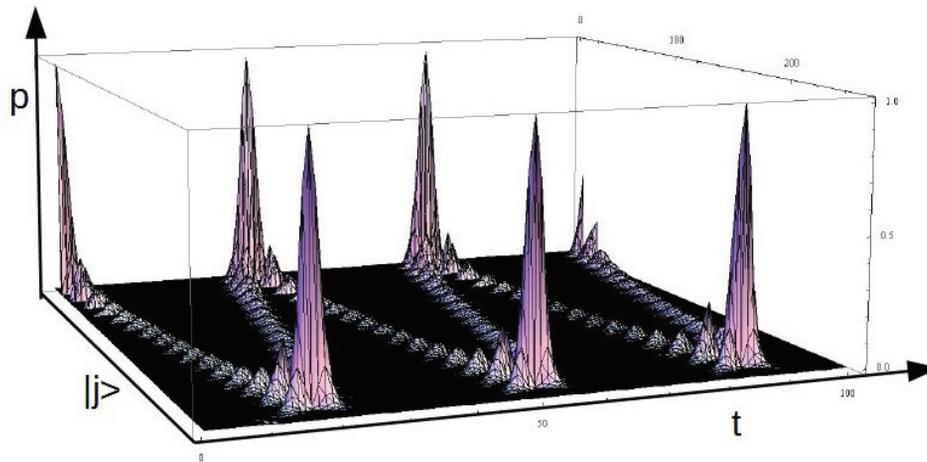


Рис. 2.9: Коллективные осцилляции для системы $16+16$. Острота пиков при переходе от возбуждения одной группы атомов к другой

синусоидального вида одноатомных осцилляций (см. рисунок 2.9). Аналогичный характер будут иметь осцилляции, даже если две группы атомов расположены в разных полостях, связанных оптическим волокном.

Устойчивость состояний типа $|\psi_{1,2}\rangle$ говорит о том, что две группы атомов могут взаимно и качественно поддерживать одинаковый динамический сценарий, даже будучи удаленными друг от друга. Причина такого поведения заключается в интерференции амплитуд; именно интерференция с участием фотонов делает возможным такую поддержку на расстоянии. Дистанционная поддержка динамических сценариев, при которой фотоны, испущенные одной группой, "находят" другую группу, готовую их принять, происходит из-за того, что для всех иных состояний амплитуда оказывается распределенной по их большому числу, что резко снижает вероятность нахождения системы атомов в этих "посторонних" состояниях. Это свойство ценно само по себе, так как оно дает надежду избавиться от полостей как таковых, представляя пустое пространство в виде набора множества полостей, соединенных оптоволоконными волноводами, проводимость которых зависит от расстояния между полостями (см. главу 1).

Отметим, что получение с помощью таких массовых осцилляций качественных гейтов типа coCSign встретится с трудностью, отчасти именно из-за остроты пиков: для улавливания момента концентрации амплитуды нужна слишком высокая скорость срабатывания оптических элементов, как мы это видели выше.

2.15.1 Эффект DAT

Модель Тависа-Каммингса может применяться не только к вакуумным оптическим полостям, но и к квантовым точкам, в которых участвующие непосредственно в модели атомы окружены множеством других атомов, которые явно не участвуют в этой модели, но создают эффект теплового воздействия на атомы, входящие в модель. Термическое воздействие можно учесть, вводя в модель термические фононы - кванты колебаний среды, однако этот путь очень затратен по вычислительным

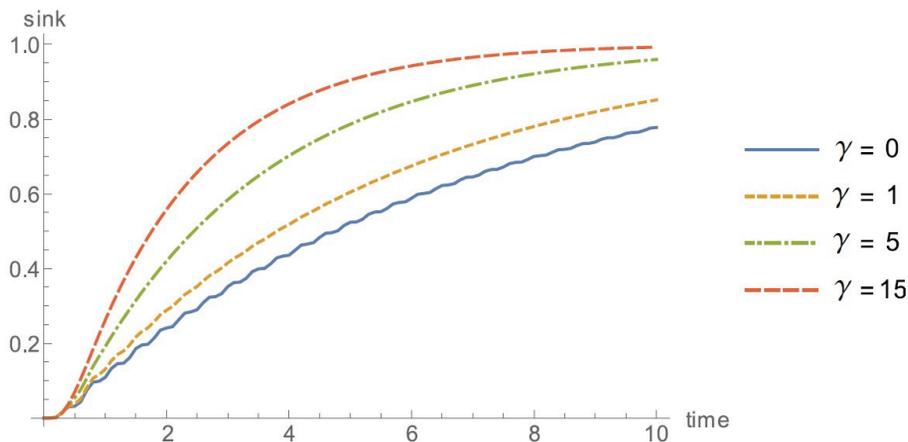


Рис. 2.10: Изменение наполнения стока со временем, иллюстрирующая эффект DAT для 2 полостей по 1 атому в каждой. $\nu_{12} = 2$, $g = 8$, $\gamma_{out}^{(2)} = 15$. Влияние термического шума одинаково для атомов в обеих полостях: $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma$. Повышение уровня шума (температуры на частоте резонансного перехода ведет к увеличению проводимости, что удивительно. (Рисунок взят из работы [20].)

ресурсам. Иногда можно отразить термическое воздействие среды на атомы в фиксированной полости, не расширяя саму модель введением новых состояний, а добавив новый, термический фактор декогерентности - $A_{term} = \sum_{i=1}^n \gamma_i \sigma_i^+ \sigma_i$, где γ_i - интенсивность действия термического фактора на атом i .

Рассмотрим цепочку полостей, связанных оптическим волокном, с фиксированным началом и концом, где, как обычно, из конечной полости имеется необратимый сток фотонов, на атомы каждой полости j действует термический фактор декогерентности A_{term}^j , в котором интенсивности γ_i^j зависят не только от номера атома i , но и от номера полости j .

Проводимость такой цепочки полостей определяется так же, как и выше, по скорости наполнения стока при начальном состоянии, в котором единственный фотон находится в первой полости, а все атомы - в основном состоянии. Численное моделирование показывает наличие контр-интуитивного эффекта роста проводимости при некотором повышении интенсивности теплового воздействия на атомы, то есть при увеличении γ_i для всех или некоторых полостей, входящих в цепочку. Этот эффект называется dephasing assisted transport (DAT, см. [33]); он имеет место, например, в светособирательном комплексе зеленых серных бактерий (так называемый FMO-комплекс, см. [34]).

Эффект DAT численно моделируется с помощью квантового основного уравнения для цепочки из двух полостей с одним атомом в каждой, результат приведен на рисунке 2.10.

2.16 Системы многоуровневых атомов

Рассмотрим обобщение модели Тависа-Каммингса на d -уровневые атомы. Модифицированный на случай d -уровневых атомов гамильтониан Тависа-Каммингса для n атомов с энергиями g_i^j взаимодействия с полем выделенной моды i имеет вид

$$\begin{aligned} H_{TC}^i &= \hbar\omega a_i^+ a_i + (a_i^+ + a_i) \sum_{j=1}^n g_i^j (\sigma_{ji}^+ + \sigma_{ji}), \\ H_{TC}^{i,RWA} &= \hbar\omega a_i^+ a_i + g_i^j (a_i^+ \bar{\sigma}_i + a_i \bar{\sigma}_i^+), \quad \bar{\sigma}_i = \sum_{j=1}^n g_i^j \sigma_{ji}, \end{aligned} \quad (2.26)$$

где RWA-приближение справедливо при $g_i^j/\hbar\omega \ll 1$, верхним символом "+" обозначено сопряжение операторов. Здесь a_i, a_i^+ - полевые операторы уничтожения и рождения фотона моды i , $\sigma_{ji}, \sigma_{ji}^+$ - атомные операторы релаксации и возбуждения атома j , соответствующие моде i , которые определяются естественным образом.

Пусть для ансамбля A , состоящего из d одинаковых d -уровневых атомов, различающихся только энергиями взаимодействия с модами поля, определен граф G возможных разрешенных переходов между уровнями для каждого j -го атома, $j = 1, 2, \dots, d$. Вершины G соответствуют уровням энергии, ребра - разрешенным переходам между ними. Тогда G задает набор всевозможных мод J_G , с которыми может взаимодействовать каждый атом. Многомодовый гамильтониан, соответствующий графу G , имеет вид

$$H_{TC}^G = \sum_{i \in J_G} H_{TC}^i, \quad H_{TC}^{G,RWA} = \sum_{i \in J_G} H_{TC}^{i,RWA}. \quad (2.27)$$

Введем обозначение $\bar{\sigma}_G = \sum_{i \in J_G} \bar{\sigma}_i$. Тогда подпространство темных атомных состояний для ансамбля с возможными переходами G есть $Ker(\bar{\sigma}_G^+ + \bar{\sigma}_G)$ и $Ker(\bar{\sigma}_G)$ в точной модели и в RWA приближении соответственно. (Заметим, что некоторые моды могут допускать RWA приближение, тогда как другие - нет, к разным атомам применимость RWA также может быть различной; соответствующие модификации определений ясны из приведенных; мы рассматриваем только случай применимости этого приближения ко всем модам и атомам одновременно.)

Через $g^j(r)$ обозначим амплитуду перехода по ребру r , соединяющему пару состояний в графе G для атома j .

Сделаем граф G ориентированным, задав ориентацию любого ребра по направлению к уменьшению энергии атомного состояния. Зафиксировав номер атома $j \in \{1, 2, \dots, n\}$, пометим в графе G ребра r числами $g^j(r)$. Получится n графов G^j , изоморфных G , для каждого атома - свой. Предположим, что каждой паре "атом j , состояние i " можно приписать положительный вес $w(j, i)$, так что для любой пары j, j' атомов отношение $g^j(r)/g^{j'}(r) = w(j', i_{in})/w(j, i_{in}) = w(j', i_{fin})/w(j, i_{fin})$ для любого ребра r с началом i_{in} и концом i_{fin} .

Рассмотрим состояние атомов

$$|D_{G,A}\rangle = \sum_{\pi \in S_d} (-1)^{\sigma(\pi)} w(1, \pi(1)) w(2, \pi(2)) \dots w(d, \pi(d)) |\pi(1), \pi(2), \dots, \pi(d)\rangle, \quad (2.28)$$

где π пробегает все перестановки на множестве атомов $1, 2, \dots, d$, а $\sigma(\pi)$ обозначает четность перестановки π . Состояние $|D_{G,A}\rangle$ называется G, A - мультисинглетом. Мультисинглет называется равновесным, если все веса $w(j, i)$ равны единице. Мультисинглет всегда является темным в RWA, а равновесный мультисинглет - темным для точного гамильтониана. Чтобы показать это, рассмотрим следующий пример.

Пример. Для $d = 2$ состояние (2.28) примет вид

$$g^1|01\rangle - g^2|10\rangle \quad (2.29)$$

с точностью до нормировки; это состояние темное в RWA. Из определения весов $w(j, i)$ следует, что сумма двух слагаемых из (2.28), отличающихся только перестановкой состояний одной пары атомов, будут с точностью до коэффициента иметь вид (2.29). С другой стороны, состояние (2.29) будет темным для точного гамильтониана тогда и только тогда, когда $g^1 = g^2$.

Подграф $G' \subseteq G$ называется полным, если вместе с любой своей вершиной он содержит все вершины, соединенные с ней нисходящим ребром, вместе с этим ребром. Набор графов G_1, G_2, \dots, G_r графа G назовем покрытием, если он состоит из полных подграфов и их объединение дает G . Покрытие точное, если любой G_i , $i = 1, 2, \dots, r$ является компонентой связности графа G .

Для ансамбля n d -уровневых атомов в свете работы [24] правдоподобной является следующая гипотеза о явном виде темных состояний.

Гипотеза.

1) Любое темное состояние в гамильтониане $H_{TC}^{G,RWA}$ есть линейная комбинация тензорных произведений

G_i, A_i - мультисинглетов для некоторых покрытий $\{G_i\}$ графа G и разбиений множества всех атомов A на подмножества A_i .

2) Темные состояния для точного гамильтониана H_{TC}^G являются в точности линейными комбинациями равновесных

G_i, A_i - мультисинглетов для точных покрытий $\{G_i\}$ графа G и соответствующих разбиений A на подмножества A_i .

В частности, из этого следует, что при связном графе G темные состояния в точной модели бывают лишь для ансамблей с числом атомов, кратным d . Данная гипотеза строго доказана только для $d = 2$ в работе [35]. Уже для $d = 3$ данная гипотеза только проверена на суперкомпьютере до нескольких десятков атомов.

В ансамбле разнородных атомов, как правило, нет совпадающих частот переходов. Однако в квантовых точках, где "атомы" можно, фактически, формировать искусственно, можно добиться и совпадения частот некоторых переходов в спектрах неодинаковых структур; в это случае можно исследовать получающиеся темные состояния.

Например, для трехатомного ансамбля, состоящего из двух V - атомов и одного λ - атома, изображенного на рисунке 2.11, RWA-темное подпространство будет иметь размерность 7 и один из его базисов выглядит так:

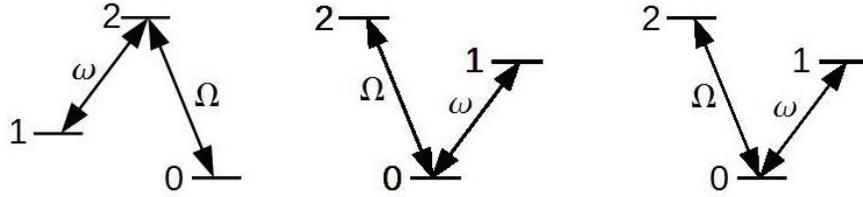


Рис. 2.11: Ансамбль трех разных атомов: два v - типа и один λ - типа. Переходы подобраны с одинаковыми для всех атомов энергиями обеих мод $\hbar\Omega$, $\hbar\omega$.

$|120\rangle - |102\rangle$, $|200\rangle - |101\rangle - |001\rangle$, $|200\rangle - |110\rangle - |002\rangle$, $|000\rangle$, $|002\rangle - |020\rangle$, $|100\rangle$, $|110\rangle - |101\rangle$. Здесь последовательность атомных состояний - как у атомов на рисунке.

2.17 Оптический отбор темных состояний

Мы объясним метод оптического отбора на примере ансамбля, состоящего из двух двух-уровневых атомов. Будем обозначать базисные состояния системы атомов и поля через $|n\rangle_{ph}|m_1m_2\rangle_{at}$, где n - число фотонов в резонаторе, m_1, m_2 - числа возбуждения первого и второго атомов: 0- основное состояние, 1- возбужденное. Схема отбора состоит из последовательных шагов отбора, которая начинается с заранее подготовленного состояния поля и атомов $|\Psi(0)\rangle = |0\rangle_{ph}|\Phi_0\rangle_{at}$, где $|\Phi_0\rangle_{at} = \alpha|00\rangle + \beta|s\rangle$, $|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle)$ - двухатомный синглет, $\alpha|00\rangle + \beta|s\rangle$ - произвольное состояние двух-атомной системы, которое можно получить, выждав необходимое время для испускания фотона двух-атомной системой. Например, состояние атомного ансамбля $|01\rangle$ можно представить как $|01\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|t\rangle + |s\rangle)$, где $|t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle)$ - триплетное состояние, остальные два триплета имеют вид $|00\rangle$ и $|11\rangle$.

Шаг процесса с номером i состоит в следующем. В момент времени τ_i мы имеем состояние системы "атомы + поле" ρ_i , при этом вероятность присутствия фотонов в полости исчезающе мала. Мы запускаем в резонатор один фотон, после чего включаем ячейку Поккельса, расположенную внутри резонатора и отражающую фотон в направлении детектора (см. рисунок 2.12) и фиксируем время срабатывания детектора. После этого шага делаем следующий точно так же, и т.д., набирая статистику времен срабатывания детектора.

Мы предполагаем, что время запуска фотона в полость мало по сравнению как с временем рабиевской осцилляции между состояниями $|1\rangle_{ph}|00\rangle_{at}$ и $|0\rangle_{ph}\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle_{at} + |10\rangle_{at})$, так и с ожидаемым временем вылет фотона из полости и им можно пренебречь, считая запуск практически мгновенным.

Пусть ρ'_i - априорное состояние системы в полости в момент i -го включения ячейки Поккельса. Поскольку фотон появляется в полости очень быстро, можно считать, что это состояние получается из ρ_i добавлением фотона в полость: $\rho'_i = a^+\rho_i a$. После этого мы ждем время $d\tau_{click\ i}$, когда в детектор попадет фотон, вылетевший из полости.

Время срабатывания детектора $d\tau_{click\ i}$ на шаге i является случайной величиной,

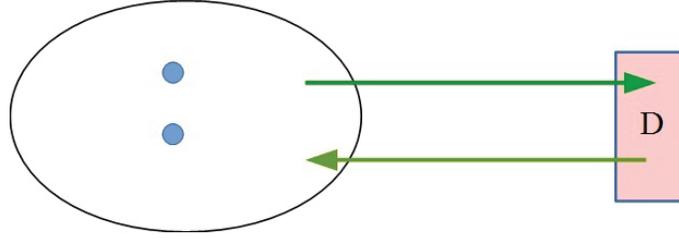


Рис. 2.12: Оптический отбор. Линдбладовский оператор $L_1 = a^+a$ - улет фотона и возврат его обратно в полость после прохождения через детектор. Детектор щелкает всякий раз, когда в него попадает фотон.

зависящей также от шага i , так что решая основное уравнение, мы лишь найдем для нее верхнюю границу dt_i . Функция распределения $d\tau_{click\ i}$ меняется с каждым шагом, и является априорной функцией распределения, которую мы находим по уравнению (1.35), не прибегая ни к каким экспериментам. Это вычисление нужно лишь для того, чтобы найти верхнюю границу dt_i ожидания щелчка детектора на шаге i . Матрицу плотности ρ_{i+1} можно найти как решение задачи Коши для квантового основного уравнения (1.35), соответствующего вылету фотона из полости, для начального состояния $\rho'_i(0) = \rho'_i$, с тем условием, что для момента dt_i это решение $\rho'_i(dt_i)$ не содержит фотонов в полости с исчезающе малой вероятностью ошибки (ошибка может произойти только когда мы прекратили ждать срабатывания детектора, а фотон все-таки остался в полости или может быть испущен позже).

Итак, верхнюю границу dt_i для $d\tau_{click\ i}$ на шаге i мы ищем численно, решая квантовое основное уравнение. Мы полагаем $\rho_{i+1} = \rho'_i(dt_i)$. После вылета фотона из полости состояние атомов внутри полости не меняется, поэтому мы можем произвольно увеличить время ожидания полного вылета до значения, большего найденного dt_i для уменьшения вероятности ошибки.

Мы будем делать так определенные последовательные шаги, каждый раз фиксируя время срабатывания детектора на вылетающий из полости фотон. Если момент $\tau_i - \tau_{i-1}$ щелчка детектора на шаге i рассматривается как случайная величина, то функция распределения этой величины находится как $P(t) = \langle 0_{ph}0_10_2 | \rho(t) | 0_{ph}0_10_2 \rangle + \langle 0_{ph}s | \rho(t) | 0_{ph}s \rangle$, то есть как вероятность того, что фотон вылетел из полости за время t , считая нулевой отметкой начало шага i . Плотность распределения времени срабатывания детектора есть $dP(t)/dt$. После достаточно большого числа последовательных шагов мы считаем среднее время $d\tau$ по всем значениям $d\tau_{click\ i}$ срабатывания детектора в наших экспериментах. Далее мы установим факт достаточно быстрого подавления внедиагональных элементов матрицы плотности ρ_i с ростом i , так что распределение величины $d\tau_{click\ i}$ для разных i будет практически одинаковым для больших i , и сойдется к распределению, характерному либо для триплета $|00\rangle$, либо для синглета $|s\rangle$; таким образом, величины времен ожидания щелчка детектора dt_i , начиная с момента исчезновения недиагональных элементов, будут одинаковы, обозначим их через dT .

Если среднее время $d\tau$ вылета фотона меньше некоторого порога $d\tau_{cr}$, в полости находится темный синглет $|s\rangle$, в противном случае мы имеем триплет $|00\rangle$, состояние бракуется, и вся серия экспериментов начинается заново - с выбора случайного

начального состояния атомов.

Срабатывание детектора на шаге i , в который попадает фотон, отраженный ячейкой Поக்கельса, происходит с замедлением, которое меняется между нулем и $d\tau_{click\ i} = \tau_i - \tau_{i-1}$; оно складывается из двух факторов: а) время срабатывания самой ячейки (она может не перекрывать всю полость и потому даже если в полости есть фотон, он не отразится сразу при прохождении вдоль полости) и б) возможность поглощения фотона компонентой $|00\rangle$ атомного состояния полости.

Если первоначальное состояние атомов $\rho_0 = |s\rangle\langle s|$, то мы имеем синглет и среднее время вылета a_s фотона из полости будет коротким. Если же $\beta = 0$, то мы имеем триплет $\rho_0 = |00\rangle_{at}\langle_{at}00|$ и среднее время вылета фотона a_t будет длиннее, так как за время бездействия ячейки Поக்கельса фотон может с ненулевой вероятностью поглотиться ансамблем атомов. Таким образом, достаточно взять статистический барьер для принятия решения $d\tau_{cr} = (a_s + a_t)/2$.

Считая применимым RWA приближение, рассмотрим в качестве математической модели шага нашего процесса квантовое основное уравнение с оператором Линдблада $A_1 = a$ - удаление фотона из полости:

$$i\hbar\dot{\rho} = [H, \rho] + i\mathcal{L}(\rho), \quad \mathcal{L}(\rho) = \gamma(a\rho a^+ - \frac{1}{2}(\{a^+a, \rho\})), \quad H = H_{ТС}. \quad (2.30)$$

Его решение $\rho(t)$ можно приближенно найти, представив в виде последовательности двух шагов, из которых на первом делается один шаг в решении унитарной части (2.30): $\tilde{\rho}(t + dt) = e^{-iHdt/\hbar}\rho(t)e^{iHdt/\hbar}$, а на втором - шаг в решении уравнения (2.30) с удаленным коммутатором:

$$\rho(t + dt) = \tilde{\rho}(t + dt) + \frac{\gamma}{\hbar}(a\tilde{\rho}a^+ - \frac{1}{2}(\{a^+a, \tilde{\rho}\}))dt.$$

Грубо оценить параметр γ можно так. Поскольку изменение матрицы плотности на втором шаге, отнесенное к времени dt , за которое свет преодолевает длину полости, составляет величину эффективности ячейки Поக்கельса e_p : $0 < e_p \leq 1$, мы имеем $\frac{\gamma dt}{\hbar} = e_p$, откуда $\gamma = e_p \hbar/dt$. Для атома Rb^{85} длина полости, равная половине длины волны фотона, составляет 0.7 cm , мы имеем $\gamma \approx 10^{-17}e_p$ эрг.

Предположим, что мы имеем один из вариантов: а) $|\Phi_0\rangle_{at} = |00\rangle$ или б) $|\Phi_0\rangle_{at} = |s\rangle$. В первом случае время срабатывания детектора, усредненное по большому числу испытаний, будет в силу центральной предельной теоремы очень близко к t_s , во втором - к t_t . Поскольку $t_t - t_s$ достаточно большая величина, мы сможем статистически достоверно различить эти два случая. Варианты а) или б) имеют место, например, если начальное состояние пары атомов имеет вид $|01\rangle$, так как в этом случае щелчок детектора при приготовлении исходного состояния для первого шага уже означает, что мы имеем состояние $|00\rangle$, а отсутствие щелчка в течение достаточно длительного времени - что мы имеем синглет $|s\rangle$.

Теперь пусть оба числа α , β ненулевые. Тогда в матрице плотности состояния атомов в базисе $|00\rangle$, $|s\rangle$, получаемой в результате описанной последовательности шагов внедиагональные члены будут подавляться с числом шагов, так что в пределе матрица плотности полностью распадется на $|00\rangle\langle 00|$ - с вероятностью $|\alpha|^2$ и $|s\rangle\langle s|$ с вероятностью $|\beta|^2$, и мы придем к уже разобранным случаю двух несовместных альтернатив. Подавление внедиагональных элементов матрицы плотности установлено

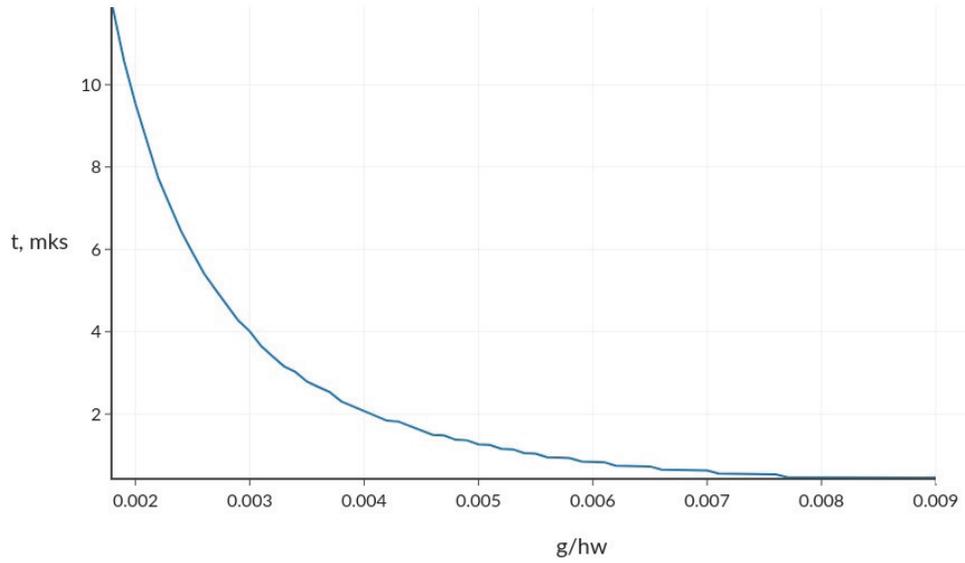


Рис. 2.13: Время $t = T_{non}$ полного затухания недиагональных элементов ($abs < 10^{-3}g/\hbar\omega$ в интервале $[0.01; 0.01]$ с шагом 0.01, интенсивность стока: $\gamma/\hbar\omega = 0.01$, шаг по времени: $dt = 0.001/\gamma$, пороговая населенность стока, при которой происходит запуск фотона: 0.95.

численным моделированием. Время полного подавления внедиагональных элементов матрицы плотности T_{non} получается суммированием всех временных отрезков ожидания полного вылета фотона из полости: $T_{non} = \sum_{i=0}^L dt_i$ где L - минимальное значение шага, на котором внедиагональные элементы матрицы ρ_L становятся пренебрежимо малыми. График времени полного подавления внедиагональных элементов матрицы плотности T_{non} в зависимости от энергии g взаимодействия атомов и поля приведен на рисунке 2.13.

На рисунке 2.14 изображены графики функций распределения времени вылета фотона из полости для разных значений γ ; соответственно, плотности распределения будут производными от этих функций: для $\gamma = g$ график плотности показан на рисунке 2.15.

Моменты щелчков детектора $d\tau_1, d\tau_2, \dots, d\tau_{L_s, t}$ в последовательных экспериментах соответствуют независимой выборке из значения данных величин; значения L_s, L_t для двух конкурирующих гипотез будут различаться ненамного. По центральной предельной теореме среднее арифметическое $\xi = \sum_{i=1}^L d\tau_i/L$ будет иметь при больших L нормальное распределение с центрами a_s и a_t соответственно, которые представляют собой средние времена вылета фотона для двух альтернативных гипотез: $a_s < a_t$.

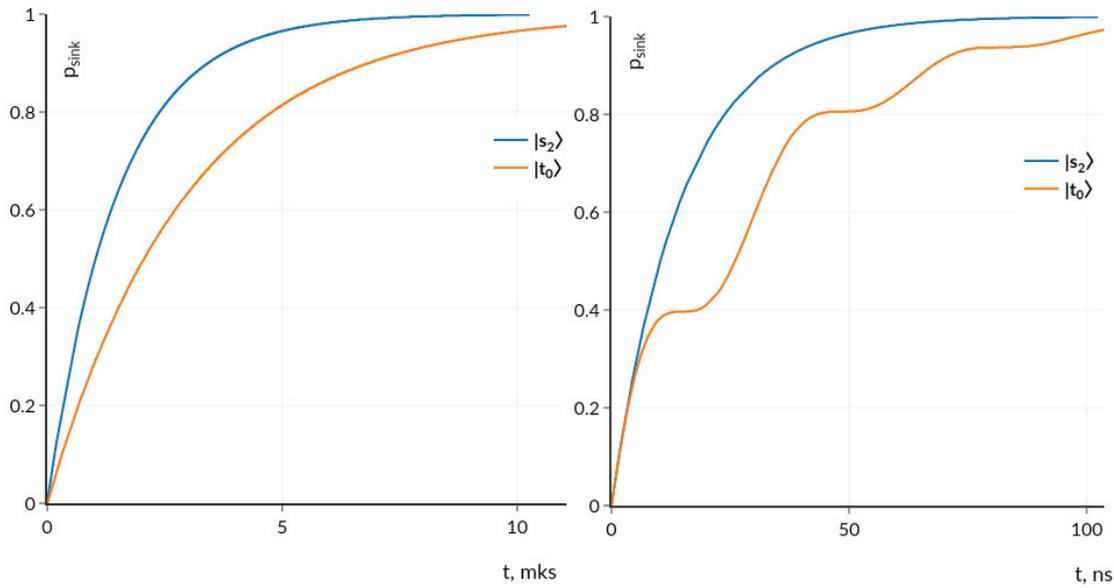


Рис. 2.14: Наполнение стока при одном испытании: слева при $\gamma = 0.01g$, справа при $\gamma = g$.

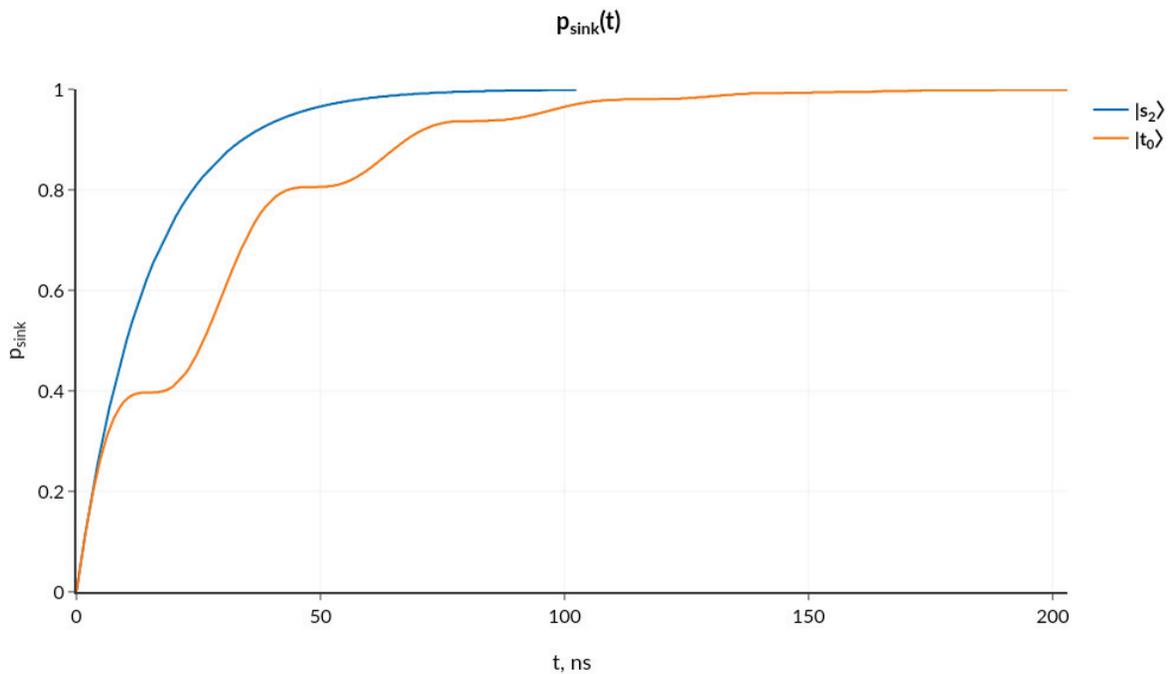


Рис. 2.15: Плотность вероятности вылета фотона при $\gamma = g$

Мы провели прямое моделирование оптического отбора с помощью датчика случайных чисел, последовательностью испытаний. В каждом испытании с интервалом dt_{click} моделируется измерение стока, то есть статистическое испытание факта вылета фотона из полости, исходя из рассчитанной по уравнению (2.30) вероятности. При этом уравнение (2.30) решается методом Эйлера с шагом по времени dt , причем временные интервалы в вычислительной модели выбирались так, чтобы для любого

шага по времени выполнялись бы неравенства $dt < dt_{\text{click}} \ll d\tau_{\text{click } i} \leq dT$. Если фотон вылетел, испытание считается завершенным, мы снова запускаем его в полость, изменяя начальное условие для (2.30), и переходим к следующему испытанию. Число всех испытаний обозначается через N , максимальное время одного испытания $dT = \max(dt_i)$. Ниже приведены результаты численного моделирования для следующих значений параметров:

Шаг по времени решения уравнения (2.30): $dt = 10$ ns, интенсивность вылета в сток: $\gamma = 0.01g$, период проверки срабатывания детектора $dt_{\text{click}} = 50$ ns, число испытаний (каждое испытание проводится до первого срабатывания детектора) $N = 1000$, $a_t = 1.551$ mks, $a_s = 1.125$ mks.

Практически можно взять $n_{\text{bor}} = 2T_{\text{gen}}/(a_s + a_t)$ как среднее число щелчков детектора за общее время T_{gen} наблюдения, $T_{\text{gen}} = NdT$ и применим наш статистический критерий так: при числе щелчков $n_{\text{click}} > n_{\text{bor}}$ мы имеем синглетное состояние $|s\rangle$, в противном случае - триплет $|00\rangle$.

Тогда ошибка первого и второго рода оценится сверху как квантиль $\int_{n_{\text{bor}}}^{\infty} N_{0,\sigma}(x) dx$ нормального распределения с математическим ожиданием 0 и дисперсией $1/\min\{L_s, L_t\}$, и может быть сделана сколь угодно малой с увеличением T_{gen} .

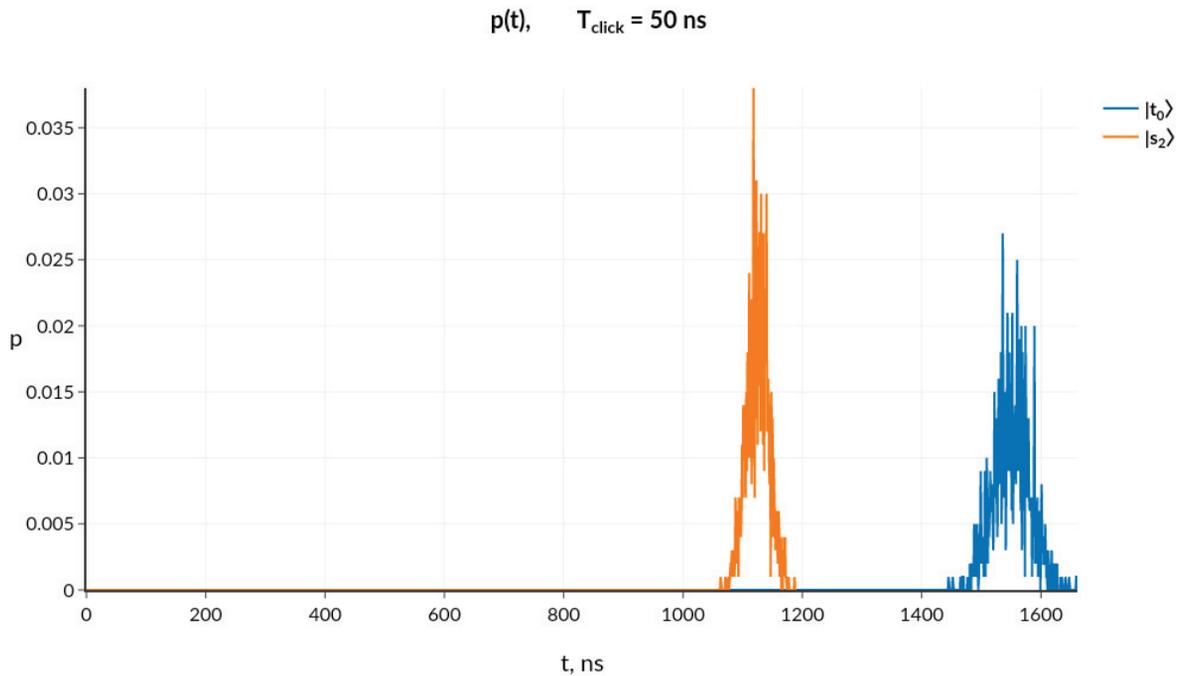


Рис. 2.16: Плотность распределения среднего времени вылета фотона за 1000 испытаний, точность моделирования $dt = 1$ ns

2.18 Многоуровневый случай

Описанный оптический отбор темных состояний применим и к ансамблям многоуровневых атомов. Здесь надо рассмотреть состояния многоуровневого синглета $|S_D\rangle$

вида (2.28) и дополнить его до ортонормированного базиса "светлыми" состояниями. При этом отбор должен производиться по всем модам, которых в случае d уровней будет не больше C_n^2 . Энергия перехода g_i между уровнями возбуждения, соответствующими моде i , зависит от симметрии волновой функции электронной оболочки. Пусть моде i отвечает переход вида

$$|\Psi_{in}\rangle \rightarrow |\Psi_{fin}\rangle$$

между состояниями электронной оболочки. Если эти состояния обладают разными типами симметрии (одно симметрично относительно пространственной координаты r , другое - антисимметрично), переход в дипольном приближении возможен, то есть $g_i > 0$, если же тип симметрии одинаков, в дипольном приближении мы имеем $g_i = 0$, что означает возможность перехода только в высших порядках приближения, то есть g_i очень мало. Здесь мы будем учитывать переходы всех порядков.

Для трех уровней мы обозначаем мультисинглет через $|D_3\rangle$. Другое темное состояние имеет вид $|0_3\rangle(|0_11_2\rangle - |1_10_2\rangle)$, эти состояния мы сравним с $|0_10_20_3\rangle$.

Мы рассмотрели данные примеры состояний для ансамблей трех трех-уровневых атомов, проведя численное моделирование для значений параметров: $dt = 1$ ns, $\gamma = g$, $dt_{\text{click}} = 100$ ns, $N = 1000$. Графики функции распределения времени срабатывания детектора даны на рисунке 2.17, плотность распределения среднего времени щелчка детектора для разных состояний даны на рисунке 2.18.

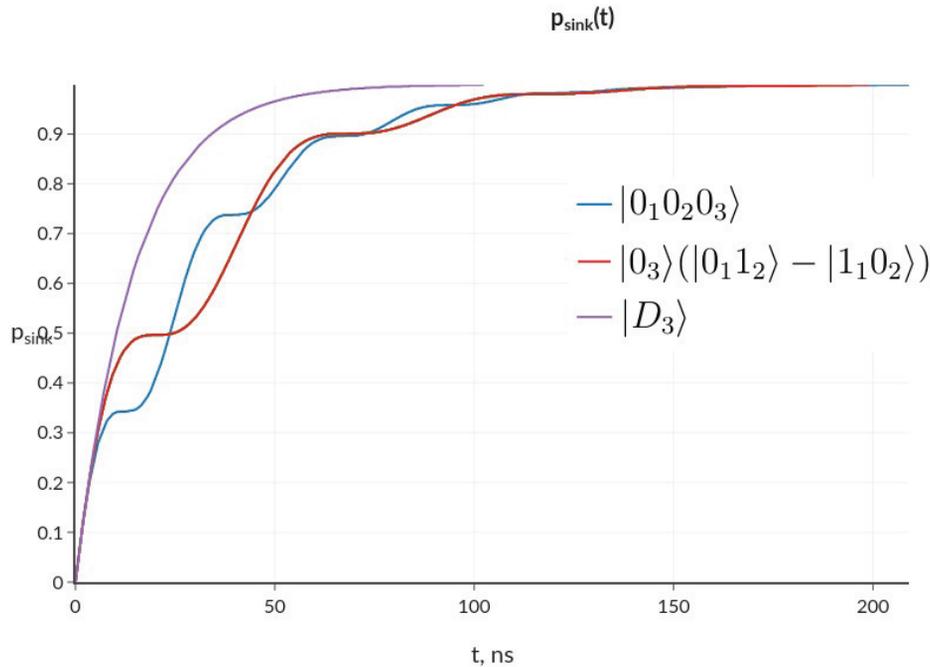


Рис. 2.17: Наполнение стока в зависимости от времени, $\gamma = g$.

Плотность распределения среднего значения времени детектирования фотонов считалась для значений $dt_{\text{click}} = 100$ ns, $a_{|10\rangle_{ph}|000\rangle_{at}} = 22.243$ mks, $a_{|10\rangle_{ph}|D_3\rangle} = 16.596$ mks, $a_{|10\rangle_{ph}|0\rangle(|01\rangle - |10\rangle)} = 22.423$ mks, $a_{|10\rangle_{ph}|0\rangle_2(|011_3\rangle - |110_3\rangle)} = 22.423$ mks, $a_{|10\rangle_{ph}|(|01\rangle - |10\rangle)|0\rangle} = 22.423$ mks.

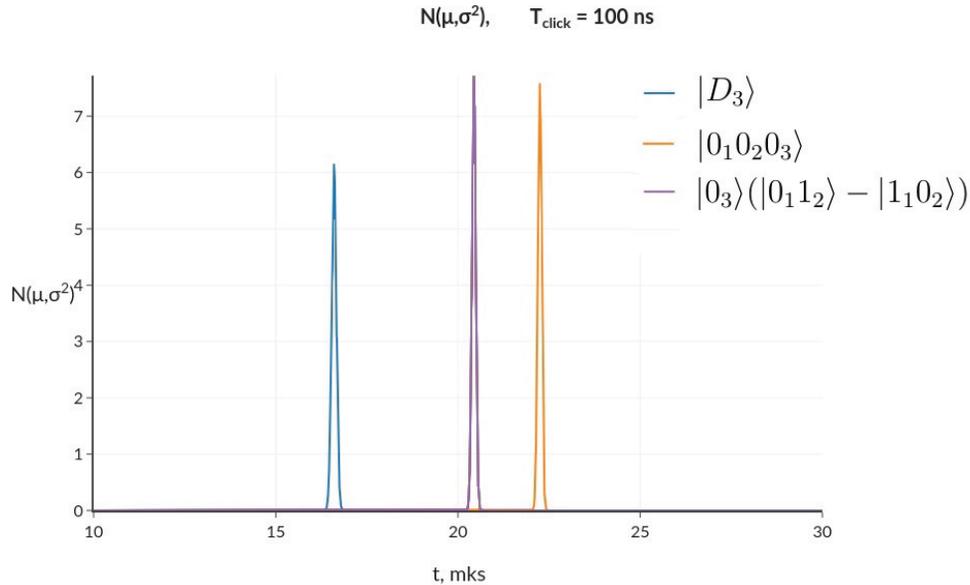


Рис. 2.18: Плотность распределения среднего времени вылета фотона за 1000 испытаний, $dt_{click} = 100 \text{ ns}$, $\gamma = g$.

Интересно здесь то, что когерентность возникает в результате измерений состояния: первоначально могло быть атомное состояние $|01\rangle$, а в результате оптического отбора у нас будет синглет $|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle)$. Это противоречит интуиции: мы всегда считали, что измерение разрушает когерентность.

2.19 Химический квантовый компьютер

Химический квантовый компьютер должен моделировать химические реакции в режиме реального времени с целью управления такими реакциями. Он играет по отношению к реакциям ту же роль, что играет рентгеноструктурный анализ по отношению к стационарной структуре молекул, а именно: квантовый компьютер должен позволить видеть механизмы реакций с учетом поля, что будет означать полный контроль над химией. Эта задача в общем случае далека от решения, и компьютерного симулятора химии в настоящее время не существует. Ее решение представляется реальным только для сравнительно простых реакций, занимающих короткое время. Для сложной химии эту задачу можно реализовать только в контексте живого организма, где гигантская неопределенность начальных условий химии радикально жестко редуцируется структурой белков, то есть, в конечном счете, ДНК.

Покажем принципиальную возможность слежения за химической реакцией с помощью одного классического транзистора, входящего в современную микросхему. Число операций не превосходит числа n проходов света через транзистор: один транзистор в микросхеме имеет размеры не меньше $10 \text{ nm} \approx 10^{-6} \text{ см}$. С какой скоростью он может работать? Число операций не превосходит числа n проходов света, скорость которого $c \approx 3 \cdot 10^{10} \text{ см/сек}$, через транзистор, то есть $n \approx 3 \cdot 10^{16}$. Для уверенного моделирования динамики нужен шаг по времени dt . Его величина находится из соотношения неопределенностей $dE \cdot dt = \hbar \approx 10^{-27} \text{ эрг сек}$. Для электродинамики

$dE \approx 10^{-17}$ эрг, $dt \approx 10^{-10}$ сек, и один транзистор по скорости работы справляется с моделированием эволюции одного заряда; даже если рассматривать переход электрона от атома к атому, время которого примерно 10^{-12} сек, один транзистор будет, в принципе, успевать воспроизводить состояние такого электрона.

Для ядерной физики $dE \approx 10^{-5}$ эрг, $dt \approx 10^{-22}$ сек, и один транзистор не может даже приблизиться к необходимой скорости работы для моделирования динамики одного ядра, даже при классическом представлении этой динамики. Кроме того: для предсказательного моделирования нужна квантовая механика, где для одного атома ^{235}U нужна память не меньше 2^{235} .

Таким образом, в рамках представлений копенгагенской квантовой теории, классический компьютер в принципе должен справиться с моделированием простой химии, по крайней мере, по тактовой частоте работы, но не с ядерными процессами на квантовом уровне. Ядерные превращения, при их современной трактовке, лежат вне сферы досягаемости вычислительной техники, основанной на электромагнетизме, далее мы приходим к тому же выводу по-другому. Для создания настоящей теоретической базы ядерной физики нужно либо изобрести принципиально новые вычислительные машины, либо изменить саму трактовку этой, пока еще, в основном экспериментальной, дисциплины. Если первое вряд ли возможно, остается второе. Однако ядерная физика лежит пока вне сферы применимости наших моделей, и мы вернемся к электродинамике, а именно - к ее важнейшей сфере применения - химии.

Реализовать квантовый параллелизм в управлении динамикой химических реакций можно через квантовый компьютер на зарядовых состояниях электронов в твердотельных квантовых точках или в системе атомов, размещенных в оптических полостях. Один из вариантов этой схемы мы описали выше; другие примеры исследовались в ряде работ (см., например, [36]), здесь мы опишем кратко программные примитивы, необходимые для реализации этой схемы в виде внешнего вида квантовой операционной системы компьютера химического типа. Схема химического квантового компьютера, моделирующего переходы электронов, дана на рисунке 2.19.

Состояния реального набора атомов и электромагнитного поля представляется в этой схеме так: атомы представляются квантовыми точками - искусственными "атомами", связанными друг с другом оптоволоконном и проводниками зарядов. От точки к точке могут перемещаться как фотоны, так и электроны - по проводникам зарядов. Модифицировав эту схему, мы можем включить в нее и перемещение атомов. Такая система должна содержать следующие программные примитивы, соответствующие элементарным сценариям: переход электрона с уровня на уровень в данной точке с одновременным поглощением или испусканием фотона, переход фотона от одной точки к другой по оптоволокну, переход электрона от одной точки к другой по проводнику зарядов. Таким сценариям соответствуют некоторые массивы стандартных квантовых гейтов, например, перемещению фотона из точки в точку соответствует оператор $a_i^+ a_j + a_i a_j^+$.

Гамильтониан, управляющий динамикой состояния атомов и поля в таком компьютере, выписывается так же, как и для конечномерной модели КЭД Тависа-Каммингса (см. [22],[23]). Эта модель может быть использована для представления реакций ассоциации - диссоциации атомов, поскольку здесь есть спиновая динамика, и перемещение электронов от атома к другому атому зависит от спинового состояния имеющих

Конечномерная химия

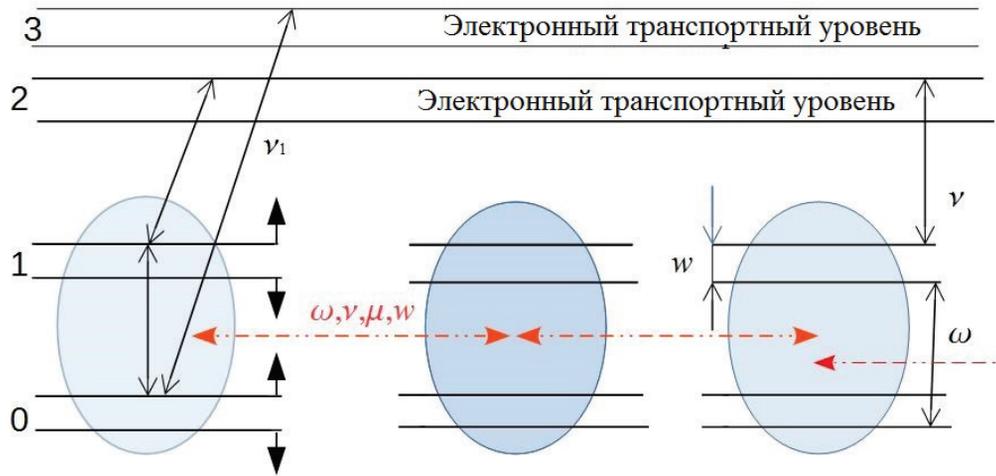


Рис. 2.19: Химический квантовый компьютер

в данных точках электронов - согласно принципу запрета Паули. В такой модели отражается специфика квантовой динамики зарядов и поля, что невозможно сделать на классическом суперкомпьютере: запутанность и нелокальность.

Hardware для такой модели может быть сделана уже в ближайшее время на твердотельных квантовых точках. Более точный вариант квантового компьютера можно получить, используя оптические резонаторы с помещенными внутрь многоуровневыми атомами - это многоуровневая модификация модели Тависа-Каммингса-Хаббарда. Вариант с оптическими полостями, где атомы находятся в вакууме и не подвержены тепловому воздействию фактически описывается первыми принципами квантовой теории, тогда как твердотельная модель требует приближенных методов: здесь квантовые точки окружены огромным числом посторонних атомов. Поэтому для точного отображения всех факторов декогерентности полости предпочтительнее. Фактически, имитация реальной системы атомов и поля будет происходить на модели искусственных атомов - квантовых точек и поля, моды которого жестко ограничены отобранными в резонаторах частотами.

В описанной химической модели квантового компьютера можно приближенно производить и операции, соответствующие стандартным гейтам фейнмановского интерфейса, так CNOT или CSign, Toffoli и однокубитные. Однако такая возможность носит характер демонстраций, тогда как химические примитивы - рабочий аппарат, нужный для имитации реальных сложных химических реакций.

2.20 Модификация с движением атомов. Черные состояния

Модификации модели Тависа-Каммингса-Хаббарда имеют целью приблизить ее к распространенным сложным системам, функционирующим без сложных и дорогостоящих в обслуживании оптических полостей. Например, вылет фотона из полости в сток, представляемая с помощью оператора Линдблада a_N , можно заменить распространением этого фотона вдоль дополнительной оптической сети полостей, не содержащих фотоны, которая ветвится, уходя все дальше от рассматриваемой системы полостей. Выше мы ввели специальные операторы Линдблада для отображения термической дефазировки.

Рассмотрим такую модификацию, где не только фотоны, но и сами атомы могут перемещаться из одной полости в другую. Эта возможность позволит охватить те виды динамики, при которых фотоны, испускаемые атомами, становятся различными в результате движения самих атомов.

Мы будем предполагать все атомы различимыми, поэтому записывать базисные состояния можно, исходя из "координат" атомов в пространстве, причем эти "координаты" будут просто номером полости, в который данный атом находится. Таким образом, базисное состояние будет иметь вид

$$|n_1, n_2, \dots, n_k\rangle_{ph} |at_1state, at_1position\rangle |at_2state, at_2position\rangle \dots |at_nstate, at_nposition\rangle, \quad (2.31)$$

где $|n_1, n_2, \dots, n_k\rangle_{ph}$ - как обычно, числа фотонов в полостях $1, 2, \dots, k$, $|at_istate, at_iposition\rangle$ характеризует атом i : $at_istate \in \{0, 1\}$ - состояние его возбуждения, $at_iposition \in \{1, 2, \dots, k\}$ - полость, в которой он находится. Мы приводим здесь и далее обозначения для двухуровневых атомов; для многоуровневых будем иметь $at_istate \in \{0, 1, \dots, d\}$.

Гамильтониан данной модификации получается из гамильтониана Тависа-Каммингса-Хаббарда добавлением дополнительных слагаемых, описывающих туннелирование атомов из полости в полость:

$$\sum_{i, 1 \leq j < q \leq k} r_{jq}^i (S(i)_j^+ S(i)_q + S(i)_q^+ S(i)_j), \quad (2.32)$$

где S_j, S_j^+ - операторы уничтожения и рождения атома i в полости j , которые действуют так же, как и операторы уничтожения и рождения атомного возбуждения σ, σ^+ , r_{jq}^i - неотрицательные интенсивности туннелирования атома i из полости j в полость q и наоборот.

Рассмотрим систему из двух полостей, соединенных оптоволоком и с возможностью туннелирования атомов из одной полости в другую; интенсивности туннелирования пусть для атомов будут одинаковыми, равно как и силы взаимодействия с полем в обеих полостях. Для системы двух двухуровневых атомов рассмотрим их состояние

$$|C_2\rangle = |s_1\rangle - |s_2\rangle, \quad (2.33)$$

где $|s_1\rangle = |01\rangle|11\rangle - |11\rangle|01\rangle$ - двухатомный синглет в первой полости, $|s_2\rangle = |02\rangle|12\rangle - |12\rangle|02\rangle$ - такой же синглет во второй полости (обозначения приведены согласно

(2.31)). Такое состояние $|C_2\rangle$ в нашей системе не сможет испустить фотон несмотря на то, что атомы имеют возможность перемещаться из полости в полость, а в разных полостях фотоны разные, и потому, например, просто состояние $|s_1\rangle$ темным не будет.

Состояния типа $|C_2\rangle$ мы назовем черными. В черном состоянии пара атомов не только не может испустить фотон, но атомы не могут и туннелировать из полости в полость по той же причине: из-за интерференционного эффекта. Объединим полости "мостами туннелирования атомов", и обозначим полученный граф через G . Назовем граф G четным, если любой цикл в нем содержит четное число ребер. Тогда независимо от оптоволокна для перемещения фотонов, для двухатомного ансамбля в четном графе будут существовать черные состояния, а для нечетного - нет. Действительно, в четном графе мы всегда сможем расставить знаки для синглетных состояний двух-атомной системы $|s_j\rangle$ в полостях j таким образом, чтобы для двух смежных полостей знаки были разными, что и обеспечит наличие черного состояния двух-атомной системы. Такую расстановку знаков назовем правильной. Для нечетного графа правильную расстановку знаков выбрать нельзя.

Пусть σ_i - знак, выбранный для полости i при некоторой правильной расстановке знаков. Тогда состояние $|C_2\rangle = \sum_i \sigma_i |s_i\rangle$ будет черным.

Пусть \mathcal{K} - некоторое разбиение четного числа $2k$ атомов на пары, G - четный граф. Тогда состояние $2k$ атомной системы в данном графе вида

$$|C(\mathcal{K})\rangle = |C_2^1\rangle \otimes |C_2^2\rangle \otimes \dots \otimes |C_2^k\rangle, \quad (2.34)$$

где верхние индексы соответствуют парам из разбиения \mathcal{K} , будет черным.

В состоянии $|C(k)\rangle$ любая динамика (движение из полости в полость или испускание фотона) блокируется аналогичной динамикой спаренного с ним партнера. Таким образом, в таком состоянии атомы не могут ни испускать света, ни перемещаться между полостями.

Любая линейная комбинация состояний вида (2.34) по разным разбиениям на пары \mathcal{K} также будет черным, и атомы, находящиеся в ней, не смогут испустить фотон. Открытым остается вопрос о том, есть ли черные состояния иного типа.

Можно определить понятие черного состояния и для ансамблей из d уровневых атомов, и сформулировать гипотезу о структуре таких состояний, подобную приведенной в параграфе 2.16, которая также будет открытым вопросом.

2.21 Относительная индивидуальность электронов

Следующей модификацией модели Тависа-Каммингса-Хаббарда будет введение понятия электрона. До сих пор мы говорили об атомах и о их возбуждениях, но эти возбуждения связаны с электронами, находящимися в атомах. Если имеется жесткая связь электронов с атомами, нет смысла вводить электроны как отдельные объекты, так как их состояния будут просто состояниями атомов. Но если мы хотим сделать нашу модель более реалистичной, мы должны допустить переходы электронов от

атома к атому, что требует введения электронов в явной форме. При этом каждый электрон будет иметь свой идентификационный номер, то есть мы будем различать электроны точно так же, как они различаются в стандартном формализме фоковских состояний, где их волновая функция антисимметризуется.

В самом простом случае у электрона в атоме есть один из двух возможных уровней орбитального возбуждения: $|0\rangle$ - основной и $|1\rangle$ - возбужденный, и один из двух возможных ориентаций спина: $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$. Электрон, находящийся на основном уровне $|0\rangle$, может поглотить фотон частоты ω , и подняться на уровень $|1\rangle$ - это и есть атомное возбуждение, а также может спуститься обратно, испустив фотон; оба перехода идут с сохранением спина. Электрон, находящийся на возбужденном уровне $|1\rangle$, может переходить на другой атом - на тот же уровень возбуждения, но в новом атоме, с сохранением спина. При этом всегда должен соблюдаться принцип запрета Паули: в одном состоянии пары "орбита+спин" может находиться не более одного электрона. Таким образом, любой переход в данное состояние, уже занятое каким-то электроном, становится для другого электрона невозможным.

Таким образом, базисное состояние атома будет теперь иметь вид

$$|atom\rangle = |level_1, level_2\rangle \quad (2.35)$$

где $|level_{1(2)}\rangle$ есть список $|e_1\dots e_k\rangle$, состоящий из одного или двух членов ($k = 1, 2$), и каждый его член имеет вид $|e_i\rangle = |id_i, spin_i\rangle$, где id_i - идентификатор электрона, идущего i -м по списку, $spin_i$ - направление его спина. Мы договоримся упорядочивать список e_1, \dots, e_k по порядковому номеру идентификаторов входящих в него электронов, тогда запись базисного состояния будет определена однозначно.

В таком формализме, где индивидуальность электронов учитывается так же, как и для атомов, состояние электронов должно быть антисимметризовано для всех электронов, находящихся на одном уровне у одного атома.

Возможен и другой подход, когда индивидуальность электронов относительна. Тогда учитывается не траектория отдельного электрона, а заполненность электронных оболочек отдельных атомов. Тогда базисное состояние атома будет иметь тот же вид (2.35), однако отдельный уровень будет иметь уже иной вид, например, $|level_1\rangle$ будет упорядоченной парой битов вида a, b , где $a = 0$ означает отсутствие на данном уровне электрона со спином \uparrow , а $a = 1$ - его присутствие, и аналогично с b , которое индексирует наличие электрона со спином вниз на данном уровне.

Относительная индивидуальность электронов является хорошим вычислительным приемом при моделировании процессов, в которых электроны только переходят между фиксированными атомами, или находятся на определенных транспортных уровнях между атомами, но не движутся изолированно от атомов в пустом пространстве; в последнем случае следует применять общий подход, предполагающий антисимметризацию их состояний.

Общий подход может представлять некоторую проблему. Если у нас просто имеется ансамбль электронов, мы можем с самого начала антисимметризовать их общее состояние по обобщенной координате: "пространственное положение + спин", записывая это состояние в виде определителя матрицы $|\Psi\rangle_{\mathcal{E}} = (\langle\psi_i|j\rangle)$, где $|\psi_i\rangle \in \mathcal{E}$, $i = 1, 2, \dots, N$ - всевозможные состояния отдельного электрона из некоторого, заранее выбранного, множества \mathcal{E} , $j \in \{1, 2, \dots, N\}$, а общее состояние такого ансамбля задать

в виде линейной комбинации состояний вида $|\Psi\rangle_{\mathcal{E}}$ по разным \mathcal{E} . Однако, если электроны с атомами находятся в запутанном состоянии, этот метод антисимметризации встретится с трудностями.

Глава 3

Квантовый детерминизм

”Бог не играет в кости” - эта фраза Эйнштейна выражает веру в разумность, то есть детерминированность мира. Принято считать, что квантовая теория опровергает эту разумность, и мы обречены видеть мир только сквозь призму стохастических процессов, не имеющих причины и происходящих чисто случайным образом ([37], [38]). И это - действительно так, но лишь для ”простых” процессов, описание которых не требует привлечения понятия запутанности и поэтому может быть дано - приближенно - в рамках классической механики: именно с такими процессами и связаны успехи квантовой теории в 20 веке. Особенностью таких процессов является возможность рассматривать окружение как марковское, то есть не имеющее долговременной памяти в рамках открытой квантовой системы ([19]) - концепции, очень хорошо работающей для всех систем, за исключением живых существ, к которым она не применима в принципе.

Распространение квантовой теории на сложные много-частичные процессы, уже не имеющие квазиклассического описания, требует привлечения формализма гильбертовых пространств с самого начала, и потому для таких процессов универсальной моделью является фейнмановский квантовый компьютер ([7]). Понимание работы этого, пока гипотетического, устройства, на первый взгляд, радикально расходится с интуитивным восприятием принципа причинности, то есть детерминированностью.

Но это противоречие - кажущееся. В конечном счете мы должны прийти именно к детерминистическому описанию сложных процессов, потому что ”Бог не играет в кости”. Но это описание ни в коем случае не будет механистическим; оно должно вытекать из квантовой механики. Это описание и будет конечной целью квантового компьютеринга. Переход от одного классического состояния к другому через короткий этап квантовой суперпозиции - вот что должен, в конечном счете, делать квантовый компьютер.

Моделировать работу квантового компьютера в режиме реального времени, исходя только из алгебраического формализма, как это делается для модельных задач квантовой физики (см., например, [39]) невозможно, так как это противоречит существованию быстрых квантовых алгоритмов (см., например, [11]). Результат работы такого алгоритма принципиально невозможно предсказать быстрее, чем он возникнет в реальности; именно это обстоятельство делает квантовый компьютер совершенно особым прибором. Для моделирования его работы, скажем, для отладки гейтов, необ-

ходимы существующие компьютеры, работающие как детерминированные машины.

Этот детерминизм проявляется в том, что в практических численных расчетах амплитуда квантовых состояний никогда не бывает бесконечно малой: в машинных расчетах всегда присутствует некий воображаемый "квант амплитуды" ϵ , такой что если абсолютная величина какой-то амплитуды становится меньше ϵ , она считается равной нулю. Это, естественно, делает практически невозможным моделирование масштабируемого квантового компьютера. Для его работы требуется получать состояния $|\Psi\rangle = \sum_{j \in J} \lambda_j |j\rangle$ с ненулевыми λ_j , такие что мощность $|J|$ множества J растет экспоненциально и хранение в памяти компьютера всех его элементов делается абсолютно не возможным. Наличие "кванта амплитуды" - есть эквивалентная форма такого запрета, поскольку в разложении $|\Psi\rangle$ должны присутствовать коэффициенты λ_j , такие что $|\lambda_j| \leq |J|^{-1/2}$.

Так как машинному расчету конструкций квантового компьютера нет альтернативы, мы обязаны рассмотреть возможность того, что "квант амплитуды" имеет физический смысл. А именно, в ансамблях из n частиц, для которых $|J| = \exp(n)$, происходит естественная декогерентность, связанная с исчезновением компонент состояний $|j\rangle$ со слишком малой амплитудой λ_j . Этот источник потерь когерентности, в случае примерного равенства абсолютных величин всех $|\lambda_j|$, вел бы к ликвидации когерентности как таковой, и, следовательно, к реальному детерминизму.

Нахождение путей к подобному детерминистическому описанию сложных систем мы рассматриваем как глубинную задачу теории квантового компьютера.

Детерминизм сложных систем должен как-то проявляться и в стандартной квантовой теории, где ϵ можно устремлять к нулю, то есть квант амплитуды должен непротиворечиво вписываться в аналитическую технику, применимую к экспериментам. Оказывается, квантовая теория допускает парадоксальный способ введения причинности - в виде квантования амплитуд элементарных событий, таким образом, что каждая отдельная порция амплитуды при некоторых условиях, будет обладать причинностью.

Такую причинность легче всего понять на примере особых состояний ансамбля атомов и поля, в котором разные компоненты суперпозиции отличаются друг от друга лишь переобозначением отдельных атомов, поведение которых в рамках данного гамильтониана одинаково. Эти состояния мы называем *связанными*. Например, два атома в оптической полости, обладающие одинаковой интенсивностью взаимодействия с полем, обладают одинаковым поведением в рамках гамильтониана Тависа-Каммингса, хотя они различимы пространственно; связанным будет состояние двух таких атомов, компоненты которого различаются только их перестановкой. Еще более простым примером связанного состояния является базисное. При этом, естественно, возникает вопрос о том, в каком базисе мы рассматриваем нашу систему.

Стандартная, копенгагенская квантовая теория считает все базисы равноправными и переход от одного к другому задается унитарным оператором перехода. В сложных системах этого быть не может - там есть один выделенный базис, в котором и формулируется условие связности. Здесь действует "соотношение неопределенностей", подобное тому, что сформулировано Бором и Гейзенбергом для измерений квантового состояния в разных базисах. Только теперь речь идет об описаниях

простых и сложных систем. Можно хорошо описывать простые системы, например, атомы водорода. Это описание - статистическое, оно опирается на гигантское число потенциальных объектов - атомов водорода. Можно научиться (мы пока практически не умеем) описывать сложные системы; там будет выделенный базис, и, детерминизм, правда не в смысле предсказания исходов квантовых измерений, а как возможность предсказания траектории сложной системы с приемлемой для нее точностью.

Но невозможно одновременно хорошо описывать все атомы, входящие в бактерию, и саму эту бактерию - это исключено! Знаменитый эксперимент, когда от измерения одного фотона зависит жизнь шредингеровского кота доставляет отличный пример. Если от измерения одной элементарной частицы зависит траектория сложнейшей "системы" - живого кота, это измерение выходит за рамки копенгагенской формулировки и не подлежит стандартному статистическому анализу. Это уже не отдельная элементарная частица, а малая сторона огромной системы частиц, так что жизнь и смерть шредингеровского кота определяется далеко не столько фотоном, а всей системой, приводящей в действие механизм его убийства. На практике, если конкретизировать эксперимент, вполне вероятно, что фотон вообще окажется здесь не причем.

Мы должны считать, что сложные системы описываются детерминистически, потому что есть такая вещь, как молекула ДНК. Этот удивительный объект настолько точно определяет траекторию живого существа, что служит образцом детерминизма для сложных систем. Надо понять, как этот сложный классический детерминизм вытекает из квантового принципиального плюрализма.

В стандартном матричном квантовом формализме заложена исходная множественность - плюрализм, заключающийся в размножении каждой порции амплитуды, при котором ее воображаемая "траектория" становится ветвящейся - в этом суть матричного умножения, служащего формальным представлением эволюции квантового состояния во времени¹. Формально можно сопоставить каждой малой порции амплитуды в любом начальном состоянии совершенно определенную такую же малую порцию амплитуды в конечном состоянии, избежав ветвлений - это очень просто. Но такое формальное назначение детерминизма ничего не дает полезного, так как здесь мы снова рабски следуем формализму копенгагенской теории и не получаем путь перехода от квантовой теории простых объектов к детерминистическому описанию сложных.

Польза будет, если детерминизм будет согласован с квантовой динамикой, определяемой гамильтонианом H . Мы разделим амплитуду каждой базисной компоненты начального состояния $|\Psi(0)\rangle$ на одинаковые кванты - малые порции. Для каждого такого кванта назначим его образ - квант амплитуды в аналогичном разбиении конечного состояния $|\Psi(t)\rangle$, причем сделаем это так, чтобы доля квантов, соответствующих переходу от состояния $|j\rangle$ к состоянию $|i\rangle$ была бы пропорциональна величине $|Re(U_{ij})| + |Im(U_{ij})|$, где $U_{ij} = \langle i|U_t|j\rangle$ - матричный элемент перехода $|j\rangle \rightarrow |i\rangle$ за время t , $U_t = exp(-\frac{iHt}{\hbar})$. Здесь мы используем такую нестандартную норму комплексных чисел, так как собираемся работать не с вероятностями, а именно с амплитудами. Это определение нормы переходит в обычное, если все амплитуды одинаковы. Если величина модуля амплитуды $|\lambda_j|$ определяется как плотность базисных состояний в

¹Выразительная иллюстрация этого принципа дана в книге [2].

точке $|j\rangle$, а амплитуды всех базисных состояний одинакова, у нас получится согласование с нашим определением. При детерминистическом же описании у нас вообще будет только одно базисное состояние, которое будет переходить в другое, так что будет полное согласование.

Сделаем два замечания.

Замечание 1. Квантовую динамику плотности одной частицы, в случае обычного динамического гамильтониана, можно, теоретически, описать роением виртуальных частиц, который подчиняется уравнениям Гамильтона-Якоби с квантовым псевдопотенциалом Бома ([40]). Этот подход называется квантовой гидродинамикой де Бройля - Бома; он давно претендует на полную переформулировку квантовой механики как таковой, например, там объясняется наличие у частиц спина. Квантовая гидродинамика, теоретически, обобщается на ансамбли частиц, движущихся по закону квантовой механики с гамильтонианом, полученным стандартной процедурой из классических выражений для энергии. Квантовая гидродинамика де Бройля - Бома применима только к таким "квази-классическим гамильтонианам" и только в виде квантования вероятности появления той или иной "частицы" в данной области пространства-времени. Микро-причинность в квантовой гидродинамике ограничивается, таким образом, только такими гамильтонианами, и фаза волновой функции может быть рассчитана после усреднения по импульсам в каждой элементарной ячейке пространства-времени; это можно сделать только если вычислительный ресурс сконцентрирован на одной частице. В гамильтонианах типа Тависа-Каммингса динамические характеристики отдельных атомов отсутствуют вообще, и потому роение де-Бройля Бома не годится для установления свойств причинности в ТС-подобных моделях, как и вообще в моделях квантовых компьютеров.

Серьезным концептуальным недостатком квантовой гидродинамики является то, что здесь "экземпляры" одной реальной частицы, которые могут относиться к совершенно разным траекториям, к тому же взятым в разные моменты времени, "взаимодействуют" друг с другом по классическому закону, что уже совершенно непонятно. Этот подход ничего не дает в смысле упрощения расчетов для сложных систем - он их только усложняет.

Замечание 2. Амплитуды в виде отдельных квантов возможна в сложных системах, где велико число частиц, так что вероятность оказывается "размазанной" по огромному числу взаимно ортогональных базисных состояний. В том случае микро-причинность будет означать, что траектория всей системы однозначно определяется ее текущей конфигурацией, и вероятностный характер квантовой динамики превращается в строгий детерминизм. Поиск такой детерминированности может быть также связан с интерпретациями квантовой теории, в частности с так называемой контекстной зависимостью результатов экспериментов от окружения (см. [41]). Здесь важны точные формулировки, так как контекстная зависимость иногда ошибочно трактуется как введение "скрытых параметров" квантовой теории. В действительности, такая зависимость есть просто учет квантовой нелокальности запутанных состояний, подтвержденной в многочисленных экспериментах (см., например, [42],[43]).

Сначала мы покажем, что описание миркомира не может быть локальным. Затем

мы обсудим возможность введения микропричинности для связанных состояний, что будет косвенным доводом в пользу возможности детерминизма для сложных систем.

3.1 Квантовое дальноедействие

Схема эксперимента, доказывающего наличие квантового мгновенного действия на расстоянии, была предложена Дж.Беллом в начале 60-х годов ([44],[45]); сами же эксперименты были проведены впервые в 1980-х годах А.Аспеком и А.Цайлингером ([42], [43], а также ссылки в работах [46] и [47]). В этих экспериментах запутанность проявляется не на ангстремных расстояниях, как в молекуле водорода, а на расстояниях в несколько сотен километров.

В эксперименте получают состояния вида $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|00\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|11\rangle$ для фотонов, которые детектируются на расстояниях с несколько сотен километров между ними. Представим себе, что первый фотон детектируется наблюдателем Алисой, а второй - Бобом. Условия эксперимента таковы, что у Алисы есть две возможности выбрать детектор, то есть измерительный базис в пространстве состояний ее кубита, и у Боба - тоже две возможности. А именно, Алиса может выбрать собственные вектора эрмитова оператора σ_x или σ_z , а Боб: $(\sigma_x + \sigma_z)/\sqrt{2}$ или $(\sigma_x - \sigma_z)/\sqrt{2}$ соответственно. Поскольку у всех перечисленных операторов собственные значения только 1 или -1 , мы будем считать, что Алиса получила значение X или Y , а Боб - a или b соответственно, в вышеприведенном порядке. Например, можем условиться, что 1 означает, что детектируется фотон с горизонтальной поляризацией, а -1 - с вертикальной (относительно соответствующего положения детектора). Это эквивалентно выбору каждым участником эксперимента *наблюдаемой* (см. Главу 1) из двух возможностей, для каждой - с вероятностью $1/2$.

Определим случайную величину ξ как произведение результатов измерений Алисы и Боба, взятое со знаком минус, в том случае, когда выборы детекторов были Y и b соответственно, и произведение результатов со знаком плюс во всех других случаях. Значение такой величины получается простым умножением и надлежащим изменением знака, после того, как Алиса и Боб выяснили, какую ориентацию детекторов избрал каждый из них; в ходе самого измерения они не согласовывают своего выбора.

Алиса и Боб получают одну за одной пары бифотонов в состоянии $\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$ и производят свои испытания со случайно выбранными наблюдаемыми, составляя протокол экспериментов. Затем сходятся вместе и вычисляют значение случайной величины ξ , которая равна произведению значений наблюдаемых Алисы и Боба, если их выбор детекторов был: Y, a или X, b или Y, a , и произведению этих значений с обратным знаком, если выбор был Y, b .

При поверхностном взгляде может показаться, что X, Y, a, b есть случайные величины, с которыми можно оперировать, как с обычными числами. Временно примем такую точку зрения, и проведем некоторый несложный подсчет математического ожидания E величины ξ . Мы вынесем X и Y за скобки в выражении

$$E = Xa + Xb + Ya - Yb, \quad (3.1)$$

которое получится, если сложить все возможные результаты вычислений ξ . Тогда получится, что в одной скобке стоит 0, а в другой - число, по модулю равное 2. Тогда можно оценить E как $|E| = 2/4 = 1/2$, поскольку все четыре выбора ориентаций детектора равновероятны. Естественно, для случайных величин X, Y, a, b мы будем иметь точно такое же неравенство, причем безразлично, являются ли они зависимыми, или нет. Значит, и для математического ожидания $M(\xi)$ величины ξ мы получим неравенство

$$M(\xi) \leq 1/2, \quad (3.2)$$

которое называется неравенством Белла.

А теперь подсчитаем $M(\xi)$ для выписанных нами наблюдаемых с помощью квантово - механического правила $\langle A \rangle_\Psi = \text{tr}(\rho_\Psi A)$ определения среднего значения (собственных чисел) эрмитова оператора A в состоянии Ψ^2 . Несложный расчет³ покажет, что $M(\xi) = \frac{1}{4}2\sqrt{2}$ (множитель $1/4$ везде возникает из-за равновероятности выбора всех 4 комбинаций детекторов). Именно это и детектируется в эксперименте, к которому мы еще вернемся. В чем же дело? Где мы допустили ошибку в рассуждении? Очевидно, возможность ее совершить только одна: предположение о том, что результаты измерений Алисы и Боба выражаются как случайные величины X, Y, a, b использовалось нами нестрого, в силу того, что мы не применяли определения случайной величины. Сейчас мы восполним этот пробел, и увидим, как это приведет нас к новому пониманию смысла эксперимента с двумя запутанными фотонами.

Рассмотрим эксперимент более строго. Для этого напомним основные понятия колмогоровской теории вероятности. Она включает 3 объекта: вероятностное пространство, случайные величины, и их численные характеристики. Сначала определим центральное понятие: множество элементарных исходов. Это (у нас всегда конечное) множество

$$\Omega = \{\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_k\},$$

каждый элемент которого отражает всю сущность мира, играющую роль для рассматриваемого эксперимента. Это означает, что выбрав какой либо элемент $\omega_j \in \Omega$, мы автоматически выбираем исход любого эксперимента из рассматриваемого набора, включая положение детектора, состояние всех элементарных частиц в нем, а также всех параметров, которые мы даже не знаем, но которые определяют, каков будет исход эксперимента⁴.

В силу негибкой формы "запрета на скрытые параметры" в копенгагенской квантовой механике, мы в ее рамках не имеем возможности рассмотреть даже приближение множества Ω . Таким образом, точное рассмотрение квантово-механических задач для многих частиц обязано выходить за пределы копенгагенской квантовой теории. Выход за пределы подразумевает не нарушение законов, а рассмотрение сущностей, недоступных в копенгагенской теории. Можно выразиться иначе. Стандартные за-

²Оно вытекает из определения математического ожидания для собственных значений эрмитова оператора A : $\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle$. Читателю предлагается а) доказать, что математическое ожидание наблюдаемой A в состоянии $|\Psi\rangle$ вычисляется по данной формуле, и б) приведенную в тексте формулу, исходя из данной.

³Нужно рассмотреть все случаи ориентации детекторов, и для каждого составить редуцированную матрицу плотности нашего состояния, а затем применить правило полной вероятности.

⁴То обстоятельство, что мы не знаем структуры Ω , не играет никакой роли. Мы все равно должны рассматривать этот объект явно, если говорим о вероятностях.

дачи квантовой теории, подразумевающие использование аппарата волновых функций и проекций, не должны использовать скрытых параметров, то есть не должны касаться вероятностной структуры волновой функции. К стандартным относятся задачи о поведении одной квантовой частицы или сводящиеся к ним. Однако наша задача о запутанных фотонах не является стандартной, поскольку она касается уже двух частиц. Хотя запутанное состояние двух частиц в некотором смысле можно свести к одночастичному, но операторы наблюдения, используемые Алисой и Бобом существенно различные, и потому мы имеем дело с существенно не одночастичным квантовым состоянием. Иногда для решения таких задач хватает арсенала копенгагенской теории, но наш случай явно не относится к этой категории, и потому мы должны для нахождения решения использовать теорию вероятностей, рассмотрев множество элементарных исходов Ω . Ограничение стандартного формализма здесь в том, что мы должны считать это множество конечным; хотя в данном случае это никак не скажется на выводах.

На множестве S всех подмножеств Ω надо определить так называемую вероятность - функцию вида $P : S \rightarrow [0, 1]$, удовлетворяющую аксиомам вероятности: $P(A \cup B) = P(A) + P(B)$ для непересекающихся $A, B \in S$, $P(\emptyset) = 0$, $P(\Omega) = 1$. Определить P очень просто: $P(A)$ есть частное от деления числа всех элементов A на k . Это иногда называют частотным определением вероятности.

Случайной величиной называется любая функция вида

$$\xi : \Omega \rightarrow R.$$

Мы можем вычислять математическое ожидание случайной величины ξ по стандартной формуле $M(\xi) = \sum_{x \in R} xP(\{\omega \in \Omega \mid \xi(\omega) = x\})$.

Надо сразу сказать, что бессмысленно искать "объяснения" эксперимента с бифотонами, не прибегая к приведенному выше строгому определению вероятности. Единственная математически точная формулировка понятия "вероятность" вытекает из приведенного определения. Теперь рассмотрим, как этот арсенал применяется к рассматриваемой ситуации.

С точки зрения квантовой механики, состояние $|\Psi\rangle$ двух рассматриваемых фотонов представляет единый вектор в гильбертовом пространстве состояний. Это означает, что существует такое пространство элементарных исходов Ω , что все величины X, Y, a, b являются случайными величинами над этим пространством, то есть функциями от элементарных исходов: $X(\omega), Y(\omega), a(\omega), b(\omega)$.

Теперь мы должны переформулировать условия эксперимента на языке теории вероятностей. У нас есть следующая ситуация. Алиса и Боб, независимо друг от друга и совершенно случайным образом выбирают каждый какое-либо одно состояние детектора из имеющихся у него двух возможностей, сразу же после чего каждый фотодетектор детектирует попавший в него фотон (конкретный результат измерения есть 1, если получено состояние $|\epsilon_1\rangle$ из базиса собственных векторов оператора наблюдаемой, и -1 - если $|\epsilon_2\rangle$, - выбор из этих альтернатив осуществляется исходя из особенностей детектора). Это означает, что выбор ориентации детектора Алисой входит в некоторый объект ω_1 , а выбор ориентации детектора Боба входит в объект ω_2 , так что элементарный случайный исход одного эксперимента $\omega \in \Omega$ имеет

вид (ω_1, ω_2) . Если у фотонов есть какие-либо скрытые параметры, то параметры фотона, прилетевшего к Алисе, мы считаем входящими в ω_1 , а для фотона, прилетевшего к Бобу - в ω_2 . Таким образом, мы должны предположить, что $\Omega = \Omega_1 \times \Omega_2$, где множества Ω_1 и Ω_2 соответствуют выборам Алисы и Боба соответственно. Такое предположение выражает так называемую свободу воли у обоих участников эксперимента. Отсутствие свободы воли означало бы попросту то, что выбор, скажем, Алисы, автоматически определял бы и выбор Боба. В реальных экспериментах вопрос с ориентацией решается не людьми, а электроникой, исходя из таких событий, которые с точки зрения здравого смысла, обязаны быть независимыми (например, потоки посторонних фотонов из разных областей космического пространства). Свобода воли участников эксперимента является необходимым предположением, если мы занимаемся наукой.

Теперь рассмотрим, что есть случайные величины X, Y, a, b . Поскольку ω_1 автоматически определяет ориентацию детектора Алисы, обозначим через Ω_1^X такое подмножество Ω_1 , которое соответствует ориентации детектора X , и аналогично обозначим подмножества, соответствующие Y, a, b . При этом Ω_1 будет суммой непересекающихся подмножеств Ω_1^X и Ω_1^Y , а Ω_2 - суммой также не пересекающихся Ω_2^a и Ω_2^b . Мы должны принять, что результат детектирования Алисы есть случайная величина $\xi_1(\omega_1, \omega_2)$, а результат детектирования Боба есть случайная величина $\xi_2(\omega_1, \omega_2)$, так что общий результат есть декартово произведение $\xi = (\xi_1, \xi_2)$, причем X есть ограничение функции $\xi(\omega_1, \omega_2)$ на область $\omega_1 \in \Omega_1^X$, Y есть ограничение функции $\xi(\omega_1, \omega_2)$ на область $\omega_1 \in \Omega_1^Y$, a есть ограничение функции ξ на область $\omega_2 \in \Omega_2^a$, и b - на область $\omega_2 \in \Omega_2^b$. Для того, чтобы сделать величины X, Y, a, b определенными на всем множестве элементарных исходов Ω , мы дополним их нулем в тех областях, где они не определены нами явно.

Определим случайную величину ξ так:

$$\xi(\omega_1, \omega_2) = \begin{cases} \xi_1(\omega_1, \omega_2)\xi_2(\omega_1, \omega_2), & \text{если } \omega_1 \notin \Omega_1^Y \text{ или } \omega_2 \notin \Omega_2^b, \\ -\xi_1(\omega_1, \omega_2)\xi_2(\omega_1, \omega_2), & \text{если } \omega_1 \in \Omega_1^Y \text{ и } \omega_2 \in \Omega_2^b. \end{cases}$$

Тогда мы имеем: $\xi = Xa + Xb + Ya - Yb$.

Посчитаем ее матожидание по приведенному определению, выбрав частотное определение вероятности. У нас получится

$$M(\xi) = \frac{1}{k} \sum_{\omega_1, \omega_2} X(\omega_1, \omega_2)a(\omega_1, \omega_2) + X(\omega_1, \omega_2)b(\omega_1, \omega_2) + Y(\omega_1, \omega_2)a(\omega_1, \omega_2) - Y(\omega_1, \omega_2)b(\omega_1, \omega_2).$$

Отметим, что мы при этом пользуемся тем, что многие называют реализмом. Это означает, что мы имеем право неоднократно пользоваться ограниченным количеством букв ω_j так, что любые их комбинации будут соответствовать реальным экспериментам по детектированию фотонов. По иному это можно сформулировать как свободу воли при выборе из конечного набора вариантов реальности. Нетрудно убедиться, что с данным выражением для матожидания невозможно поступить так, как это было выше проделано с числами при доказательстве неравенства Белла (3.2), в силу наличия аргументов у случайных величин. Действительно, поскольку результат измерения одного из участников зависит от элементарных исходов для

них обоих, мы должны были бы вместо выражения (3.1) написать другое выражение: $E = Xa + X'b + Ya' - Y'b'$, и у нас не получилось бы вынесения за скобки общих множителей, то есть наше наивное рассуждение было бы неверным.

Однако предположим, что, помимо очевидного для нас реализма, у нас имеется еще и так называемая локальность. Кратко говоря, локальность означает, что результат измерения Алисы никак не зависит от ориентации детектора Боба и наоборот. Мы обсудим физический смысл локальности ниже. Формально локальность означает, что X и Y зависят только от ω_1 , а a и b - только от ω_2 . Тогда мы сможем проделать с выражением для математического ожидания тот же самый трюк, что и при доказательстве неравенства Белла. А именно, мы сгруппируем все слагаемые большой суммы в группы по 4 вида

$$X(\omega_1)a(\omega'_2) + X(\omega_1)b(\omega_2) + Y(\omega'_1)a(\omega'_2) - Y(\omega'_1)b(\omega_2),$$

состоящие из ненулевых членов, так что внутри каждой группы можно будет вынести X и Y за скобки, и так же как и выше доказать, что эта группа не превышает 2. Поскольку в группе задействуется 4 различных ω , мы получаем, что математическое ожидание ξ не превосходит 1/2. То есть локальность ведет к выполнению неравенства Белла. Таким образом, мы пришли к выводу, что из эксперимента по детектированию бифотонов вытекает нелокальность квантовой механики.

Теперь рассмотрим нелокальность подробнее. Она означает, что случайные величины, относящиеся к Бобу, зависят не только от его компоненты элементарного исхода, но и от компоненты, принадлежащей Алисе, и наоборот, то есть все исходы X, Y, a, b зависят как от ω_1 , так и от ω_2 .

Как это может быть реализовано? Только так: есть некоторый объект $\tilde{\omega}$, который путешествует от Алисы к Бобу и обратно, перенося информацию о другой половине элементарного исхода соответствующего эксперимента. Если этот объект $\tilde{\omega}$ подчиняется ограничению релятивизма, и не может передвигаться быстрее света, то мы можем вывести ограничения на времена испускания бифотона источником и времен детектирования прибытия каждого из фотонов Алисой и Бобом. Пусть Δt - естественная неопределенность момента испускания бифотона источником, о которой мы предполагаем, что все бифотоны, время испускания которых лежит вне этого диапазона, не играют никакой роли для получения статистики в данном эксперименте. Наличие такого интервала есть непосредственное следствие соотношения неопределенности "энергия-время". Теперь мы предположим, что часы Алисы, Боба, и источника бифотона точно синхронизированы, и введем величину δt , равную разности момента срабатывания детектора и момента выбора его положения (то есть выбора между X и Y и между a и b). Тогда, если материальный объект $\tilde{\omega}$, переносящий информацию о другой половине элементарного исхода, подчиняется релятивизму, то должно выполняться неравенство

$$\Delta t + \delta t \geq d/c, \quad (3.3)$$

где d есть расстояние между Алисой или Бобом, и источником бифотонов, c скорость света.

Эксперименты свидетельствуют, что это неравенство нарушается для бифотонов, детектируемых на расстояниях в несколько сот километров, что имеет совершенно

фундаментальные следствия для квантовой теории. Действительно, нарушение (3.3) говорит о том, что $\tilde{\omega}$ не может быть скрытым параметром ни одного из фотонов.⁵ То есть $\tilde{\omega}$ непосредственно переносит информацию об ориентации детекторов от Алисы в Бобу или наоборот. Этот эффект принято называть "квантовой нелокальностью"; он непосредственно вытекает из стандартного квантового формализма, но в действительности, делает необходимым как раз переход от узких копенгагенских рамок к пост-квантовой теории, в которой случайные исходы ω должны обрести реальный смысл, а не служить лишь формальной цели - математической согласованности.⁶

Квантовая теория полностью согласуется с принципом релятивизма, согласно которому никакая информация не может перемещаться со скоростью, превосходящей скорость света. Формально это выражается в том, что статистика измерений Алисы никак не зависит от того, измеряет ли Боб свой кубит или нет. То есть с помощью запутанного квантового состояния невозможно передавать информацию, генерированную участниками эксперимента друг другу. Но мы только что выяснили, что это ограничение не распространяется на информацию об элементарных исходах в конкретных экспериментах о измерении квантовых состояний, когда они собраны воедино!

Из этого можно сделать только один вывод. Имеется своего рода административная система, взаимодействие с которой и определяет реальность. Это взаимодействие в точности соответствует взаимодействию пользователя с компьютером. Пользователь, то есть экспериментатор, определяет условия (положение детекторов), после чего административная система, работающая с элементарными исходами, выдает результат эксперимента. При этом время, потраченное административной системой на согласование заданных различными пользователями условий, не является реальным физическим временем.

Мы используем здесь программистскую терминологию, в которой административная система означает вполне определенную вещь, которая должна входить в пост-квантовый формализм, и потому не должна вызывать никаких иных ассоциаций. Нелокальность элементарных исходов ω говорит в пользу того, что эти исходы могут обрести реальный смысл именно для сложных систем и процессов, затрагивающих большие пространственные области. Для простых же систем, например, для одного единственного атома или даже молекулы нелокальность сама по себе не играет большой роли: она проявляется в достаточно тонком эксперименте, описанном нами, и эффект от нее для простых систем даже меньше релятивистских поправок.

Однако квантовое дальноедействие позволяет создавать удивительные протоколы информационного обмена, один из которых мы рассмотрим ниже.

⁵В реальных экспериментах, как правило, проверяют не нарушение (3.3), а непосредственно предотвращают обратное перенесение информации самими фотонами, выставляя заглушки после их прохождения.

⁶Познакомиться с различными точками зрения на квантовую нелокальность можно, например, по статьям из [48].

3.2 Квантовая телепортация

Квантовая телепортация - перемещение на расстояние неизвестного квантового состояния, причем при этом реально передается только классическая информация. Этот протокол был опубликован в работе [27]. Пусть у Алисы с Бобом есть ЭПР - связь: у каждого кубит, причем эта пара кубитов находится в состоянии $|EPR\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_A0_B\rangle + |1_A1_B\rangle)$. А еще у Алисы есть дополнительный кубит, находящийся в неизвестном им обоим состоянии $|\psi_C\rangle = \lambda|0_C\rangle + \mu|1_C\rangle$, и Алиса хочет передать это неизвестное состояние $|\psi_C\rangle$ Бобу.

Если бы у Алисы было очень много образцов состояния $|\psi_C\rangle$, никакой проблемы бы не было: она могла бы осуществить квантовую томографию, проводя многочисленные измерения, и узнать λ и μ с высокой точностью. Но все дело в том, что состояние $|\psi_C\rangle$ - уникально, и томография не проходит.

Вот что делает Алиса. Сначала она реализует оператор $CNOT|C, A\rangle$, так что управляющий кубит - с неизвестным состоянием, а управляемый - ее половинка ЭПР - связи. Затем она делает над кубитом C операцию Адамара H . И наконец - измеряет оба своих кубита, посылая результат измерения Бобу. Этот результат - два бита: что получилось в кубите A и в кубите C . Этой информации Бобу достаточно, чтобы восстановить на своем кубите B состояние $|\psi_C\rangle$, которое было уничтожено Алисой в ходе ее манипуляций и измерений.

Выпишем последовательно квантовые состояния трех кубитов: A , B и C , получающиеся в ходе описанной процедуры.

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_A0_B\rangle + |1_A1_B\rangle)(|\lambda|0_C\rangle + \mu|1_C\rangle) = \\
& \frac{1}{\sqrt{2}}(\lambda|000\rangle + \lambda|110\rangle + \mu|001\rangle + \mu|111\rangle) \rightarrow_{CNOT} \\
& \frac{1}{\sqrt{2}}(\lambda|000\rangle + \lambda|110\rangle + \mu|101\rangle + \mu|011\rangle) \rightarrow_{H_C} \\
& \frac{1}{2}(\lambda|00\rangle(|0\rangle + |1\rangle) + \lambda(|11\rangle(|0\rangle + |1\rangle) \\
& \quad + \mu|10\rangle(|0\rangle - |1\rangle) + \mu|01\rangle(|0\rangle - |1\rangle)) = \\
& \frac{1}{2}(\lambda|000\rangle + \lambda|001\rangle + \lambda|110\rangle + \lambda|111\rangle + \\
& \quad \mu|100\rangle - \mu|101\rangle + \mu|010\rangle - \mu|011\rangle).
\end{aligned} \tag{3.4}$$

Пусть Алиса получила результат $A = C = 0$. Тогда из результата преобразований (3.4) вытекает, что у Боба уже есть состояние $|\psi_C\rangle$, во всех иных случаях Бобу надо совершить над своим кубитом простую операцию, зависящую от присланного ему результата измерений Алисы, и он обретет это состояние на своем кубите (проверьте это самостоятельно!).

Итак, для того, чтобы Боб смог восстановить неизвестное состояние, оно должно сначала исчезнуть у Алисы.

Невозможность одновременного появления неизвестного, наугад выбранного состояния $|\psi_C\rangle$ у Алисы и у Боба невозможно. Клонирование квантовых состояний запрещено. Не существует унитарной операции, которая бы для любого состояния $|\psi\rangle$ выглядела бы как

$$U|\psi\rangle|0\rangle = |\psi\rangle|\psi\rangle. \tag{3.5}$$

Докажите это сами!

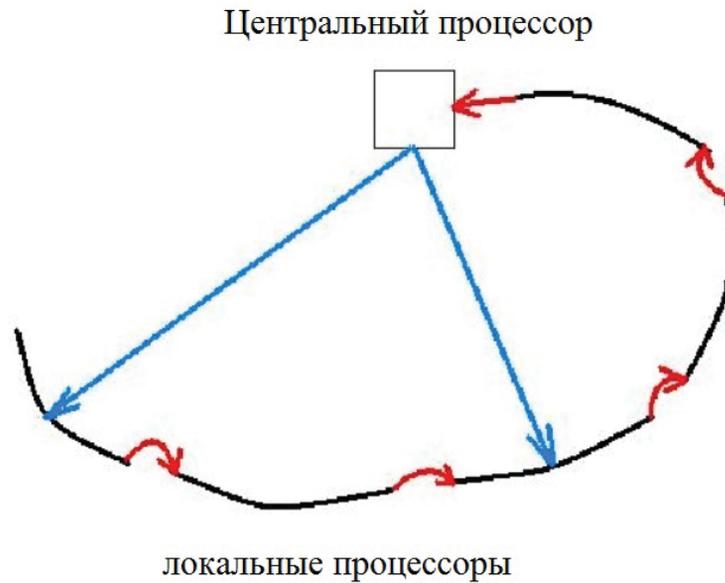


Рис. 3.1: Схема одностороннего управления

Телепортация именно передает неизвестное состояние по "линии связи" ЭПР типа, перемещая только классическую информацию.

3.3 Распределенные квантовые вычисления

Построение квантового компьютера - сложный и многосторонний процесс, и важную роль в нем играют ограниченные модели квантовых вычислений, например, квантовые ветвящиеся программы ([49]) или программы моделирования биохимии ([50].) Преимущество квантовых методов может заключаться не в ускорении вычислений в обычном смысле, а в использовании отдельных элементов квантовой природы для получения финального выигрыша в качестве полученного результата.

Здесь мы продемонстрируем, как нарушение неравенства Белла может помочь повысить эффективность некоторых распределенных вычислений. Пример, который мы приведем (см. [51]), искусственно построен и призван лишь иллюстрировать возможность практического использования удивительного свойства квантовой нелокальности; к тому же эффект от этого использования не слишком велик. Однако данный пример обладает схожестью с биологическим процессом роста сложных молекул с линейной организацией первичной структуры, и потому он говорит о том, что поиск дальнейших приложений квантовой нелокальности может быть плодотворным.

3.3.1 Одностороннее управление

Мы покажем, как эта цель может быть достигнута с использованием нарушения неравенства Белла. Рассмотрим модель распределенных вычислений с односторонним управлением, где все вычислительные устройства подразделяются на централь-

ный процессор (CPU) и удаленные периферийные устройства, способные непосредственно получать команды от CPU. Обратная передача информации от периферийных устройств к центральному процессору не происходит непосредственно, но только в виде последовательного трансфера через цепочку периферийных устройств, которые локально взаимодействуют друг с другом, как показано на рисунке 3.1. В примере, который мы разберем, использование запутанных состояний фотонов в управлении дает увеличение качества результата вычисления, превосходящее результат классического управления примерно в 1.138 раз. Это - задача синтеза двух удаленных цепочек, состоящих из отдельных звеньев, осуществляемого на двух периферийных устройствах.

Центральный процессор посылает сигнал к двум периферийным процессорам, каждый из которых отвечает за соответствующую подсистему всей системы. Например, CPU решает задачу синтеза на одной подсистеме некоторого полимера A , имеющего особую активность, и, одновременно - задачу синтеза другого полимера B , который подавляет (или, наоборот, интенсифицирует) данную активность, уже на другой подсистеме. CPU посылает соответствующий сигнал на обе подсистемы, и переключается на другие задания, скажем, на синтез другой пары полимеров A' и B' .

Что случилось бы, если периферийные процессоры стали бы посылать сигналы друг другу непосредственно? Пусть у нас есть m подсистем, каждая из которых управляется своим собственным процессором. Для корректной адресации сигналов между всеми возможными парами (их порядка m^2) мы должны были бы загрузить CPU этой работой. Центральный процессор вынужден был бы ждать время cD для каждой пары, где D - расстояние между периферийными процессорами, c - скорость света, прежде чем переключиться на следующее задание. Если m достаточно велико (в реальных био-системах это число очень велико), такая схема вычислений, основанная на адресации сигналов через CPU привела бы к фатальной задержке управления, что сделало бы всю схему непригодной.

Мы, таким образом, приходим к необходимости одностороннего управления, когда CPU посылает сигналы периферийным процессорам немедленно, не ожидая отклика от них. Обратная информация же поступает на CPU не непосредственно, а через цепочку посредников, как в клеточном автомате. Эта форма организации обработки информации может быть эффективна в живых организмах, так как в них центральная нервная система, играющая роль CPU, должна быть свободна от рутинной работы по управлению метаболизмом.

3.3.2 Квантовые бифотонные сигналы

В рассматриваемой ситуации использование CPU бифотонов (запутанных состояний фотонов) дает преимущество по сравнению с чисто классическим CPU. Для того, чтобы продемонстрировать это, мы рассмотрим следующую абстрактную задачу. Предположим, что требуется синтезировать две полимерные молекулы, химическая структура которых имеет вид $C_1 = (c_1^1, c_2^1, \dots, c_M^1)$, $C_2 = (c_1^2, c_2^2, \dots, c_M^2)$, так что они состоят из моноблоков двух типов: a и b : $c_i^j \in \{a, b\}$ (см. рисунок 3.2).

Качество такой взаимной сборки двух полимеров проверяется наложением го-

товых цепочек друг на друга: первая C_1 на вторую C_2 , и критерий качества есть степень склейки этих цепочек. Каждый моноблок имеет внешнюю (выпуклую) и внутреннюю (вогнутую) поверхности, где последняя снабжена специальным шариком, расположенным в ее центре. В фиксированной позиции два моноблока могут склеиться в одном из следующих случаев: 1) их поверхности или половины поверхностей полностью совмещаются вертикальным смещением, или 2) их центральные шарики при таком сдвиге оказываются в одной точке, как показано на рисунке 3.2.

Физическая структура полимера, от которой зависит склейка, определяется не только последовательностью моноблоков в цепочке; склейка зависит также от дополнительной опции: их точного расположения относительно друг друга в цепочке. Соседние моноблоки в полимере соединены гибкой связью, которая может либо сжаться на dx , что составляет четверть длины моноблока, либо растянуться на такую же длину. Мы в этих случаях скажем, что моноблок сдвинут назад или вперед соответственно относительно положения равновесия связи. В ходе синтеза моноблоки устанавливаются с этими ограничениями и их позиции фиксируются. Затем две цепочки накладываются друг на друга и для каждой пары налегающих моноблоков устанавливается наличие склейки. Из принятого ограничения вытекает, что если в такой паре налегающих моноблоков они были сдвинуты в одну сторону, они склеиваются так же, как если бы сдвигов не было; а если в разные - результирующий сдвиг составляет половину длины моноблока.

После этого вычисляется число склеенных пар наложенных друг на друга моноблоков и это число считается численной характеристикой качества сборки пары цепочек.

Синтез цепочек происходит как последовательное присоединение к каждой из существующих цепочек нового моноблока - того, который первым появился в точке сборки одной и другой цепочки. Моноблоки берутся из среды, окружающей точки роста, где они находятся в хаотическом движении и оба типа распределены поровну. При этом можно сдвинуть вновь присоединенный моноблок либо назад, либо вперед на расстояние dx . Мы обозначим сдвиг вперед через $+$, сдвиг назад - через $-$. Каждая j -я пара моноблоков в обеих цепочках, наложенных друг на друга после синтеза, соответствуют, таким образом, четверке $c_j^1 c_j^2 s_j^1 s_j^2$, где последние два члена являются сдвигами $s_j^{1,2} \in \{+, -\}$.

Из наших правил (см. рисунок 3.2) следует, что склейка соответствует парам наложенных моноблоков вида: $aa++(--)$, $ab++(--)$, $bb++(--)$, $ba+-(-+)$, тогда как пары иного вида: $aa+-(-+)$, $ab+-(-+)$, $bb+-(-+)$, $ab++(--)$ склейки не дают. Отметим несимметричное поведение моноблоков типа a и b : пары ab и ba склеиваются по разному при одинаковых сдвигах. Эта асимметрия выглядит как асимметрия в неравенстве Белла, что и даст нам повышение качества результирующей склейки при бифотонном управлении по сравнению с классическим управлением.

Мы предполагаем, что рост полимера C_1 идет в одной точке, а рост C_2 - в другой, причем эти точки разделены большим расстоянием (например, происходят в разных странах). Задача в том, чтобы организовать этот синтез так, чтобы число несклеенных пар наложенных моноблоков была бы минимальной, или, иначе говоря, чтобы число склеек было максимальным.

Подобная задача может возникнуть при моделировании синтеза гена и антигена

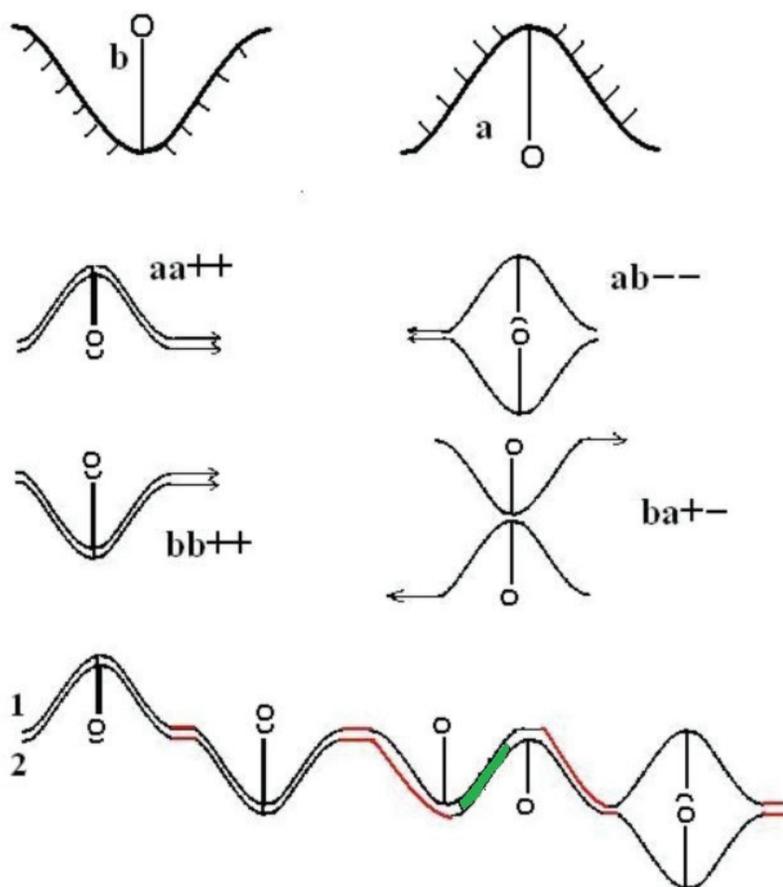


Рис. 3.2: Наложение двух полимеров. Стрелки обозначают направление растяжения связей (красный цвет) между соседними моноблоками при синтезе полимера. Наложения вида $aa++(--)$, $ab++(--)$, $bb++(--)$, $ba+-(-+)$ дают склейку, остальные склейки не дают. Внизу все пары дают склейки.

в разных живых клетках. Мы можем создать информационный канал управления ими из одного центра; правда, при большой дистанции между точками сборки такое управление способно замедлить сам процесс сборки, что для реальных полимеров представляет отдельную проблему, выходящую за рамки нашей модели.

Покажем, как использовать бифотонное управление процессом одновременного синтеза для получения квантового превосходства.

Итак, для минимизации критических (несклеенных) пар моноблоков мы используем сигналы СРУ в виде EPR состояний $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$, и подсчитаем число критических пар, возникающих при таком управлении. Если бы управление было классическим, в обозначениях из предыдущего параграфа мы имели бы неравенство Белла

$$E(a_1b_2 + b_1b_2 + a_1a_2 - b_1a_2) \leq 2. \quad (3.6)$$

Примем следующее соглашение. Нижний индекс обозначает точку сборки (номер полимера) 1 или 2. Буква a или b обозначает тип моноблока, присоединяемого к цепочке, знак соответствует направлению сдвига этого моноблока, как мы условились. Результат присоединения моноблоков в обеих точках сборки определен, если для 1 и 2 нижнего индекса мы имеем во-первых, букву a или b , и во-вторых, знак сдвига $+$ или $-$. Буква a или b всегда определяет тип моноблока, ближайшего к точке сборки в данный момент.

Работающий на принципах классической физики центральный процессор может, таким образом, управлять сборкой только выбирая знак сдвига $+$ или $-$ в обеих точках сборки. СРУ выбирает эти знаки одновременно, так что никакое ожидание прохождения сигнала между точками сборки не может замедлить процесс: информация о знаке появляется в обеих точках одновременно, и как раз в момент, когда она нужна. Если бы мы допустили задержку по времени, можно было бы сделать сборку вообще идеальной, избежав критических пар совсем.

Для классического типа корреляции между выбором знаков мы имеем неравенство Белла. Для каждого шага процесса мы введем индекс критичности $Cr = +1$, если наложение соответствующих моноблоков не критично (есть склейка), и $Cr = -1$ в противном случае. Нас интересует результирующее число не критических наложений по всей длине цепочек синтезированных полимеров: $NonCr$; наша цель - сделать это число максимальным.

Для одной пары моноблоков мы имеем $NonCr = \frac{1}{2}(1 + Cr)$. Так как все комбинации aa, ab, ba, bb для обеих точек синтеза имеют одинаковые вероятности $1/4$, для среднего значения $E(Cr)$ индекса критичности мы имеем

$$E(Cr) = \frac{1}{4}(a_1b_2 + b_1b_2 + a_1a_2 - b_1a_2), \quad (3.7)$$

где буква a или b с индексом обозначает случайную величину, соответствующую выбору типа моноблока со знаком ± 1 , зависящим от знака сдвига, выбранного для нее.

Для классического управления ввиду неравенства Белла для $E(Cr)$ вида (3.7)

среднее число критических наложений удовлетворяет неравенству

$$E(NonCr) \leq \frac{1}{2} \left(1 + \frac{2}{4}\right) = \frac{3}{4} = 0.75.$$

В случае квантового бифотонного управления ситуация будет иной. Здесь мы не можем рассматривать a_1 и b_1 как случайные величины, определенные на отдельных множествах элементарных исходов для a_2 , b_2 , то есть оценка (3.6) не будет следовать из очевидного выражения $a(X + Y) + b(X - Y) \leq 2$ для чисел $a, b, X, Y = \pm 1$; мы здесь должны писать $a_1 b_2 + b_1 b'_2 + a'_1 a_2 - b'_1 a'_2$ вместо левой части неравенства (3.6), что делает данное неравенство неверным.

Для бифотонного управления наши случайные величины определены на одном и том же множестве элементарных исходов, мы не имеем неравенства Белла и должны считать вероятности напрямую, используя правило Борна.

Пусть для каждой из точек сборки у нас имеется фотодетектор, который может быть мгновенно ориентирован в соответствии с наблюдаемыми, которые мы ассоциируем с a и b . Для первой и второй точек сборки эти наблюдаемые пусть имеют вид:

$$\begin{aligned} a_1 &= \sigma_x, & b_1 &= \sigma_z, \\ a_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_x - \sigma_z), & b_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_x + \sigma_z) \end{aligned} \quad (3.8)$$

соответственно. Здесь мы не рассматриваем интересный вопрос о практической реализации таких наблюдаемых.

Условимся, что тип текущего моноблока определяет положение детектора для обеих точек и знак сдвига моноблока есть значение соответствующей наблюдаемой. Так как все комбинации типов моноблоков aa, ab, ba, bb равновероятны, мы можем использовать формулу (3.7) для среднего значения индекса критичности.

Теперь имеем: $E = E(a_1 b_2 + b_1 b_2 + a_1 a_2 - b_1 a_2) = E(a_1 b_2) + E(b_1 b_2) + E(a_1 a_2) - E(b_1 a_2)$. Используя определение наблюдаемых (3.8) и применяя правило вычисления средних $\langle A \rangle_\psi = \text{tr}(A \rho_\psi)$ для всех наблюдаемых A , взятых из (3.8), мы найдем $E = 2\sqrt{2}$ и для среднего значения числа некритических наложений (склеек) мы получим значение $E(NonCr) = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{2\sqrt{2}}{4}\right) \approx 0.85$. Итак, использование EPR пар фотонов в управлении сборкой дает существенный выигрыш в качестве - немного более 1.138 для такой формулировки задачи.

3.4 Дискретность амплитуд

Длительная история экспериментов по квантовому компьютерингу показала необходимость введения ограничений на размерность гильбертовых пространств, которые составляют основу формализма квантовой теории. Эту размерность принято считать неограниченной и даже бесконечной, что приводит к конфликту с математическим анализом, в виде, например, ненормируемости собственных функций основных операторов: координаты и импульса.

Более того, стремление зерна разрешимости классического пространства состояний dx, dt , (или dE, dp , что эквивалентно, так как переход от координатно-временному базису к базису на энергии-импульсе сохраняет зернистость) к нулю и физически некорректно. Зависимость зарядов и масс элементарных частиц от этого зерна диктуется ультрафиолетовой расходимостью рядов амплитуд квантовой электродинамики, сложность процессов которой нарастает с уменьшением этого зерна. Корректность перенормировок (фактически для одного заряда) - нетривиальная математическая теорема, впервые доказанная только в работе [52].

В простых задачах, которые решались копенгагенской механикой 20 века, эти тонкости можно было игнорировать, однако при попытке применить квантовую теорию к по-настоящему сложным процессам в химии и ядерной физике (а в перспективе - и к живой материи), что является целью проекта квантового компьютера, неадекватность математического аппарата гильбертовых времен становится фундаментальным препятствием. С ним сталкиваются все эксперименты по масштабированию квантовых процессоров, работающих удовлетворительно лишь для нескольких кубитов.

Физика квантового компьютера не может строиться на основе традиционного формального аппарата, она нуждается в явной формулировке ограничений на сложность состояний, причем ограничений, которые связывали бы копенгагенскую теорию с миром сложных систем, к которым принадлежит квантовый компьютер при его правильно понимаемом масштабировании.

Мы также не можем считать амплитуду бесконечно делимой, так как набор статистики для определения вектора состояния, не представляющий проблему для модельных задач старой квантовой механики отдельных атомов, становится невозможным для сложных систем. В этих системах состояния, определяемые с ангстремной точностью, являются уникальными, и, как правило, невозпроизводимыми, в силу огромной сложности окружения.

С другой стороны, представление о фундаментальном недетерминизме, лежащее в основе копенгагенской теории, не соответствует реальности для очень сложных систем, где мы имеем дело с удивительной силы предопределенностью, источником которой является молекула ДНК. Поэтому важно наметить в квантовом формализме, от которого нельзя отказаться, естественные пути ограничения сложности и введения детерминизма. Интересно, что представление о детерминистических траекториях помогает понять работу даже таких процессов, как вычисление по алгоритму Гровера, где существо копенгагенской механики проявляется наиболее ясным образом.

Изменение вектора состояния происходит из-за различной степени конструктивности возникающей интерференции между всевозможными отдельными траекториями, что образно показано в книге Р.Фейнмана [2]. Неясным остается только то, какой объект перемещается по этим "всевозможным траекториям"? Из матричной формулировки квантовой динамики следует, что этот объект - порция амплитуды - обязан делиться на сколь угодно малом отрезке времени на несколько частей, что исключает детерминизм.

Мы покажем, что можно избежать такого ветвления, приписав с самого начала любому кванту амплитуды вполне определенную траекторию, так что его "судьба" будет совершенно определенной, а результирующий вектор состояния получится после сложения квантов и уничтожения некоторыми квантами друг друга - строго по-

парно, то есть в результате интерференции. При этом траектория отдельных квантов будет соответствовать выбранному гамильтониану.

Данный результат нетривиален, так как позволяет доказать, например, теорему о явной структуре темных состояний ансамблей двухуровневых атомов в оптической полости ([35], см. Приложение). Однозначность траектории порции амплитуды, определяемая для произвольной матрицы эволюции, отличается от детерминизма Бома ([40]): там квантуется вероятность, а не амплитуды, как у нас.

Минимальный размер кванта амплитуды - зерно амплитуды, определяется максимальной допустимой размерностью гильбертова пространства состояний. Зерно амплитуды представляет наиболее простое ограничение на копенгагенский формализм, выражающееся в предельной размерности гильбертова пространства, в котором алгоритм Гровера правильно работает. Нахождение этой размерности, таким образом, становится основной задачей экспериментальных работ по квантовому компьютеру после минимальной отладки элементарных гейтов. Алгоритм Гровера можно использовать для сравнения физически разных процессов по применимости к ним квантового формализма; это сделано ниже для простого примера задач из электродинамики и ядерной физики.

Ненулевой размер зерна амплитуды влечет существование неожиданного эффекта: возможности быстрого нахождения решения переборной задачи на квантовом компьютере для граничного числа кубитов, для которого размерность пространства состояний достигает предельного возможного значения.

Введение зерна разрешения амплитуды позволяет заполнить формальный пробел в формализме копенгагенской теории, в котором измерения трактуются как коллапс волнового вектора, о свойствах которого иногда говорят как о некоей "оркестрованности", связывая процедуру измерения с актом самосознания ([53]), что уводит от развития физических представлений о материи в область спекуляций. Коллапс вектора состояния связан как раз с зерном амплитуды; измерение происходит ровно в тот момент, когда достигается максимальная размерность пространства состояний Q ядра квантовой системы, или, что то же самое, когда актуальная величина амплитуды достигает предельного значения - зерна. Эта трактовка полностью согласуется с представлением о декогерентности как о контакте системы с веществом окружения, при котором происходит резкое расширение пространства состояний, то есть с концепцией открытой квантовой системы ([19]).

Предлагаемое ограничение гильбертова формализма позволяет существенно упростить компьютерное моделирование динамики сложной квантовой системы, заменив логически неуклюжее понятие матрицы плотности смешанного состояния вектором в пространстве ограниченной размерности, постоянно подвергаемым процедурой редукции, при которой слишком малые амплитуды просто уничтожаются. Такая редукция открывает новые перспективы для квантового компьютера, однако у этого есть своя цена. Базисы, в которых можно рассматривать волновой вектор, становятся неэквивалентными. Эта потеря алгебраической стройности - необходимая плата за возможность рассматривать сложные системы на квантовом уровне.

3.5 Равновесные состояния

Мы начнем с описания классов состояний, для которых квантование амплитуды вводится наиболее наглядным образом.

Для комплексного числа $z = a + ib$, $a, b \in R$ введем обозначение $\{z\} = |a| + |b|$. Пусть $|j\rangle$ - какой-либо базисный вектор, $j \in \{0, 1, \dots, N-1\}$. Определим $\{\psi\} = \sum_{i=0}^{N-1} \{i|\psi\rangle\}$.

Пусть A - линейный оператор. Определим $|\psi_j\rangle = A|j\rangle$. Назовем вектор состояния $|\Psi\rangle$ равновесным относительно оператора A , если для всех входящих в него базисных компонент $|j\rangle$ все числа $\{\psi_j\}$ одинаковы.

В качестве примера рассмотрим гамильтониан одномерной частицы, движущейся в потенциале $V: H = \frac{p^2}{2m} + V$. Урежем матрицу этого гамильтониана, предположив, что нет слишком длинных переходов данной частицы в пространстве. Тогда равновесными состояниями в координатном базисе для этого гамильтониана будут в точности такие состояния $|\Psi\rangle$, все базисные компоненты которых имеют одинаковый потенциал (докажите это, используя то обстоятельство, что оператор кинетической энергии имеет идентичный вид для всех базисных состояний в силу однородности пространства классических состояний).

Важным классом многочастичных равновесных состояний являются связанные состояния. Вот пример такого состояния. Рассмотрим k двухуровневых атомов в оптической полости, удерживающей фотоны с энергией перехода между основным и возбужденным уровнями атомов. Выберем базис, состоящий из векторов вида $|n\rangle_{ph}|m_1, m_2, \dots, m_k\rangle_{at}$, где n - число фотонов в полости, $m_j \in \{0, 1\}$ - состояние атома j , основное и возбужденное. Пусть g_j , $j = 1, 2, \dots, k$ - силы взаимодействия атомов с полем. Тогда динамика системы атомов и поля при условии $g_j/\hbar\omega \ll 1$, где ω - частота полости, будет подчиняться уравнению Шредингера с гамильтонианом Тависа-Каммингса в приближении RWA:

$$H_{TC}^{RWA} = \hbar\omega(a^+a + \sum_{j=1}^k \sigma_j^+ \sigma_j) + a^+ \bar{\sigma} + a \bar{\sigma}^+, \quad \bar{\sigma} = \sum_{j=1}^k g_j \sigma_j, \quad (3.9)$$

где a, a^+ - стандартные полевые операторы уничтожения и рождения фотона, а σ_j, σ_j^+ - атомные операторы релаксации и возбуждения атома j . Связные состояния в такой системе будут для $k = 2$ только при $g_1 = g_2$, и это будет либо одно из базисных, либо состояния $|n\rangle_{ph}(\alpha|10\rangle_{at} + \beta|01\rangle_{at})$, из которых во всех, кроме синглетного состояния $\beta = -\alpha$ атомы будут взаимодействовать с полем. Все такие состояния будут равновесными.

Общее определение связности выглядит так.

Пусть H - гамильтониан в пространстве состояний n кубитов. Если кубит ассоциируется с реальной или виртуальной двухуровневой частицей, H может быть, например, гамильтониан Тависа-Каммингса или какая-то его модификация. Пусть S_n - группа перестановок кубитов, которые естественным образом продолжены до операторов на всем пространстве квантовых состояний \mathcal{H} , а именно: на базисных состояниях перестановка $\eta \in S_n$ действует непосредственно, а $\eta \sum_j |j\rangle = \sum_j \eta|j\rangle$.

Обозначим через G_H подгруппу S_n , состоящую из всех перестановок кубитов τ , таких что $[H, \tau] = 0$. Пусть $A \subseteq \{0, 1, \dots, 2^n - 1\}$ - подмножество базисных состояний n -кубитной системы. Его линейную оболочку $L(A)$ назовем связным относительно H подпространством, если для любых двух состояний $|i\rangle, |j\rangle \in A$ существует перестановка кубитов $\tau \in G_H$, такая что $\tau(i) = j$. Состояние $|\Psi\rangle$ n -кубитной системы назовем связным относительно H , если оно принадлежит связному относительно H подпространству, причем $H|\Psi\rangle \neq 0$.

Связность состояния означает, что все его ненулевые компоненты получаются одна из другой перестановками тех частиц, которые ведут себя относительно данного гамильтониана одинаковым образом. Рассмотренный выше пример состояния $|n\rangle_{ph}(\alpha|10\rangle_{at} + \beta|01\rangle_{at})$ будет, очевидно, связным, так как перестановка атомов, одинаково взаимодействующих с полем, не меняет гамильтониана. Состояния же вида $|n\rangle_{ph}(\alpha|10\rangle_{at} + \beta|01\rangle_{at} + c|00\rangle_{at} + d|11\rangle_{at})$, при ненулевых значениях амплитуд a, b, c, d будут не связными.

Предложение.

Если $|\Psi\rangle = \sum_j \lambda_j |j\rangle$ - связное относительно H , то любые два столбца матрицы H с номерами j_1, j_2 , такими что λ_{j_1} и λ_{j_2} ненулевые, отличаются друг от друга только перестановкой элементов. То же самое верно и для матрицы унитарной эволюции $U_t = \exp(-\frac{i}{\hbar}Ht)$.

Действительно, для таких базисных состояний j_1 и j_2 , согласно определению H -связности, существует $\tau \in G_H$, такое что $j_2 = \tau(j_1)$. Столбцы с номерами j_1, j_2 состоят из амплитуд состояний $H|j_1\rangle$ и $H|j_2\rangle$ соответственно. Из условия коммутации имеем $\tau H|j_1\rangle = H\tau|j_1\rangle = H|j_2\rangle$, и это как раз и означает, что столбец j_2 получается из столбца j_1 перестановкой элементов, индуцированной τ . Переходя к матрице эволюции U_t , мы видим, что соотношение коммутации $\tau U_t|j_1\rangle = U_t\tau|j_1\rangle = U_t|j_2\rangle$ будет выполняться и для нее, что и требуется. Предложение доказано.

Из Предложения следует, что связные относительно гамильтониана H состояния являются равновесными относительно H и относительно оператора эволюции $U_t = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$, соответствующего этому гамильтониану.

3.6 Кванты амплитуды

Наша цель - показать, что если состояние $|\Psi\rangle$ является равновесным относительно оператора эволюции U_t , то амплитуды всех базисных состояний в $|\Psi\rangle$ можно разбить на малые порции - кванты амплитуды, так что для каждого кванта будет однозначно определена его траектория при действии U_t на заранее фиксированном отрезке времени t , в частности, будет однозначно определено, и то, с каким именно другим квантом амплитуды он сократится при суммировании амплитуд для получения последующего состояния.

Этот факт справедлив и для произвольного оператора A , для которого мы и будем формулировать квантование амплитуды.

Пусть $|\Psi\rangle$ - произвольное равновесное относительно A состояние, разложение которого по базисным имеет вид

$$|\Psi\rangle = \sum_j \lambda_j |j\rangle. \quad (3.10)$$

Мы введем важное понятие кванта амплитуды как простую формализацию превращения малой порции амплитуды между различными базисными состояниями при умножении вектора состояния на матрицу A . Пусть $T = \{+1, -1, +i, -i\}$ - множество из 4 элементов, которые называются типами амплитуды: вещественным положительным, вещественным отрицательным, и аналогичными мнимыми. Произведение типов определяется естественным образом: как произведение чисел. Квантом амплитуды размера $\varepsilon > 0$ называется кортеж вида

$$\kappa = (\varepsilon, id, |b_{in}\rangle, |b_{fin}\rangle, t_{in}, t_{fin}), \quad (3.11)$$

где $|b_{in}\rangle, |b_{fin}\rangle$ - два различных базисных состояния системы атомов и фотонов, id - уникальный идентификационный номер, выделяющий данный квант среди всех других, $t_{in}, t_{fin} \in T$. Переход вида $|b_{in}\rangle \rightarrow |b_{fin}\rangle$ называется переходом состояний, $t_{in} \rightarrow t_{fin}$ - переходом типов. Выберем идентификационные номера так, что при их совпадении все остальные атрибуты кванта тоже совпадали, то есть идентификационный номер однозначно определяет квант амплитуды. При этом должно существовать бесконечное множество квантов с любым набором атрибутов, за исключением идентификационного номера. Таким образом, мы будем отождествлять квант амплитуды с его идентификационным номером, не оговаривая этого в дальнейшем. Введем обозначения:

$$t_{in}(\kappa) = t_{in}, \quad t_{fin}(\kappa) = t_{fin}, \quad s_{in}(\kappa) = b_{in}, \quad s_{fin}(\kappa) = b_{fin}.$$

Переходы состояний и типов квантов амплитуды фактически указывают, как должно изменяться данное состояние во времени, и их выбор зависит от выбора A ; размер кванта амплитуды указывает точность дискретного приближения действия этого оператора с помощью квантов амплитуды.

Множество θ квантов амплитуды размера ε назовем квантованием амплитуды этого размера, если выполнено следующее условие:

Q. В множестве θ не существует таких квантов амплитуды κ_1 и κ_2 , что их переходы состояний одинаковы, $t_{in}(\kappa_1) = t_{in}(\kappa_2)$ и при этом $t_{fin}(\kappa_1) = -t_{fin}(\kappa_2)$, а также не существует таких квантов амплитуды κ_1 и κ_2 , что $s_{in}(\kappa_1) = s_{in}(\kappa_2)$ и $t_{in}(\kappa_1) = -t_{in}(\kappa_2)$.

Условие **Q** означает, что при переходе, описываемом символом " \rightarrow " итоговое значения кванта амплитуды не может сократиться с итоговым значением подобного ему кванта амплитуды, а также что кванты амплитуды не сокращаются друг с другом непосредственно в записи исходного состояния.

Квантование амплитуды θ задает пару квантовых состояний

$$|\theta_{in}\rangle = \sum_j \lambda_j |j\rangle, \quad |\theta_{fin}\rangle = \sum_i \mu_i |i\rangle, \quad (3.12)$$

по естественному правилу: для любых базисных состояний $|j\rangle$, $|i\rangle$ должны выполняться равенства

$$\lambda_j = \langle j|\theta_{in}\rangle = \varepsilon \sum_{\kappa \in \theta: s_{in}(\kappa)=j} t_{in}(\kappa), \quad \mu_i = \langle i|\theta_{fin}\rangle = \tilde{\varepsilon} \sum_{\kappa \in \theta: s_{fin}(\kappa)=i} t_{fin}(\kappa), \quad (3.13)$$

где $\tilde{\varepsilon}$ - некоторый нормировочный коэффициент, так что состояние $|\theta_{fin}\rangle$ имеет единичную норму, а $|\theta_{in}\rangle$ - произвольную ненулевую. Коэффициент $\tilde{\varepsilon}$ не обязан совпадать с ε , потому что при квантовании амплитуды обычная норма вектора состояния, вообще говоря, не сохраняется; если бы мы взяли $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon$, то введенная нами величина $\{|\Psi\rangle\}$ при переходе $|\theta_{in}\rangle \rightarrow |\theta_{fin}\rangle$ могла бы только уменьшиться - это происходит в точности из-за того, что некоторые кванты амплитуды "сокращаются" друг с другом во второй сумме из формулы (3.13).

Зафиксируем размерность $dim(\mathcal{H})$ пространства состояний, и будем делать оценки (сверху) рассматриваемых положительных величин: времени и размера кванта амплитуды с точностью до порядка величины, считая все константы зависящими только от независимых констант: $dim(\mathcal{H})$ и от минимальной и максимальной абсолютных величин элементов матрицы A . При этом термин "строгий порядок" будет означать оценку как сверху, так и снизу положительными числами, зависящими только от независимых констант.

Для квантования амплитуды θ и номеров i, j базисных состояний через $n_{i,j}(\theta)$ обозначим число элементов множества $\mathcal{N}_{i,j}(\theta) = \{\kappa \in \theta : s_{in}(\kappa) = j, s_{fin}(\kappa) = i\}$.

Пусть $\theta(\varepsilon)$ - некоторая функция, отображающая некоторую последовательность положительных чисел ε , сходящуюся к нулю, в квантования амплитуды размера ε . Такую функцию будем называть параметрическим квантованием амплитуды.

Параметрическое квантование амплитуды $\theta(\varepsilon)$ называется согласованным с оператором A , если существует такая функция $c(\varepsilon)$, что для любых базисных состояний i, j

$$c(\varepsilon)n_{i,j}(\theta(\varepsilon)) \rightarrow \{\lambda_j\}\{\langle i|A|j\rangle\} \quad (\varepsilon \rightarrow 0) \quad (3.14)$$

для λ_j , определенных в (3.13).

Если A - оператор эволюции U_t , то наличие параметрического квантования амплитуд $\theta(\varepsilon)$, согласованного с A , является совершенно не тривиальным свойством квантовых состояний $|\theta_{in}(\varepsilon)\rangle$, говорящим о том, что двустояний возможно введение скрытого параметра, соответствующего динамике, задаваемой матрицей эволюции U_t , и делающего квантовую эволюцию U_t детерминистической. Таким параметром будет квант амплитуды $\kappa \in \theta(\varepsilon)$, где точность детерминистического описания определяется величиной ε .

Теорема о квантовании амплитуды.

Пусть A - произвольная матрица. Для всякого равновесного относительно A состояния $|\Psi\rangle$ существует параметрическое квантование амплитуд $\theta(\varepsilon)$, согласованное с оператором A такое, что

$$|\theta_{in}(\varepsilon)\rangle \rightarrow |\Psi\rangle, \quad |\theta_{fin}(\varepsilon)\rangle \rightarrow A|\Psi\rangle, \quad (\varepsilon \rightarrow 0). \quad (3.15)$$

Доказательство.

Пусть задано равновесное относительно A состояние $|\Psi\rangle = \sum_j \lambda_j |j\rangle$ и число $\varepsilon > 0$. Для $|j\rangle$ с ненулевыми $\lambda_j \neq 0$ пусть

$$\lambda_j = \langle j|\Psi\rangle \approx \underbrace{\text{sign}_{re}(\varepsilon + \varepsilon + \dots + \varepsilon)}_{M_j} + \underbrace{\text{sign}_{im}i(\varepsilon + \varepsilon + \dots + \varepsilon)}_{N_j}, \quad (3.16)$$

где $\text{sign}_{re}\varepsilon M_j + \text{sign}_{im}i\varepsilon N_j \approx \lambda_j$ есть наилучшее приближение амплитуды λ_j с точностью ε ; M_j, N_j - натуральные числа, $\text{sign}_{re} (im) = \pm 1$. Таким образом, первое соотношение стремления из (3.15) будет выполнено, и надо обеспечить выполнение второго соотношения при согласованности параметрического квантования с гамильтонианом.

Приближим каждый элемент матрицы эволюции так же, как мы приблизили амплитуды исходного состояния:

$$\langle i|A|j\rangle \approx \pm \underbrace{(\varepsilon + \varepsilon + \dots + \varepsilon)}_{R_{i,j}} \pm i \underbrace{(\varepsilon + \varepsilon + \dots + \varepsilon)}_{I_{i,j}}, \quad (3.17)$$

где $R_{i,j}, I_{i,j}$ - натуральные числа; действительную и мнимую части - с точностью ε каждую, а знаки перед действительной и мнимой частями выбираются исходя из того, что данное приближение должно быть максимально точным для выбранного ε .

Амплитуды результирующего состояния $A|\Psi\rangle$ получаются умножением всевозможных выражений (3.16) на всевозможные выражения (3.17):

$$\lambda_j \langle i|A|j\rangle \approx (\text{sign}_{re} M_j \varepsilon + i \text{sign}_{im} N_j \varepsilon) (\pm R_{i,j} \varepsilon \pm i I_{i,j} \varepsilon). \quad (3.18)$$

Раскроем в правой части выражения (3.18) скобки, но не будем производить сокращений. Каждое вхождение выражения ε^2 в амплитуды результирующего состояния после раскрытия скобок в правой части (3.18) будет получаться умножением определенного вхождения ε в правую часть (3.16) на определенное вхождение ε в правую часть (3.17). Проблема заключается в том, что одно и то же вхождение ε в (3.16) соответствует не одному, а нескольким вхождениям ε^2 в результат, и потому мы не можем сопоставить кванты амплитуды непосредственно вхождениям ε в (3.16).

Скольким вхождениям ε^2 в амплитуды состояния $A|\Psi\rangle$ из результата раскрытия скобок в (3.18) соответствует одно вхождение ε в приближение амплитуды $\lambda_j = \langle j|\Psi\rangle$ состояния $|\Psi\rangle$? Это число - кратность данного вхождения ε - равна $\sum_i (R_{i,j} + I_{i,j})$. Эти числа могут быть различными для произвольного оператора A и состояния $|\Psi\rangle$. Однако поскольку $|\Psi\rangle$ - равновесное относительно A , то $\sum_i (R_{i,j} + I_{i,j})$ для разных j будут одинаковыми.

Введем обозначение $\nu = \sum_i (R_{i,j} + I_{i,j})$ - это число вхождений ε в любой столбец из разложения матрицы (3.17); это число ν имеет порядок $1/\varepsilon$ при $\varepsilon \rightarrow 0$.

Обозначим через $Z_{i,j}$ множество вхождений буквы ε в правую часть выражения (3.17), и пусть $Z_j = \bigcup_i Z_{i,j}$. Тогда число элементов в множестве Z_j будет равно ν .

Рассмотрим меньшее значение кванта амплитуды: $\epsilon = \varepsilon/\nu$. Подставим в выражение (3.16) вместо каждого вхождения ε его формальное разложение вида $\epsilon = \overbrace{\epsilon + \epsilon + \dots + \epsilon}^{\nu}$, получив разложение амплитуд исходного состояния на числа меньшего размера:

$$\lambda_j = \langle j|\Psi\rangle \approx \text{sign}_{re}(\underbrace{\overbrace{\epsilon + \epsilon + \dots + \epsilon}^{\nu} + \overbrace{\epsilon + \epsilon + \dots + \epsilon}^{\nu} + \dots + \overbrace{\epsilon + \epsilon + \dots + \epsilon}^{\nu}}_{M_j}) + \text{sign}_{im}i(\underbrace{\overbrace{\epsilon + \epsilon + \dots + \epsilon}^{\nu} + \overbrace{\epsilon + \epsilon + \dots + \epsilon}^{\nu} + \dots + \overbrace{\epsilon + \epsilon + \dots + \epsilon}^{\nu}}_{N_j}). \quad (3.19)$$

Пусть $W_1^j, W_2^j, \dots, W_{M_j+N_j}^j$ - множества вхождений буквы ϵ в правую часть выражения (3.19), отмеченные верхними фигурными скобками. В каждом из этих множеств ν элементов, как и в определенных ранее множествах Z_j . Поэтому мы можем построить для каждого такого множества W_s^j взаимно-однозначное отображение вида $\xi : W_s^j \rightarrow Z_j$. Для каждого вхождения ε в (3.16) естественно определяются его потомки - вхождения ϵ в (3.19); потомков для каждого вхождения будет ν .

Мы определим квантование амплитуд $\theta = \theta(\epsilon)$ так, что идентификаторы id квантов амплитуд $\kappa \in \theta$ будут просто вхождениями ϵ в разложения (3.19) для всех j . Определим, как требуется в (3.11), начальное состояние и начальный тип этого кванта как состояние и тип данного вхождения. Осталось определить переходы состояний и типов. Это определение дается следующим естественным образом.

Каждой паре вида $(w_s^j, \xi(w_s^j))$, где $w_s^j \in W_s^j$, поставим в соответствие переход состояний и переход типов естественным образом. А именно, переход состояний будет иметь вид $j \rightarrow i$ для такого i , что $\xi(w_s^j) \in Z_{i,j}$; переход же типов $t_{in} \rightarrow t_{fin}$ определяется так, что t_{in} есть тип вхождения⁷ w_s^j , а тип t_{fin} есть произведение типа вхождения t_{in} на тип вхождения $\xi(w_s^j)$. Множества W_s^j не пересекаются при разных парах j, s , поэтому мы считаем областью определения функции ξ все вхождения буквы ϵ в правую часть (3.19) (см. Рис. 3.3).

Пусть теперь переход состояний и типов для данного кванта $\kappa \in \theta$ соответствует отображению ξ в определенном выше смысле. Условие **Q** при этом будет выполнено, так как в выражении для матричного элемента (3.17) нет сокращающихся членов. Поэтому мы определили квантование амплитуды.

В силу нашего определения функции ξ , распределение амплитуд в состоянии $|\theta\Psi\rangle$ будет примерно пропорциональным распределению амплитуд в состоянии $A|\Psi\rangle$, причем точность будет неограниченно расти с уменьшением ε до нуля. Для того, чтобы определить нужное для согласованности θ с оператором A значение функции $c(\epsilon)$, подсчитаем вклад каждого вхождения ε^2 в правую часть равенства (3.18) и сравним его с вкладом соответствующей ему буквы ϵ в $|\theta\Psi\rangle$.

Зафиксируем какой-либо переход типов $t_{in} \rightarrow t_{fin}$ и переход состояний $s_{in} \rightarrow s_{fin}$. Будем называть вхождение ε^2 в результат раскрытия скобок в (3.18) соответствующим

⁷Тип вхождения определяется естественным путем после раскрытия скобок, например, для вхождения $\dots - i\epsilon\dots$ типом будет $-i$.

щим этим переходам, если $j = s_{in}$, $i = s_{fin}$, и это вхождение получается умножением вхождения ϵ типа t_{in} в первый сомножитель правой части (3.18) на вхождение ϵ во второй сомножитель типа t' , так что $t_{in}t' = t_{fin}$. Каждому такому вхождению ϵ^2 соответствует ровно один квант амплитуды размера ϵ из квантования амплитуды, определенного выше через функцию ξ , у которого те же самые переходы состояний и типов: этот квант соответствует тому вхождению ϵ , которое взаимно-однозначным отображением ξ переводится в данное вхождение ϵ^2 (см. Рис. 3.4).

Итак, вхождения ϵ^2 в (3.18) находятся во взаимно-однозначном соответствии с вхождениями ϵ в (3.19). Сколько квантов амплитуды будет иметь переход состояний вида $|j\rangle \rightarrow |i\rangle$? В каждой скобке из (3.19) таких квантов будет примерно $\{\langle i|A|j\rangle\}/\epsilon$ штук. А всего скобок примерно $\{\lambda_j\}/\epsilon$ штук. Поэтому число $n_{i,j}$ будет примерно равно $\{\lambda_j\}\{\langle i|A|j\rangle\}/\epsilon^2$, и точность будет неограниченно расти при $\epsilon \rightarrow 0$. Итак, $c(\epsilon) = \epsilon^2$.

Заметим, что если $A = 0$, можно взять $c(\epsilon) = 0$ и будет годиться любое квантование амплитуды.

Теорема доказана.

Заметим, что если отказаться от условия **Q** и от условия равновесности состояния $|\Psi\rangle$ относительно A , то можно так же определить матричный детерминизм, только надо вводить в матричные элементы сокращающиеся слагаемые $\epsilon - \epsilon$; тогда формальные записи амплитуд по всем столбцам A будут содержать одинаковое число членов, и рассуждение будет справедливо, однако интерференция теперь будет происходить не только между потомками разных базисных состояний, как для равновесных $|\Psi\rangle$, а также и между потомками одного и того же состояния.

Заметим также, что квантовое вычисление, в котором применяются только гейты вида $CNOT$ и Адамара обладает тем свойством, что для любого гейта число элементов во всех Z_j будет одинаковым, так что для таких вычислений детерминизм обеспечен при интерференции только между образами разных базисных состояний. Таков, в частности, алгоритм Гровера GSA.

Более того, для перспективных реализаций квантовых гейтов на фотонах (см., например, [31]) состояния, возникающие в результате реализации гейтов, являются связными, так что интерференция в ходе таких квантовых вычислений также обладает отмеченным выше свойством.

3.7 Кванты амплитуды в алгоритме Гровера

Вернемся к алгоритму Гровера GSA, рассмотренному в первой главе с алгебраической стороны, чтобы проследить траектории отдельных квантов амплитуды в соответствующем вычислении.

Пусть вычисление начинается с состояния $WH|\bar{0}\rangle$ и имеет вид

$$G^\tau, \quad G = -WH \cdot I_0 \cdot WH \cdot I_{x_{tar}}. \quad (3.20)$$

Рассмотрим вспомогательный оператор $D_0 = -WH \cdot WH$, равный, очевидно,

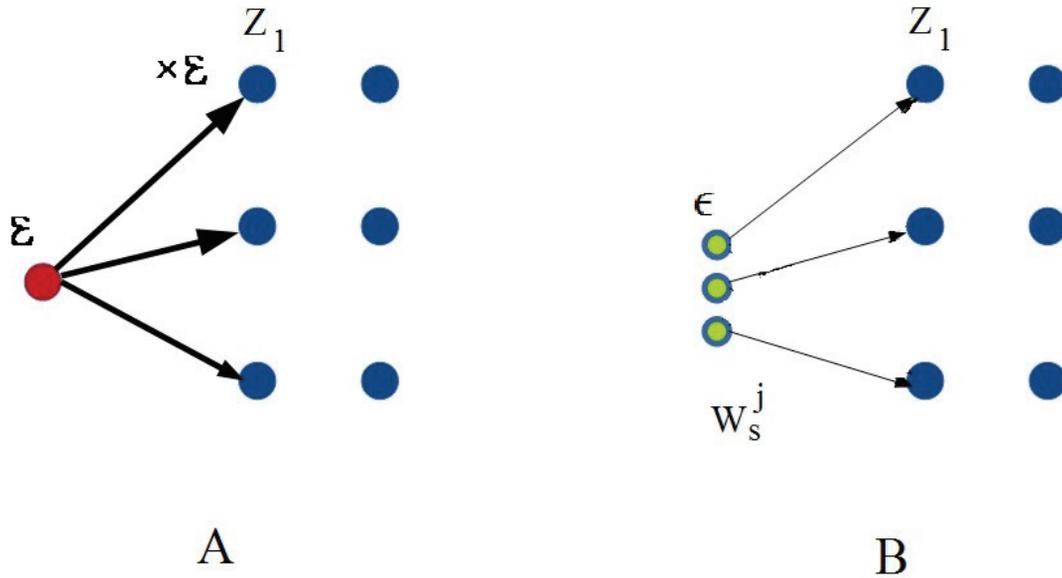


Рис. 3.3: А. Умножение вектора состояния на матрицу. Вклад каждого вхождения ϵ умножается на ϵ . В. θ -сдвиг исходного состояния. Размер кванта амплитуды ϵ имеет порядок ϵ^2 .

тождественному с обратным знаком. Этот оператор получается из записи G (3.20) удалением двух инверсий: $I_{x_{tar}}$ и $I_{\bar{0}}$. Поскольку $-D_0$ идентичный оператор, его применение не меняет состояния, и потому мы будем следить только за траекториями квантов амплитуды, которые отличаются от траекторий в реализации D_0 .

Что мы видим в G отличного от D_0 ? Отличий два. Первое: сначала меняется знак амплитуды состояния $|x_{tar}\rangle$. Второе: затем меняется знак амплитуды состояния $|\bar{0}\rangle$. Каков будет эффект от таких двух инверсий знаков? Мы рассмотрим только первый оператор G из (3.20), начинающийся непосредственно с $|\bar{0}\rangle$. Поэтому второе изменение знака - у состояния $|\bar{0}\rangle$, не играет практически никакой роли, ибо амплитуда состояния $|\bar{0}\rangle$ после применения оператора $WH I_{x_{tar}}$ мизерна.

Итак, весь эффект в начале вычисления дает изменение знака у $|x_{tar}\rangle$ и знак минус перед оператором G . Изменение знака у амплитуды целевого состояния $|x_{tar}\rangle$ эквивалентно добавлению новых квантов амплитуды со знаком "минус" в амплитуду этого состояния - в добавок к тем квантам, траектории которых реализуют D_0 . Добавить эти кванты надо после применения инверсии $I_{x_{tar}}$. Таким образом, весь эффект от применения первого оператора G в GSA есть добавление квантов амплитуды общей суммы $-2/\sqrt{N}$ после применения $I_{x_{tar}}$.

Но это эквивалентно добавлению квантов состояния $|x_{tar}\rangle$, суммарное значение которых есть $2/\sqrt{N}$ с самого начала. Итак, мы получаем, что первое применение G дает эффект в виде добавления $2/\sqrt{N}$ в начальное состояние, что и является с высокой точностью поворотом на угол $2 \arcsin(1/\sqrt{N})$. Амплитуды всех иных базисных состояний, отличных от $|x_{tar}\rangle$, слегка изменяются в результате перехода малой части квантов в состояние $|x_{tar}\rangle$ для обеспечения приращения амплитуды этого состояния в виде $2\sqrt{N}$; попутно происходит нормировка результата согласно функции $c(\epsilon)$ (см. 3.6).

Вычисление по GSA можно, таким образом, представить в виде операций над квантами амплитуды. При этом условие \mathbf{Q} не обязано соблюдаться, и промежуточные состояния в вычислении не должны быть равновесными. Траектория отдельных квантов амплитуды показывает, таким образом, механизм ее перераспределения в ходе вычисления: от всех базисных состояний к одному единственному состоянию $|x_{tar}\rangle$.

3.8 Константа масштабируемости и ее нахождение

В представлении амплитуд в классическом вычислении они всегда квантуются, то есть имеют вид:

$$\lambda_j = (k_j + il_j)\epsilon, \quad (3.21)$$

где ϵ - малая ненулевая величина - квант амплитуды, а k_j, l_j - натуральные числа. Такое представление амплитуд вытекает из линейности квантовой теории. Оно также требует соответствующего выбора классических базисных состояний, но в силу малости ϵ это не приводит ни к какому пересмотру экспериментально подтвержденной части квантовой теории, а коснется лишь масштабирования квантового компьютера.

Реализация кванта амплитуды в виде соотношений (3.21), помимо их простоты, имеет и другое обоснование - возможность введения микропричинности, что было показано в параграфе 3.6.

Итак, при нашем компьютерном подходе, мы должны считать, что существуют только состояния вида

$$|\Psi\rangle = \sum_{j \in J} \lambda_j |j\rangle, \quad (3.22)$$

где амплитуды имеют вид (3.21). Так что суммирование в (3.22) распространяется на не более чем $1/\epsilon^2$ слагаемых из множества $J = \{0, 1, \dots, N - 1\}$, $N = 2^n$.

Вся точность предсказаний квантовой теории связана с компьютерными вычислениями, в которых участвуют только числа вида (3.21) с неким минимально допустимым для хранения в памяти компьютера ϵ . При этом компьютерные операции над такими состояниями реализуют любые численные методы, но не выводят за пределы такого дискретного класса состояний. Поэтому введенное нами дискретное ограничение алгоритмической природы не приведет ни к какому пересмотру результатов квантовой механики. Однако оно радикальным образом изменит нашу трактовку квантового компьютера и смысл экспериментов по его созданию, а также и форму распространения квантовой теории на область сложных систем.

Классическое моделирование динамики в операционной системе не отменяет необходимость квантовой части компьютера, так как никакая операционная система не может воспроизвести фактора квантовой нелокальности в режиме реального времени. Этот фактор порождает новые феномены в ограниченных моделях вычислений, что было показано на примере одностороннего бифотонного управления. Все значение таких феноменов пока не понято.

Естественный вопрос: каков размер кванта амплитуды, не имеет точного ответа, точно так же, как и вопрос о пределе точности измерения координаты частицы. С

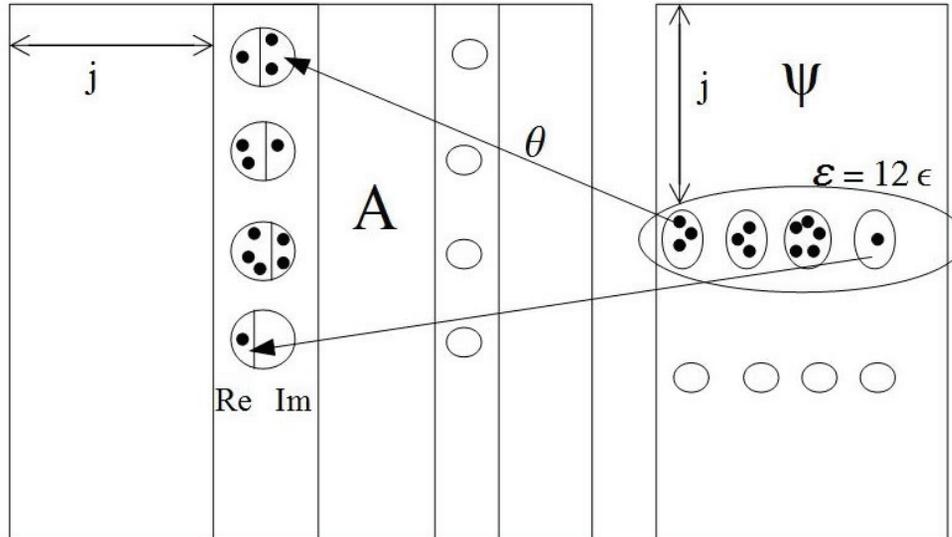


Рис. 3.4: Детерминизм траекторий при умножении вектора состояния $|\Psi\rangle$ на матрицу A . Каждый квант амплитуды переходит в определенный квант амплитуды результирующего состояния, ветвлений нет.

одной стороны, известно, что для очень простых систем, например, для электрона в атоме водорода, $\epsilon \approx 0$, то есть этот квант просто не заметен и никакой роли не играет: волновые функции стационарных состояний определяются очень точно. Здесь играет роль огромное число одинаково "приготовленных" атомов водорода, которые можно подвергнуть измерению в параллельном режиме, так что собранная статистика будет великолепно соответствовать аналитически найденному решению.

Можно было бы предположить, что квант амплитуды и число частиц в рассматриваемой системе находятся в обратно-пропорциональной зависимости или что-то вроде этого, но это также не будет верным. Набор взаимодействующих друг с другом гармонических осцилляторов может быть сколь угодно большим, однако волновая функция такой системы может быть определена очень точно, так как ее базисные состояния могут быть переопределены с помощью квазичастичного представления, так что полученные квазичастицы не будут взаимодействовать друг с другом, и потому точность определения волновой функции всей системы совпадет с точностью ее определения для одного единственного гармонического осциллятора, то есть может быть сколь угодно велика.

Пусть $\tau \in S_N$ - перестановка базисных векторов основного пространства состояний, соответствующего набору кубитов M . Тогда состояние $\tau|\Psi\rangle$ называется квазичастичным представлением состояния $|\Psi\rangle$. Например, для набора n гармонических осцилляторов их базисное состояние имеет вид (q_1, q_2, \dots, q_n) , а преобразование Фурье над этой последовательностью вида $Q_k = \alpha \sum_j q_j e^{-\beta ikj}$ означает переход к описанию той же системы осцилляторов, но не через их координаты q_j , а через фононы - квазичастицы с новыми координатами Q_k (см. описание канонического преобразования в книге [54]).

Заметим, что переход от конкретных значений обычных координат q_1, q_2, \dots, q_n к

конкретным значений для обобщенных координат Q_1, Q_2, \dots, Q_n есть преобразование вида "один базисный вектор" в "другой базисный вектор" в пространстве квантовых состояний, в котором значение координат есть базисный вектор. То есть преобразование Фурье в данном случае - это не квантовое преобразование Фурье, о котором шла речь выше, а именно перестановка базисных векторов квантового пространства. При кубитовом представлении базисного состояния кубиты, представляющие "новый" базисный вектор, будут иметь совершенно иной смысл по сравнению с кубитами, представляющими "старый" базисный вектор. Поэтому перестановка базисных векторов - очень существенное преобразование; оно способно, например, распутать имеющуюся в старом порядке базисных векторов запутанность. Поэтому преобразование $q_1, q_2, \dots, q_n \rightarrow Q_1, Q_2, \dots, Q_n$ называют каноническим. В примере с цепочкой осцилляторов оно распутывает квантовое состояние реальных частиц: для квазичастиц - фононов запутанность уже не будет иметь места.

Еще пример: обобщенное GZH - состояние вида $\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\dots 0\rangle + |11\dots 1\rangle)$, в котором запутаны все n кубитов, однако его можно привести к незапутанному состоянию последовательными операциями $CNOT$, являющимися перестановками базисных векторов пространства.

Читателю предлагается рассмотреть другое запутанное состояние $|W\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|001\rangle + |010\rangle + |100\rangle)$ и попробовать распутать его с помощью перестановок базисных векторов. Проанализируйте результат и докажите его строго. Какое из трехкубитных состояний: $|GHZ\rangle$ или $|W\rangle$ является в большей степени запутанным и почему?

Абсолютной сложностью $A(\Psi)$ состояния $|\Psi\rangle$ называется минимальная из сложностей всех его квазичастичных представлений (см. определение сложности в конце параграфа 1.3.1). Формально:

$$A(\Psi) = \min_{\tau \in S_n} C(\tau|\Psi). \quad (3.23)$$

Абсолютная сложность это число кубитов, необходимых для представления квантового ядра данного состояния. Пространство состояний, в котором живет это ядро, имеет, таким образом, размерность $2^{A(\Psi)}$, которую мы далее будем обозначать через N .

Будем считать, что для состояния (3.22) амплитуды его компонент всегда имеют вид (3.21) для некоторого $\epsilon > 0$. Это эквивалентно тому, что амплитуды будут принимать только четыре значения: $\pm\epsilon$, $\pm i\epsilon$, а состояния из набора J в разложении (3.22) занимают некоторое распределение в классическом пространстве \mathcal{K} конфигураций рассматриваемой системы, так что если мы хотим посчитать "волновую функцию" в обычном понимании этого термина, мы должны просуммировать амплитуды по малым участкам $\delta_k \mathcal{K}$ пространства \mathcal{K} так что четыре вида "квантов амплитуды", складываясь по всем состояниям из $J \cap \delta_k \mathcal{K}$, дадут значение "волновой функции" в центре участка $\delta_k \mathcal{K}$. Для адекватного представления волновой функции размер участков должен быть достаточно малым.

Такое представление волновой функции мы назовем событийным. Здесь вероятность пребывания системы в любом базисном состоянии пропорциональна числу

квантов амплитуды, попавших в малый участок классического пространства с центром в этом состоянии. Если речь идет о пространственной динамике, в событийном представлении нет никакой необходимости. Но если пространственная динамика жестко ограничена, например, структурой сложных молекул, как в биохимии, у событийного представления может появиться смысл.

Если, например, электрон перемещается между двумя потенциальными ямами, его волновая функция, строго говоря, является размазанной по пространству между ними. Однако если мы, в целях экономии вычислительных ресурсов, пренебрежем этим усложнением и будем считать, что электрон просто перемещается от одной точки к другой, его состояние можно будет охарактеризовать одним кубитом $|\psi\rangle = \lambda_0|0\rangle + \lambda_1|1\rangle$, а гамильтониан будет иметь размер 2×2 . Опыт показывает, что такое упрощение ситуации никак не влияет на точность моделирования, так что динамика амплитуд λ_0 и λ_1 адекватно отображает путешествие электрона из одной ямы в другую по множеству промежуточных точек классического пространства состояний.

Мы считаем, что определение пространственного положения любого базисного состояния $j \in J$ требует мало памяти, так как запись числа вообще логарифмична по длине. Так что максимальное значение Q числа N базисных состояний ядра любой квантовой системы является константой, не зависящей от состояния $|\Psi\rangle$. Тогда значение $\epsilon = 1/\sqrt{Q}$ также будет константой, причем безразмерной, так как размерность физической величины будет относиться к базисным состояниям $|j\rangle$ в (3.22).

Представление волновой функции с N базисными состояниями достигается в единственном случае - когда все амплитуды равны по модулю ϵ . Если же базисных состояний меньше Q , это значит, что производится суммирование квантов амплитуды по кускам $\delta_k \mathcal{K}$, и тогда мы имеем соотношение неопределенностей "сложность - точность" вида

$$N \log_2(1/\epsilon) \leq Q, \quad (3.24)$$

где ϵ есть точность представления амплитуд традиционной "волновой функции" для набора N точек в пространстве \mathcal{K} . Так что при значениях $N \ll Q$ точность представления традиционной "волновой функции" будет столь высокой, что ее невозможно будет отличить от аналитически полученного выражения; для простых систем именно это и имеет место.

Конструктивная безразмерная константа Q имеет физическую природу, и потому подлежит экспериментальному поиску. Для этого надо распределить амплитуду по очень большому числу классических состояний какого-то ансамбля, так чтобы наличие кванта амплитуды ϵ приводило бы к грубому отклонению от когерентной динамики, которые можно было бы зафиксировать в эксперименте.

Самый надежный путь - реализация алгоритма Гровера - GSA (см. [11]) для возможного большего числа n кубитов. Мы должны воспроизвести вычисление по этому алгоритму для нахождения корня уравнения

$$f(x) = 1, \quad (3.25)$$

где f - булева функция от n переменных, такая что у этого уравнения есть единственное решение x_{tar} . Назовем критическим значением n такое минимальное значение,

для которого наличие ненулевого зерна амплитуды ϵ существенно исказит динамику текущего вектора состояния по сравнению со стандартной квантовой схемой GSA.

Напомним, что алгоритм Гровера состоит из последовательных применений оператора

$$G = -I_{\tilde{0}}I_{x_{tar}} \quad (3.26)$$

$\tau = \lceil \pi\sqrt{N}/4 \rceil$ раз, где $N = 2^n$. На каждом шаге амплитуда состояния $|x_{tar}\rangle$ немного возрастает, а амплитуды всех других состояний немного убывают, так что динамика текущего состояния $|\Psi_s\rangle$ после s шагов дается формулой

$$|\Psi_s\rangle = \cos(2s/\sqrt{N})|\tilde{0}\rangle + \sin(2s/\sqrt{N})|x_{tar}\rangle, \quad (3.27)$$

где $|\tilde{0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} |j\rangle$. Этот характерный вид, когда амплитуда одного единственного состояния превосходит амплитуду всех иных состояний, у которых она одинакова, сохранится при любой перестановке базисных векторов τ . Поэтому ядро состояния квантового компьютера при вычислении по алгоритму Гровера будет иметь размерность $N = 2^n$.

Так как при реализации GSA в разложении текущего состояния $|\Psi_s\rangle$ каждое базисное состояние логических кубитов $|j\rangle_{log}$ дополняется ровно одним базисным состоянием анцилл, то их число $(n+1)$ не играет роли в подсчете, поэтому начиная с первого шага все n кубитов будут составлять единое квантовое ядро, и число n всех кубитов, включая анциллы (их должно быть $n+1$), для которого первый шаг GSA будет давать верный ответ, будет равно $\log_2(Q)$. Как только значение амплитуд $\cos(2s/\sqrt{N})/\sqrt{N}$ прочих состояний станет меньше ϵ , эти амплитуды станут нулями, и состояние с большой точностью совпадет с $|x_{tar}\rangle$.

Из этого следует парадоксальный эффект быстрого получения $|x_{tar}\rangle$ при запуске GSA для $n = \lceil \log_2(Q) \rceil$ логических кубитов: в этом случае только одного применения оператора G вида (3.26) достаточно, чтобы амплитуды всех состояний $|j\rangle$, $j \neq x_{tar}$ стали нулевыми.

Для экспериментального обнаружения такого эффекта надо настолько точно настроить гейты, чтобы достичь максимально возможной размерности ядра квантового Q . Ниже мы обсудим оценки на эту константу.

Рассмотрим два процесса: переход состояний электрона в атоме Rb^{85} и распад нестабильного ядра He^6 . Первый процесс описывается квантовой электродинамикой довольно точно, полное квантовое описание второго пока отсутствует.

Мы будем исходить из критерия точной прорисовки волновой функции, когда каждый шаг его компьютерного описания требует одного нового базисного состояния. Это вытекает из скорости квантового блуждания, при котором фронт волны распространяется с линейной скоростью (в отличие от классического блуждания, при котором скорость пропорциональна квадратному корню из времени). Пусть t - общее время процесса, dt - шаг компьютерного описания этого процесса во времени, тогда число базисных состояний, необходимых для "точной прорисовки" процесса составит $N = t/dt$. Значения t определяется экспериментально, а dt находится из соотношения неопределенностей "энергия - время".

Для рабиевской осцилляции атома рубидия, происходящей с испусканием фотона с длиной волны примерно 1.4 cm мы имеем: $\omega \approx 10^{10} \text{ sek}^{-1}$, $E_{QED} = \hbar\omega \approx 10^{-17}$, $dt \approx \hbar/E_{QED} = 10^{-10}$. Учитывая время рабиевской осцилляции $t \approx 10^{-6} \text{ sek}$, мы получаем $N = t/dt \approx 10^4$. Тогда $Q \geq 10^4 < 2^{14}$ и для хорошего отображения данного процесса на основании квантовой теории достаточно работы GSA на 14 кубитах, что представляется реальным.

Теперь рассмотрим распад ядра изотопа гелия: $He^6 \rightarrow He^5 + n \rightarrow He^4 + 2n$ (в данном грубом приближении учитываем только нуклоны). Характерное значение энергии будет около $10 \text{ Mev} \approx 10^{-5} \text{ erg}$, и соотношение неопределенности "энергия-время" даст $dt \approx 10^{-22} \text{ sec}$. Весь процесс занимает около 1.6 sec , откуда $N = t/dt \approx 10^{22} \approx 2^{73}$, и если квантовую механику можно продолжить до ядерных процессов типа распада изотопа гелия - 6 до стабильного изотопа 4, GSA должен хорошо работать уже на 73 кубитах.

Распад изотопа гелия 6 с точки зрения квантовой механики - весьма сложный процесс. Можно рассмотреть только его последнюю стадию, когда от стабильного ядра гелия 4 отщепляется один нейтрон (см. [55]). Она занимает примерно 10^{-11} sec . Для нее оценки, аналогичные вышешприведенным, дадут примерно 36 кубитов надежной реализации GSA, что уже менее реалистично, однако соответствующее значение $Q \approx 2^{36}$ можно уже верифицировать на экспериментах по GSA. Таким образом, принятие гипотезы о зерне амплитуды напрямую связывает вопрос о применимости квантовой теории к реальным микропроцессам и реализацию GSA. Реализация GSA становится, таким образом, центральным вопросом квантовой теории и теории сложных систем как таковых.

3.9 Зерно амплитуды как причина измерений

Измерение квантового состояния $|\Psi\rangle = \sum_{j \in J} \lambda_j |j\rangle$ есть случайная величина, принимающая значения $|j\rangle$, $j \in J$ с вероятностями $|\lambda_j|^2$. Физически оно начинается с контакта исходной системы с измерителем, то есть унитарного преобразования вида

$$|\Psi\rangle|\bar{0}\rangle_{meas} \rightarrow \sum_{j \in J} \lambda_j |j\rangle \sum_{i_j \in I_j} \mu_{i_j} |i_j\rangle_{meas}. \quad (3.28)$$

Если число элементов в каждом множестве состояний измерителя I_j очень велико, так что амплитуды всех конкретных состояний измерителя становятся примерно равными зерну ϵ : $\sum_{i_j \in I_j} \mu_{i_j} \approx \epsilon$, то в силу унитарности перехода (3.28) числа элементов множеств I_j становятся с большой точностью пропорциональными вероятностям $|\lambda_j|^2$ получения результата $|j\rangle$ в измерении. Поэтому измерение означает выбор наугад из урновой схемы, дающий вероятности исхода в соответствии с правилом Борна.

Итак, наличие зерна устраняет странный барьер между унитарной динамикой и коллапсом волнового вектора, который является помехой для моделирования динамики, так как использование квантового основного уравнения требует квадратичного роста ресурсов памяти при компьютерном моделировании по сравнению с унитарной

динамикой, так как приходится хранить в памяти матрицу плотности вместо вектора состояния.

В предельном случае, при полном коллапсе на каждом шаге эволюции, мы получим полностью детерминистическое описание динамики в том случае, если есть некоторое превосходство амплитуды одного единственного состояния $|j_{tar}\rangle$ над всеми другими, как в алгоритме Гровера. Базисные состояния $|j\rangle$, при этом, вообще говоря, должны быть нелокальными в силу фундаментальной квантовой нелокальности; ее мы уже обсуждали выше. Такая форма описания динамики совершенно необычна, но именно она, вероятнее всего, окажется адекватной реальным сложным системам, которые являются предметом проекта квантового компьютера.

3.10 Выводы

Мы выяснили, что гипотеза зерна разрешения амплитуды приносит ряд преимуществ в изучении квантовой физики сложных процессов.

Во первых, это дает единое описание эволюции, экономичное с точки зрения компьютерного моделирования, в отличие от традиционных моделей, использующих квантовое основное уравнение.

Во-вторых, это дает точную модель декогерентности, при которой эксперименты по масштабированию квантового компьютера обретают фундаментальный смысл: поиск границы Q размерности гильбертова пространства для квантового ядра любой системы, или, что эквивалентно, для зерна ϵ разрешения амплитуды. Обе константы безразмерны и могут быть найдены в экспериментах при условии достаточно точного тюнинга гейтов.

Приведенные оценки константы Q с помощью реализации алгоритма Гровера говорят о сравнительной простоте описания на квантовом языке электродинамики: для этого достаточно, чтобы GSA работал на примерно 10 логических кубитах. Для описания на квантовом языке ядерной физики требуется уже работа GSA на более чем 30 логических кубитах при таком же числе анцилл.

В третьих, зернистость амплитуды дает возможность построения детерминированных моделей динамики, что открывает возможность более эффективного применения квантовой теории к сложным процессам, в которых краткий миг жизни когерентных состояний неизменно заканчивается полной декогерентностью.

3.11 О перспективах квантового детерминизма

Мы видим принципиальную возможность введения квантового детерминистического параметра, точно определяющего путь эволюции для начального состояния при условии его связности. Знание этого параметра позволило бы, в принципе, предсказать результат наблюдения конечного состояния системы в заданный момент времени.

Однако это "знание" не является практически значимым примерно в той же мере, как и нелокальность не дает возможности передавать информацию быстрее света. Действительно, мы никак не можем получить детерминистический параметр априори, даже если начальное состояние является базисным, классическим. Мы "узнаем" его только когда получим результат измерения конечного состояния через промежуток времени t - это задача квантовой теории простых систем, которые ограничивают область применимости копенгагенской теории. В эту область входят атомы или их ансамбли, даже макроскопических размеров, в которых ограничение гильбертова пространства величиной размерности Q не играет никакой роли. Поэтому в копенгагенской теории этот параметр является вымороченным, лишним.

Однако если значение Q существенно, как в случае сложных систем, и трюк с переходом к квазичастицам (см. выше) не приводит к редукции ядра квантового состояния, фактически мы имеем дело с концентрацией амплитуды на малом числе, в пределе - на одном единственном базисном состоянии, так что переход от одного базисного состояния к другому осуществляется через краткий период квантовой когерентности. Тогда детерминистический параметр становится вполне реальным, так как он определяет динамику процесса в классических терминах. Разумеется, такая динамика ни в коем случае не будет определяться классической физикой.

Итак, для сложных систем, выходящим за пределы копенгагенской теории, само формальное существование такого параметра может представлять ценность, так как это указывает на возможность детерминистического описания сложных систем с высокой точностью. Также это может говорить о истинном источнике квантовой неопределенности - потенциальной неограниченности внешней среды для рассматриваемой системы.

Квантовое основное уравнение, описывающее в рамках копенгагенской теории контакт с окружением, является паллиативным решением. Эта теория не дает определения понятия "контакт с окружением". Например, если окружающая среда создает потенциал, мы можем использовать уравнение Шредингера и никаких линдбладовских операторов не нужно для очень точного описания динамики. В пост-квантовой теории не должно быть матрицы плотности по двум причинам. Во-первых, в этом странном объекте фактически присутствуют два вида вероятностей: классическая, некогерентная, и квантовая - когерентная, что логически некрасиво. Во-вторых, для сложных систем, когда константа Q жестко ограничивает рост размерности пространства состояний, квадратичный расход памяти моделирующего компьютера неприемлем.

Обобщать квантовую теорию на пост-квантовую область сложных систем надо, стартуя с унитарной динамики. Влияние среды должно проявляться в форме ограничения величины амплитуды зерном $\epsilon = 1/\sqrt{Q}$; в этом случае мы достигнем единства описания системы. Если динамика такова, что величина этого параметра пренебрежимо мала, у нас получится унитарная динамика замкнутой системы, в противном случае динамика будет иметь кусочный тип, когда периоды когерентности будут сменяться чем-то вроде связанных состояний.

Эксперименты, в которых выявляется квантовый механизм динамики, требуют изоляции именно объекта изучения от окружения, даже если этот объект имеет протяженные размеры, как для бифотонов. Такая изоляция исключает из сферы при-

менения копенгагенской теории живую материю - наиболее сложный класс систем, в которых детерминизм ярко проявляется через функции молекулы ДНК.

Квантовый детерминистический параметр является хорошим связующим звеном между значимым для нас миром сложных явлений и радикально квантовым микромиром простых объектов. По всей вероятности, неклассическая детерминистическая картина сложных процессов и радикально квантовая форма динамики простых явлений дополняют друг друга, и находятся в своеобразном соотношении неопределенностей. Понимание этой дополнительности так же важно для развития квантового компьютера, как и традиционные соотношения неопределенности в стандартной квантовой теории.

Глава 4

Диалог специалиста с дилетантом

В заключение иногда помещают "часто задаваемые вопросы и ответы на них". Я решил последовать этой традиции, так как квантовый компьютер - еще далеко не законченный проект; никто не знает, чем он кончится и что даст в виде результата. Поэтому я решил резюмировать вышесказанное в виде неформального и местами юмористического диалога специалиста в этой области (или того, кто таковым себя считает), и дилетанта, диалога, происходящего в присутствии почти всегда безмолвствующих зрителей, которые выражают свои эмоции возгласами (которые мы опускаем), и под наблюдением строгого модератора, который следит лишь за тем, чтобы обсуждение не отвлекалось от темы "Квантовый компьютер" и не превращалось в пустопорожний треп.

4.1 Раунд 1. Околонаучный

Итак, первое слово специалисту.

Специалист: Надеюсь, что после прочтения книги у вас сложилось убеждение в том, что проект квантового компьютера требует финансирования на уровне не меньше 1,5% бюджета России. И если этого не сделать, то нынешнее поколение человечества, возможно, будет последним, не так ли?

Дилетант: Но позвольте, ведь это примерно то, что у нас тратится на науку в целом!

Специалист: Именно так. И все это должно идти только на Квантовый Компьютер. А на науку в целом должно уходить 25 процентов бюджета. И это не шутки: такие вложения гораздо более эффективны, чем все прочие.

Дилетант: Вы, очевидно, шутите. Такого никогда не может быть.

Специалист: Очень даже может. Чернобыльская авария, например, съела годовой бюджет СССР. А в период с 1945 по 50 годы примерно страна вообще с себя последнюю рубашку сняла, чтобы построить атомную бомбу. А Вы говорите про 25 процентов. И если мы не опомнимся, опять будет такая же ситуация...

Модератор: Коллеги, я вынужден напомнить, что мы собрались для обсуждения квантового компьютера, а не экономической политики!

Специалист: Но это же связанные вещи! Эффективное управление природой возможно только на квантовом уровне. Посмотрите на микромир. Там ядерная физика. А биология, микроорганизмы? Мы научились делать их почти что искусственно, но не знаем, как с ними дальше работать! Одна "Синтия" чего стоит...

Голос из народа: Это тот микроб искусственный, что должен был кушать нефть, а принялся за животных и людей?

Специалист: Тот самый. Мы с нашими, примитивными, по-сути, технологиями научились создавать проблемы, и пытаемся их решать на уровне классической физики, тогда как Природа играет по квантовым законам, и нам ее никогда не обыграть. Нас всюду окружают радиоволны, а они влияют на атомные ядра, их спины, и, значит, на химизм - кто знает, к чему это может привести? Пока мы всерьез не займемся квантовым компьютером, мы будем как неандертальцы: защищаться от хищников палками и камнями. Только хищники теперь наши, рукотворные, созданные нашим неуемным технологическим "прогрессом".

Дилетант: Я не очень понял детали, но есть ощущение, что Вы правы. Я верю, что за этим проектом стоит что-то очень серьезное, и я хотел бы разобраться, по-крайней мере качественно, в том, к чему он должен привести. Я понял вот какие вещи. Во-первых, квантовая теория занимает особое место в силу своей универсальности; она объясняет практически все на микроскопическом уровне, и, в виде проекта "Квантовый компьютер" претендует на то, чтобы вообще объяснить наш мир, не так ли?

Во-вторых, я уяснил, что наш мир фундаментально плюралистичен, в том смысле, что траектория любого объекта может быть любой, а то, что мы видим в реальности есть результат жесточайшего отбора этих динамических сценариев по так называемой амплитуде. И в этом отборе выживает классическая траектория только в том случае, когда элементарное действие при моделировании оказывается существенно больше $\hbar \approx 10^{-27}$ эрг на секунду, верно?

Специалист: Да, Вы верно поняли суть квантовой механики, однако я бы не стал так категорично утверждать о ее универсальности: гравитация и ядерная физика пока не очень-то ей поддаются; химия и биология представляются куда как более близкими приложениями...

Дилетант: У меня свое мнение на этот счет, но сейчас меня интересует другое. Вы все время говорите о "состоянии", то есть о "волновой функции" частицы. И при этом это самое состояние имеет только статистический смысл, его можно узнать только если у нас есть огромная масса одинаково приготовленных частиц, и тогда, измеряя каждую из них так и сяк, мы получим эту самую волновую функцию?

Специалист: Совершенно верно.

Дилетант: Но тогда выходит, что у одной, уникальной частицы вообще не может быть никакой волновой функции? Потому что нет у нее копий, и мы не можем набрать статистику. А как же тогда быть со сложной системой, ведь Вы же сами говорили, что квантовый компьютер есть ее модель?

Специалист: Сложная система, Вы имеете в виду Escherichia Coli - кишечная палочка? Она не уникальна, их очень много и набрать статистику можно. Конечно, если фиксировать состояние такой бактерии не с такой точностью, как электрона в квантовой точке... Квантовый компьютер есть приближенная модель сложной реальной системы, модель, которую можем сделать мы сами, в отличие от живой бактерии. Но эта модель качественно лучше тех "компьютерных моделей живого", которые есть сейчас.

Дилетант: Лучше чем? Тем что в квантовом компьютере есть так называемое дальноедействие? Кстати, я, что-то не понял, почему оно не нарушает теорию относительности? Ведь речь идет о мгновенном действии на расстоянии, действии, скорость которого превышает скорость света!

Специалист: Ничего дальноедействие не нарушает! Информация, задуманная нами, не может путешествовать быстрее света. Но что-то может! Нечто, к чему у нас нет непосредственного доступа, обладает свойством мгновенного перемещения. У меня, увы, нет иного объяснения этого феномена, кроме того, чтобы сослаться на некую "административную систему", управляющую реальностью, которую мы не можем себе полностью подчинить. Но можем зафиксировать ее присутствие. Вообще, физика удивительным образом согласована: нигде нет противоречий.

Дилетант: Давайте рассмотрим постулированную Вами невозможность распространения квантовой теории, ну, скажем, на гравитацию. Вы утверждаете, что эта загадочная сила не поддается пока квантовому описанию, я правильно Вас понял?

Специалист: Совершенно верно. Существуют теории квантовой гравитации, фиксируют кванты гравитационного поля - гравитоны, но полной теории пока нет.

Дилетант: Простите, но ведь можно же представить гравитацию как разновидность электромагнитного поля!

Специалист: И как же?

Дилетант: Очень просто. Электродинамика описывает, как электрический заряд создает электромагнитное поле. Механика описывает, как поле влияет на динамику движения зарядов. Считается, что поле - это 4-мерный вектор. Но допустим, что это два 4-мерных вектора: один со знаком "+", созданный положительными зарядами, а другой - со знаком "-", созданный зарядами отрицательными. И пусть действие поля на заряд при одноименных знаках того и другого чуть-чуть меньше, чем для разноименных.

Голос из народа: Интересно, но слишком мудрено! Я знаю закон Кулона...

Дилетант: Закон Кулона выводится из уравнений Максвелла. Так вот, притяжение разноименных зарядов будет чуть-чуть сильнее, чем отталкивание одноименных, в соответствии с нашим предположением. И вот эта очень малая, микроскопическая разница, ее нельзя обнаружить в лабораторных условиях. Но если число зарядов огромно, она проявится в том, что электрически нейтральные тела будут притягиваться друг к другу. Это и есть гравитация.

Голос из народа: А как с релятивистской инвариантностью?

Дилетант: Она не нарушится. Я ничего не меняю в уравнениях Максвелла, для

которых она имеет место, я просто развожу влияние поля на заряды по знакам - в зависимости от "происхождения" поля.

Модератор: Мы отклоняемся от темы диалога!

Специалист: Ничего-ничего, я отвечу. Ваша модель, возможно, ничему и не противоречит. Но что она дает нового для гравитации? Что, помимо уже известных фактов (замедление времени, коллапс тяжелых звезд и т.п.) позволит нам открыть Ваш подход? И как он связан с квантовым компьютером? Суть нашего предмета в микроскопике, а Вы уводите нас в область космологии, где роль играют лишь огромные массы!

Дилетант: Ну, я пока не знаю, что можно сделать нового в космологии. Но к квантовым объектам такая модель имеет прямое отношение!

Специалист: Интересно узнать, какое именно?

Дилетант: Вот эта малая разница между притяжением электрона и протона и отталкиванием двух электронов или двух протонов. Конечно, в квантовом компьютеринге нет больших масс. Просто в силу того, что кванты работают только при очень малых действиях, а для космических тел они просто гигантские. Но есть другое: малые расстояния. Для очень малых расстояний эта разница может превратиться в нечто осязаемое. Вот Пенроуз, кажется, что-то говорил о микрогравитации как причине коллапса волновой функции. А как Вам нравится превращение нейтрона в потенциальную яму, своего рода ловушку для электрона?

Модератор: Коллеги, ближе к теме, пожалуйста!

Специалист: Нейтрон как ловушка для электрона? Из которой он выбирается за примерно 15 минут в свободном состоянии... Забавно, но что это дает? Если подсчитать глубину этой ловушки, ничего похожего ни на дефект массы, ни на что другое не выйдет.

Дилетант: Может быть и не выйдет. Но модель дает кое-что. Например, для стабильности атомного ядра необходимо присутствие в нем нейтронов.

Специалист: Известный факт, но какое ...

Дилетант: И если электрон, туннелируя из одной "нейтронной" ямы в другую, скрепляет ядро...

Специалист: Ядро гелия ${}^3\text{He}$ стабильно. Объясните, как один электрон, бегающий между 3 нуклонами, способен их связать?

Дилетант: Расположите протоны в вершинах правильного треугольника, а электрон - в его центре.

Специалист: Ха-ха! Это положение неустойчиво. Попробуйте взять три протона и связать их электроном - в ион H_3^{2+} с двойным положительным зарядом - у Вас ничего не выйдет, потому что эта конструкция нестабильна!

Дилетант: Нестабильна в электродинамике. А на очень малых расстояниях, там где сказывается ограничение размерности Q , то есть решетка возможных положений становится стеснительной...

Модератор: Дилетант, Вы заводите нас в тупик, я отниму у Вас микрофон!

Специалист: Все в порядке, я видал и не такое. Я понимаю интерес коллеги к атомному ядру, модели которого, действительно, строятся по образцу электродинамики. Но то, что он нам предложил есть не более чем размахивание руками. Задача физики - нахождение числа! Пока Вы нам не посчитаете что-то неизвестное экспериментаторам, причем не одно, а много разных величин, с помощью Вашей, с позволения сказать, теории, я не буду ее с Вами обсуждать!

Модератор: Присоединяюсь к мнению специалиста.

Дилетант: Я начинаю чувствовать себя, почти как Галилей на допросе у Беллармино.

Голос из народа: Хорошо, хоть не как Бруно...

Дилетант: Мда, хорошо... Так вот, большинство не всегда бывает право. Что такое ваша ядерная физика? Это набор кулинарных рецептов, не более того! Шанс дать ей хоть какую-то теорию один - продвинуть туда методы электродинамики.

Специалист: Петр Капица как-то съязвил: "послушай теоретика и сделай наоборот". Арбитр в физике - эксперимент. Теорий можно настроить сколько угодно. Вот квантовая теория победила потому, что она дает предсказания всех без исключения экспериментов с точностью проведения самих экспериментов. Надо только а) корректно поставить опыт и б) суметь вычислить по ее правилам что должно получиться. Все!

Модератор: Первый раунд завершен с явным превосходством Специалиста.

Дилетант: Я протестую...

Отключение микрофона. Все идут на кофе-брейк, дискуссия продолжается в кулуарах.

4.2 Раунд 2. Около-биологический

Дилетант: Снимаю шляпу перед квантовой теорией, это действительно вершина физики. Но позвольте спросить: как Вы станете находить Ваше "число" если речь идет о той же *Escherichia Coli* ? В биологии не имеют значения Ваши физические числа!

Специалист: Я не претендую на освоение биологии, это не моя тема.

Дилетант: Но ведь Вы же сами приводили задачу управления живым как аргумент для развития квантового компьютера, или Вы просто лукавите, имея в виду получение грантов? А я - претендую на освоение биологии! Людей интересуют они сами, их проблемы, их здоровье. Мы никогда не сможем жить внутри вашего атома, мы живем в своем, человеческом мире; атомы нам интересны только постольку, поскольку они затрагивают именно нашу жизнь!

Специалист: Я не лукавлю. Просто я, в отличие от Вас, реалист, и не склонен к демагогии. Да, мы хотим управлять живым. Но путь к этому не близкий. Сначала

надо освоить химию. Гейты строим для этого...

Дилетант: Я вижу, как вы строите. Ничего не выходит по фейнмановскому плану. Тут не хватает скорости срабатывания оптических зеркал, там слишком быстро фотон улетает из полости, и везде ваша декогерентность вам видите-ли жить мешает. Коды коррекции вон наизобретали, а толк какой? Работа идет уже 20 лет, и где ваш квантовый компьютер?

Специалист: А Вы считаете, что настоящие открытия пекутся как пирожки - в день по десятку? Это журналисты вас приучили - каждый год несколько открытий... Публика избалована, ей нужны фейерверки раз в неделю. "Квантовое превосходство" им подавай, и побольше! Эта область сейчас как атомная физика в 20 годах прошлого века. Кто из студентов на нее шел тогда: может Курчатов с Харитоновыми молодые и еще парочка, и все. Студенты ломались на электротехнику, энергомеханику, химию - вот это был тренд тогда. А что такое "физика атомного ядра" - экзотика да и только! А вот когда через 20 лет народ увидел, что стало с Хиросимой - тут все перевернулось: все валом повалили на это самое ядро.

Дилетант: Все так, я же Вас не упрекаю ни в чем. Знаю, что Вы работаете, просто я вижу со стороны застой, вы находитесь в плену старых подходов. Мне кажется, что в Вашем квантовом компьютере есть нечто гораздо большее сегодняшней прибористики. Я даже считаю, что это и есть путь в биологию, который позволит нам управлять ей, просто надо немного шире посмотреть на эту самую волновую функцию или вектор состояния. Возьмем тот же коллапс - для физиков это просто случайная величина, а Пенроуз с Хамероффом говорят о нем как об "оркестрованном коллапсе" и даже о "акте самосознания"...

Специалист: С проблемой самосознания Вам лучше обратиться к Пенроузу с Хамероффом, я оперирую научными терминами. Живая клетка - это условно твердое вещество (ДНК) в жидкости (цитоплазма). Здесь когерентные состояния существуют от силы микросекунды, что не дает возможности применить квантовые методы. Для гейтов нужно а) твердое тело, б) низкие температуры (хотя бы жидкий азот, лучше гелий), жидкости при комнатной температуре вообще не подходят. Был в конце 90-х проект ЯМР жидкостного "компьютера", но дальше одного кубита дело не пошло. Жидкости вообще неудобный объект для квантовых методов, кроме гелия, но там нужны низкие температуры, при которых жизнь исключена. Вот с этим связан мой скепсис относительно штурма биологической сферы прямо сейчас.

Дилетант: Я его не разделяю. Вот есть ансамблевый подход, когда тысяча атомов рассматривается как один - об этом я как раз прочел в книге. Если оперировать не с отдельным атомом, где действительно нужны и низкие температуры и жесткая локация, а большими группами, где когерентность может многократно усиливаться, кажется, в KLM- компьютере как раз используется это.

Модератор: Коллеги, вы вошли в клинч, и напоминаете персонажи из басни "Лебедь, рак и щука", постарайтесь найти общий язык.

Дилетант: Хорошо, я буду использовать понятные коллеге термины. Вы согласны, что настоящие законы физики должны быть общими и для любимой Вами прибористики, и для живого? Если Вы не согласны, то Вы - идеалист и вообще сторонник поповщины!

Модератор: Желтая карточка! Я прошу воздержаться от личных выпадов!

Специалист: Все в порядке, меня так не пробьешь. Разумеется, я согласен. Просто я, в отличие от Вас, не строю воздушных замков, а занимаюсь делом.

Дилетант: Вот и я по делу. Как, по-вашему, должны выглядеть эти законы? Квантовая механика в них должна участвовать, или ее вообще надо оставить в стороне и заниматься накоплением Protein Data Bank и прочими базами данных по белкам, которые уже скоро не будут в хранилища помещаться? Посмотрим на живое с квантовых позиций. В нем порядок или хаос?

Специалист: Порядок, разумеется...

Дилетант: Порядок, и такой, который вашей прибористике не снился! А как его достичь? При расширении системы энтропия будет неизбежно расти - во всех искусственных системах это подтверждается, и на этом стоит термодинамика. Единственный фактор, работающий на повышение порядка при усложнении системы - квантовая запутанность! Это в книге подробно разобрано! Живое вообще нелокально по своей природе, в отличие от отдельного атома, над которым Вы производите эксперименты.

Специалист: Ха-ха, Вы путаете общество! Квантовая энтропия - это не мера беспорядка в обычном смысле слова, это более сложное понятие...

Дилетант: Знаю-знаю. Квантовая энтропия, равная нулю - это не порядок в классическом смысле, это порядок в квантовом смысле, то есть когда все описывается единой пси-функцией, а не ее эрзацами вроде матрицы плотности. Но это и подтверждает мой тезис о том, что для продвижения в биологию язык квантовой теории должен быть изменен.

Специалист: Извините, но язык однозначно соответствует кругу результатов и его нельзя изменить просто так, если только будут новые задачи...

Дилетант: Именно это и происходит с квантовым компьютером. В копенгагенской теории, которую Вы возвели в абсолют, нет никакого описания декогерентности, то есть самого главного препятствия в ваших экспериментах!

Специалист: И что Вы предлагаете конкретно?

Дилетант: Вот зерно амплитуды может дать такое описание, универсальное.

Специалист: И что с того "описания"?

Дилетант: Ну, например, это позволяет избавиться от матрицы плотности, и оперировать только вектором состояния, причем по длине ограниченным! Матрица плотности - чтобы ее хранить надо в квадрат возводить размерность, то есть если у нас, например, миллиард компонент в векторе состояния, и это суперкомпьютер потянет, то матрица плотности - это будет уже миллиард миллиардов, то есть квинтиллион - это уже никакие суперкомпьютеры не поднимут! Вот он - эффект!

Специалист: Вы умолчали о том, что надо выбирать какое-то одно состояние из миллиарда, входящих в матрицу плотности, это в Вашем методе подразумевается.

Дилетант: Да, Вы правы. Но это как раз то, что происходит в реальности. При-

жок от одного базисного состояния к другому, через краткий миг когерентности. И в этот миг надо уложить все управление.

Специалист: Ну и где же Ваше управление? Вы опять размахиваете руками.

Дилетант: Надо считать, моделировать...

Модератор: Мы опять зациклились.

Дилетант: Что я могу сделать, кроме, как говорит оппонент, "размахивания руками"? Вся теория есть такое размахивание.

Специалист: Извините, не сравнивайтесь с квантовой теорией; она предсказывает реальные эксперименты, в отличие от Ваших фантазий...

Дилетант: Если бы на компьютерное моделирование выделялось бы финансирование такое же, как на Ваши эксперименты...

Специалист: У нас приборы.

Дилетант: Сколько стоит операционная система, установленная на Вашем ноутбуке, какова ее доля в его стоимости? А для квантового компьютера это надо умножить...

Модератор: Я вижу, дискуссия фактически закончена и я подвожу итог 2 раунда. Ничья.

Специалист: Вот он, уровень журналистики.

Дилетант: Это подсуживание! Я победил!

Зрители: Наконец то они пришли к согласию...

Все идут на ланч, дилетант что-то объясняет зрителям, собравшимся вокруг него, специалист перекидывается с модератором несколькими короткими репликами.

4.3 Раунд третий, решающий, посвященный физике

Модератор: Этот раунд - последний, и я призываю обе стороны сосредоточиться на нашей главной теме - квантовом компьютере

Специалист: Я всегда об этом помню. Этот проект требует высочайшего профессионализма, так как он связан с постановкой экспериментов, требующих особой точности и владения многими разделами именно физики; заниматься им на уровне общих рассуждений означает потерю времени. Квантовым компьютером должны заниматься мы, физики.

Дилетант: Вы, физики, занимаетесь им уже третий десяток лет. И не только им. Есть еще управляемый термояд, твердый водород и прочие фантазии, которые сводятся к ...

Модератор: Не переходите на личности, ближе к делу!

Дилетант: Я как раз по делу. Ваша любимая физика выдохлась. За последние 50 лет что сделано в области фундаментальных знаний? Математический аппарат, который вы используете, не годится для новых задач и для квантового компьютера. Вы застряли в "античном мире" первой половины 20 века и не хотите видеть его ограниченности!

Специалист: (в сторону: Таковую чушь даже журналисты редко несут) Позвольте Вас просветить. Вы слышали что-нибудь о бозоне Хиггса? А вот тот ноутбук, на котором Вы строчите Ваши писания, Вы вообще понимаете как он сделан? Что это и есть плоды квантовой физики, которую Вы сейчас так обругали?!

Дилетант: Не валите все в одну кучу. Я не хуже Вас знаю роль квантовой теории. Но все значимое, ноутбук, например, было фактически придумано, на концептуальном уровне, 50 лет назад, или больше. Что сделано в более поздний период? Я знаю только одно: проект, о котором мы сейчас говорим. И этот проект завершается нахождением как раз той границы, за которой кончается любимая Вами фундаментальная физика. Потому что Природа не слушается гильбертологии, на которую Вы молитесь, и традиционный математический анализ не адекватен сложным процессам, таким как квантовое вычисление.

Специалист: Кроме математики, в физике есть еще более важное: интуиция, впрочем Вам этого не понять.

Дилетант: Физическая интуиция есть иллюзия, впрочем, очень распространенная. Она полностью основана на математическом аппарате, и история физики 20 века - красноречивое свидетельство тому.

Специалист: Хватит болтать! Что Вы конкретно предлагаете?

Дилетант: Квантовый компьютер нужен для управления химией, и в перспективе - биологией. Это требует универсализма, что исключает замыкание проекта в рамках физики. Я не люблю слово "междисциплинарность", оно вводит в заблуждение. Здесь должны быть очень строгие критерии, но именно универсальные, а не узко - физические.

Специалист: Например?

Дилетант: Например, отказ от равноправия базисов в гильбертовом пространстве. Попробуйте описать бактерию в импульсно-энергетическом базисе.

Специалист: Никто этого делать не будет. Гейты - вот там базисы можно выбирать в зависимости от удобства, бактерия здесь не при чем.

Дилетант: Создание гейтов - важнейшая работа, но надо видеть цель. Эти гейты должны работать именно в бактерии, иначе зачем нужен квантовый компьютер? Даже не просто в бактерии, в нас самих! Мы видим природу только через призму нашей собственной биологии. Мы не можем прикоснуться к далеким галактикам или залезть внутрь атома. Но вся физика, в том числе и ядерная - работает по-настоящему именно в биологии. Возьмите сверхтонкое взаимодействие электронных и ядерных спинов. На нем основана магниторецепция насекомых и птиц. А радиоактивность - важнейший мутагенный фактор, основа эволюции. Физика, по большому счету, есть часть биологии. И потому фантазиям есть предел, и мы к нему уже подошли и в

него уперлись. Отсюда и застой.

Специалист: Я отчасти согласен с Вами, но универсализм должен учитывать имеющиеся достижения. Вот как все-таки преодолеть декогерентность? Любимая Вами математика с кодами коррекции работает только когда hardware поднят до высокого уровня, до которого мы не можем пока подняться. Вы упираете на застой, но где выход?

Дилетант Я уверен, что Вы недооцениваете роль теории.

Специалист А именно?

Дилетант Вот у Фейнмана в его книге "КЭД. Странная теория света и вещества"...

Специалист ... которая для домохозяек?

Дилетант Домохозяйка часто обладает большим здравым смыслом, нежели профессор. Так вот, там он все обосновывает с помощью принципа интерференции, даже то, что фотон движется по прямой и со скоростью света. Я только не понял одного, почему он постулирует, что амплитуда движения по световому конусу у фотона бесконечная? Это ведь не следует ниоткуда.

Специалист Это следует из экспериментов.

Дилетант Ну да, конечно. Но хорошо бы это подкрепить и теоретическими доводами.

Специалист Вряд ли у Вас это выйдет.

Дилетант Ну вот смотрите. Вот ядро Фейнмана для свободной частицы $e^{ix^2/t}$...

Специалист Вы там массу забыли, и постоянную Планка ...

Дилетант Да Бог с ней... Представьте себе, что Вы рисуете график этой функции. Ну ее вещественной части. Осцилляции будут все чаще и чаще по мере роста x , верно?

Специалист Конечно.

Дилетант И наступит момент, когда Вы не сможете их нарисовать на доске, потому что период будет меньше размера Вашего мела...

Специалист Я использую фломастеры.

Дилетант Да хоть иглой по стеклу, все равно есть конечная разрешимость рисунка. Так вот, частота осцилляций - это как раз и есть скорость квантовой частицы, ее экземпляра, попавшего в данную точку за данное время. То есть, если мы ограничим частоту - зерном разрешения пространства - мы автоматически ограничим скорость! Вот это и есть скорость света.

Специалист Выглядит неплохо.

Дилетант: Вот что нам дает квантовая физика: IT технологии. У нас есть компьютеры и мы можем многое моделировать. Не просто считать, а именно моделировать динамику. Двигаясь по этому пути, можно не просто имитировать работу гей-

тов в режиме реального времени, можно встраивать в суперкомпьютеры отдельные квантовые устройства, например, генераторы фотонных ЭПР- пар, и демонстрировать квантовое превосходство.

Специалист: Пока это не слишком серьезное превосходство. Нужны оптические полости, а это дорогое оборудование. Причем удержать фотон там удастся всего лишь на несколько десятков рабиевских осцилляций, да и скорость срабатывания зеркал очень плохая.

Дилетант: Да, но, вероятно, можно обойтись и без полостей. Вот, например, темные состояния в них не нуждаются.

Специалист: Не нуждаются, если их кто-то уже сделал. А попробуйте сделать их без полостей, тем более со многими атомами, да еще многоуровневыми.

Энтузиаст из народа: Мы уже все поняли, надо развивать квантовую операционную систему и наступит светлое будущее! Только один вопрос: как с финансированием?

Специалист: Мы вернулись к моему предложению о 1,5 % бюджета страны...

Народ, возбужден, перебивает: Да-да, это именно то, что надо! Специалист победил!

Общее возбуждение, Дилетант что-то пытается отвечать, его не слушают...

Модератор: Итак, я подвожу итог дискуссии: победа за явным преимуществом присуждается специалисту. Победила компетентность и высокий профессионализм.

Народ расходится, возбужденно обсуждая принципы распределения финансов, обещанных Специалистом.

В фойе

Человек из народа, Профан: слушай, я не понимаю, как вообще эти опыты можно проверить. Я слышал, что оборудование очень дорогое и оно есть у единиц. Вдруг они там что-то химичат...

Человек из народа, Знаток: да, это может быть. Но основные вещи проверены надежно, интерференция вот. Уравнение Шредингера. Я говорил с разными людьми насчет нелокальности, независимыми, кто сам делает эксперименты. И они все одно и то же говорят: есть это явление, есть!

Профан: я не очень разбираюсь в сложной алгебре, и потому боюсь подвоха. А ну как там есть момент подтасовки экспериментов? Что-то такое остается, непривычно слишком. Тут только узкие специалисты могут разобраться, а как быть мне. Если я Фома неверующий?

Знаток: я вот что думаю. Вот Шор с Гровером алгоритмы придумали, перебор ускоряют радикально. Неизвестный код открывает квантовый компьютер, причем так быстро, что никто подделать не сможет быстроту этой квантовой машины, то есть в принципе не сможет. И, значит, это - критерий. Я тоже мало понимаю в их экспериментах, я больше люблю теорию. Но придумать код, загадать из 30 цифр -

каждый может ведь. Вот я загадал 2 числа по 30 знаков, перемножил их и результат даю этому специалисту. Пусть расколет на множители! Тогда я поверю, что у него есть квантовый компьютер!

Профан: а ведь точно. Вот это - критерий! Правильно. Но ведь для этого гейты должны быть у них. Работать CNOT должен, Тоффоли там и тому подобное.

Знаток: вот с гейтами туго. Это работа скучная, а от них требуют "квантового превосходства" и немедленно. Гейтами надо заниматься, а не ерундой! Вот в книге написано, что ячейка срабатывает медленно. Но ведь это как раз технически решаемая проблема! И решат ее в обозримом будущем, так же, как решили задачу минимизации микросхем, и уже до десятка нанометров доходят по размеру транзистора. Гейты будут, я уверен. И мы доберемся до настоящего барьера, до константы Q. А там...

Профан: Все эти гейты. Похоже на микроэлектронику, транзистор. Там ведь одна операция, простенькая такая. А вся сложность - в программировании. Я вот программист. Человек эту сложность создает, и в гейтовом компьютере тоже самое будет. Пусть он и квантовый. Опять мы получаем железку! А я вот искусственным интеллектом заинтересовался.

Знаток: Да, приятель, я вот что думаю. В живой клетке, как Шредингер писал, "твердое тело в жидкости", ну то есть ДНК в цитоплазме. Вот куда смотреть надо. Это тебе не микроэлектроника. Вот тут может быть и интеллект этот, искусственный. Опасен он, правда. Получиться может что-то типа этой самой "Синтии", если не хуже.

Профан: Интересно это. Подумаю дома, на досуге. Я теперь вообще дома работаю.

Знаток: Я тоже. Так что, до встречи на просторах интернета!

Профан: До связи! Надеюсь, что и лично пообщаемся в будущем!

Занавес.

Заключение для тех, кто дочитал до конца

Читатель, одолевший все вышенаписанное; это заключение - для тебя! Попробуем взглянуть на квантовый компьютер с высоты птичьего полета, отвлекаясь от множества деталей.

Итак, квантовый компьютер - это, прежде всего, именно компьютер. У него есть физическая часть - hardware и операционная система, а также особая, вычислительная идеология, которая не совпадает ни с физикой, ни с математикой; это идеология Computer Science. Природа этой идеологии - универсальна, она не привязана ни к конкретным физическим объектам, ни к математическим абстракциям; эти вещи играют здесь лишь вспомогательную роль. Компьютер суть продолжение нашего ума и наших рук. Его не надо воспринимать как искусственный "разум" - это исключительно наша прерогатива. Компьютер необходим нам для прогресса, для адаптации к новым условиям, для нашего выживания, он должен использоваться как рабочий инструмент, но не как оракул; оракулом для него являемся мы сами.

Идеология компьютера - продолжение математики, которая, в свою очередь, является областью физики. Теория алгоритмов, раздел традиционной математики, из которого выросла наука о вычислениях и идеология компьютеров, обладает той же красотой и выразительностью, что и алгебра, математический анализ, теория чисел или геометрия. Но вычисления представляют природу по-другому: более реалистично. Ряд сменяющих друг друга кадров видеофильма есть компьютерное вычисление по определенному алгоритму. Если этот алгоритм верен, виртуальная реальность видеофильма будет неотличима от настоящей реальности. Реалистичность динамической картины есть критерий нашего познания природы явлений.

В рамках представлений классической физики человек научился воспроизводить сценарии не сложных процессов, решая дифференциальные уравнения, что обеспечивало прогресс вплоть до конца 20 века. Такие сценарии опирались на нахождение очень точных значений физических величин, сначала экспериментальным путем, а затем и с помощью квантовой физики; таких как энергия возбуждения атомов, время перехода электрона, или его магнитный момент. Это определило прогресс технологий, которые мы используем в настоящее время.

Но вызов современности заключается в управлении биологией, и здесь возникла необходимость в квантовом компьютере. Этот объект лежит в вотчине физиков, и то, что мы сейчас имеем, сделано на основе квантовой физики, по тем шаблонам, по которым создавалась микроэлектроника: это квантовые гейты Фейнмана, их массивы, и представления о квантовом вычислении. Эксперименты в этой области выявили удивительные, контр-интуитивные феномены, такие как дальное действие. Мы научились использовать созданную в 20 веке квантовую физику для защиты информации. Но квантовый компьютер выходит за пределы физики как таковой. Его идеология, идеология вычислений, вносит коррективы в квантовую теорию на уровне математического аппарата, в котором теперь не должно быть традиционных бесконечностей, как в аналитике.

Это ограничение имеет фундаментальную природу. Еще в середине 20 века была установлена логическая необходимость перенормировок - изменения значений зарядов и масс элементарных частиц в зависимости от зерна разрешения. Для создания реалистичной картины сложных процессов необходим не столько математический анализ недавнего прошлого физики, сколько конструктивный анализ Маркова-младшего (см. Приложение), в котором актуальны лишь приближения любых величин, а не их точные значения. Это и есть идеология Computer Science, которая только и может являться основой квантовой операционной системы.

Создание квантовой операционной системы есть задача ближайшего будущего. Она требует весьма решительного пересмотра копенгагенских воззрений на квантовую физику, в частности, ограничения размерности пространства состояний и отказа от алгебраической универсальности представлений векторов состояний для сложных систем. Это урезание гильбертовых пространств необходимо для построения реальной картины сложных процессов и управления ими, так как традиционный путь квантовых гейтов не способен дать работающего квантового компьютера. Задача этого старого, фейнмановского интерфейса - определить границы копенгагенского формализма, доведя до предела сложности когерентные состояния кубитов. Это - промежуточный, но необходимый и важный этап работы над квантовым компьютером, на котором сейчас сосредоточены усилия экспериментаторов в этой области.

Но основная часть работы над проектом квантового компьютера связана с совершенствованием его математического обеспечения, квантовой операционной системы, которая должна быть размещена на классическом суперкомпьютере или подобном высокопроизводительном устройстве. Физическая часть квантового компьютера, технология которой еще не определена, будет промежуточным звеном между операционной системой и реальным явлением. Это звено представляет собой новизну квантового компьютера, который, таким образом, сможет обладать фундаментальным, квантовым, превосходством над обычным суперкомпьютером, реализуя такой феномен, как мгновенное дальное действие.

Для сложных систем должно измениться и понятие вектора состояния: его алгебраическая природа и статистический смысл. В простых случаях, хорошо исследованных физикой 20 века, нет никаких проблем с набором статистики: атомов водорода огромное число. С бактериями это уже не так: каждая обладает индивидуальностью. Переход от физических представлений к биологии возможен только в рамках Computer Science; это выходит за рамки книги. Однако важный аспект такого перехода - старый вопрос о детерминизме, и он имеет положительное решение для некоторого класса процессов, что представляет еще один косвенный довод в пользу реалистичности всего проекта.

Задача трудна, но ставки чрезвычайно высоки - это управление жизнью. Залогом нашего успеха является триумф квантовой механики с ее удивительно точным совпадением со всеми известными экспериментами. Квантовый компьютер - новая ступень развития этой великой теории, которая приведет нас к объединению значительной части естествознания, той, что пока лишь формально охватывается электродинамикой и связана с химией и биологией.

Автор надеется, что эта книга дала представление о масштабе и ценности проекта "Квантовый компьютер" и, быть может, поддержала кого-то из читателей в намерении самому принять в нем участие.

Благодарности

Работа над рядом результатов, приведенных в книге, поддержана фондом РФФИ, грант а-18-01-00695.

Автор признателен Надежде Викторовой за обсуждение и ряд ценных замечаний.

Приложение А

Приложение

А.1 Нижняя массовая оценка квантовой сложности

Если говорить кратко, квантовое ускорение вычислений состоит вот в чем. Допустим, мы имеем некий абстрактный квантовый компьютер, в котором реализуется под нашим контролем над гамильтонианом H эволюция $\exp(-\frac{i}{\hbar}Ht)$. Можем ли мы с помощью такого устройства предсказать будущее произвольной классической системы? И если да, то насколько быстро? К этому вопросу, по-существу, сводится важнейшая проблема верификации того факта, что кто-либо построил именно квантовый компьютер, а не подделал его работу с помощью спрятанного в подвале суперкомпьютера.

Именно это называется квантовым ускорением классического вычисления. Мы покажем, что если понимать под классической системой конкретную функцию $f : \mathcal{K} \rightarrow \mathcal{K}$ из конфигурационного пространства в себя (закон классической эволюции), то ответ на этот вопрос будет зависеть от того, на каком промежутке времени t мы рассматриваем предсказание. Если не накладывать на t никакого ограничения, то квантовое время будет иметь порядок не меньше квадратного корня из классического, то есть квантовое ускорение для большинства классических задач не превзойдет гроверовского - для перебора.

Если же потребовать, чтобы время t было достаточно малым (по сравнению с числом всех возможных конфигураций компьютера), у нас получится совсем удивительный факт: квантовый компьютер потратит на моделирование такое же время, какое занимает сама классическая эволюция (см. [15]).

Квантовый Ахиллес может не догнать классическую черепаху!

Мы покажем, как устанавливается нижняя граница в квадратный корень из классического времени для квантовой сложности нахождения результата итераций классического оракула. Заметим, что такие результаты показывают фундаментальные пределы скорости "квантового Ахиллеса"; их невозможно преодолеть никаким совершенствованием его структуры.

Итак, классическая эволюция представляется в виде итерации некоторой функ-

ции f , так что она имеет вид

$$x_0 \longrightarrow f(x_0) \longrightarrow f(f(x_0)) \longrightarrow \dots \longrightarrow f^k(x_0) \longrightarrow \dots \longrightarrow f^T(x_0),$$

где через $f^k(x_0)$ обозначена k -кратная итерация f . Значение x_0 не играет в данном случае никакой роли, так что мы пишем просто f^k .

Квантовый компьютер, наш Ахиллес, имеет в своем распоряжении функцию f , и может ее использовать как квантовый оракул $Qu_f : |x, y\rangle \longrightarrow |x, y \oplus f(x)\rangle$. Все слова f^k принадлежат базисным состояниям квантового гильбертова пространства, так что любое из этих слов можно подставить вместо x или y . Итак, мы можем считать, что f^k принадлежат базисным состояниям нашего компьютера. Тогда, после надлежащей группировки нескольких последовательных операций в вычислении, мы можем считать, что каждое такое состояние e вызывает оракул f на некотором слове $q(e)$ из того же набора (группировка необходима, чтобы в каждой группе было ровно одно вопросное состояние). Мы можем группировать элементарные операции, как угодно; нам нужна только унитарность всех квантовых переходов, использующаяся в дальнейших неравенствах. Тогда вероятность того, что квантовое состояние

$$|\Psi\rangle = \sum_j \lambda_j |j\rangle$$

нашего Ахиллеса вызовет оракул f на слове a , будет считаться по формуле

$$\delta_a(\Psi) = \sum_{j: q(j)=a} |\lambda_j|^2,$$

вытекающей из правила Борна. Положим $d_a(\Psi) = \sqrt{\delta_a(\Psi)}$.

Вся скорость Ахиллеса - в этом параллелизме! Он может догнать черепаху - классическое вычисление - лишь за счет того, что спрашивает оракул сразу на всех словах, а не только на одном, как она. Но посмотрим, что ему удастся сделать?

Как определить разницу между двумя стратегиями классической черепахи: функциями f и g , которые определяют классическую динамику? Самое естественное - обобщить определение $d_a(\Psi)$, и определить расстояние между стратегиями черепахи как

$$d_\Psi(f, g) = \left[\sum_{a: f(a) \neq g(a)} \delta_a(\Psi) \right]^{1/2}.$$

Из этого определения сразу вытекает, что

$$\|Qu_f(\Psi) - Qu_g(\Psi)\| \leq 2d_\Psi(f, g). \quad (\text{A.1})$$

В этой оценке - слабая сторона Ахиллеса. Оператор вопроса к оракулу Qu_f - унитарен, и это связывает квантовую скорость. Поскольку мы анализируем возможности квантового компьютера по отношению ко всем классическим, наша черепаха может применить, так сказать, обманный ход. Что будет, если изменить значение f только на одном слове? Понятно, что это, в большинстве случаев, изменит и значение конечного состояния f^T . Но сможет ли наш Ахиллес уловить подмену? Если его квантовые состояния будут мало отличаться при работе с этими двумя оракулами, он не сможет их различить при измерении, и будет обманут!

Рассмотрим два пути Ахиллеса: с оракулом f и с оракулом g соответственно:

$$\begin{aligned} & \Psi_0 \longrightarrow \Psi_1 \longrightarrow \dots \longrightarrow \Psi_t, \\ \Psi'_0 = & \Psi_0 \longrightarrow \Psi'_1 \longrightarrow \dots \longrightarrow \Psi'_t, \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Пусть f действуют всюду одинаково, кроме одного слова a , на котором $f(a) \neq g(a)$. Из неравенства (A.1) простой индукцией по t непосредственно устанавливается, что

$$\|\Psi_t - \Psi'_t\| \leq 2 \sum_{i=0}^{t-1} d_a(\Psi_i). \quad (\text{A.3})$$

Теперь нам надо выбрать a так, чтобы доставить Ахиллесу максимум неудобств. Определим матрицу

$$a_{ij} = \delta_{fj}(\Psi_i), \quad i = 1, 2, \dots, t; \quad j = 1, 2, \dots, T.$$

Здесь t - время Ахиллеса, а T - время черепахи; T/t - коэффициент квантового ускорения. Как связаны эти времена? Максимальное неудобство для нашего Ахиллеса будет доставлено вот таким выбором $a = f^\tau$, где τ выбрано так, что $\sum_{i=1}^t \leq t/T$. Это возможно потому, что сумма матричных элементов по любой строке равняется 1 - это полная вероятность; значит, сумма всех вообще элементов будет не больше t . Теперь мы имеем

$$\|\Psi_t - \Psi'_t\| \leq 2 \sum_i \sqrt{a_{i\tau}} \leq 2 \sqrt{t \sum_i a_{i\tau}} \leq 2t/\sqrt{T}.$$

Второй переход здесь вытекает из неравенства между нормами в пространствах l_1 и l_2 , доказательство которого мы предоставляем читателю в качестве упражнения. Мы видим, что если $t = o(\sqrt{T})$, то Ахиллес проиграл, потому что он не сможет отличить положение классической черепахи f^T от иных. То есть невозможно получить более чем квадратичное квантовое ускорение для большинства классических алгоритмов.

Есть и нижние границы квантовой сложности иного типа. Например, устанавливающие, что квантовый компьютер не может решить переборную задачу существенно быстрее, чем по алгоритму Гровера (см. [13], [14]), а также, что любой квантовый алгоритм, более быстрый, чем гроверовский, должен почти для всех переборных задач давать ошибочный ответ (см. [12]).

Более детальное рассмотрение квантового вычисления [15] показывают, что Ахиллес в большинстве случаев, вообще не способен догнать черепаху классического компьютера. Таким образом, квантовое ускорение классических вычислений является редким феноменом. Оно имеет место для алгоритмов типа перебора, тех самых, которые допускают ускорение с помощью распараллеливания (см. [56]). Задача типа итераций, рассмотренная нами, относится к типу GMSP (см. [57]) и в общем случае не допускает такого типа ускорения; для нее квантовый компьютер оказывается, в подавляющем большинстве случаев, не лучше классического.

Это - косвенное свидетельство того, что квантовый и классический параллелизм близки друг другу. Что подкрепляет уверенность в том, что и попытки найти какие-либо формы детерминистического описания квантовых эволюций, предпринимавшиеся нами в третьей главе, не являются только лишь математическими упражнениями.

А.2 Квантовый гармонический осциллятор

Гармоническим осциллятором (г.о.) называется шарик массой m , подвешенный на пружинке жесткости k .

1. Написать оператор энергии H г.о. используя закон Гука $F = -kx$ и определение силы через потенциал $F = -\nabla V$. (Указание: $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2}$).

2. Решить классическое уравнение динамики для г.о., найти частоту колебаний ω и написать H через ω . (Указание: $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$).

3. Привести гамильтониан г.о. к виду

$$H = \hbar\omega H_0, \quad H_0 = \frac{1}{2}(X^2 + P^2) \quad (\text{A.4})$$

для подходящих операторов X, P , и найти $[X, P]$. (Указание: $X = \sqrt{m\omega/\hbar}x$, $P = \frac{p}{\sqrt{m\hbar\omega}}$, $[X, P] = i$).

4. Определим операторы

$$a = \frac{X + iP}{\sqrt{2}}, \quad a^+ = \frac{X - iP}{\sqrt{2}}. \quad (\text{A.5})$$

Найти $[a, a^+]$ и выразить H_0 через них. (Указание: $[a, a^+] = 1$, $H_0 = a^+a + \frac{1}{2}$).

5. Доказать, что если $|\phi_1\rangle$ - собственный вектор H_1 с собственным значением c_1 , то $a^+|\phi_1\rangle$ - собственный вектор H_1 с собственным значением $c_1 + 1$, а если $a|\phi_1\rangle \neq 0$, то $a|\phi_1\rangle$ - собственный вектор H_1 с собственным значением $c_1 - 1$.

6. Найти собственное состояние H с собственным значением $\hbar\omega/2$, решив задачу на собственные значения H . Это состояние обозначается через $|0\rangle$ и называется вакуумным. Указание: решение искать в виде гауссиана. Ответ:

$$|0\rangle = (m\omega/\pi\hbar)^{1/4} e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \quad (\text{A.6})$$

7. Доказать, что $a|0\rangle = 0$ и $|0\rangle$ - единственное состояние с таким свойством. (Указание: использовать теорему о существовании и единственности решения задачи Коши).

8. Используя тот факт, что спектр гамильтониана H ограничен снизу, доказать, что он а) имеет вид $\frac{\hbar\omega}{2} + n\hbar\omega$ при $n = 0, 1, \dots$, б) невырожден. Использовать результаты задач 5 и 7.

9. Обозначим через $|n\rangle$ собственное состояние H с собственным значением $\frac{\hbar\omega}{2} + n\hbar\omega$ и единичной нормой. Найти закон действия операторов a, a^+ и a^+a на $|n\rangle$. Указание: использовать результат задачи 4. Ответ:

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad a^+a|n\rangle = n|n\rangle. \quad (\text{A.7})$$

Задача 9 дает основание назвать операторы a, a^+, a^+a операторами уничтожения кванта возбуждения, рождения кванта возбуждения и числа квантов возбуждения г.о. соответственно.

Модой электромагнитного поля называется частота и направление распространения кванта поля - фотона, а также его поляризация (направление его электрического поля). Из уравнений Максвелла вытекает, что если зафиксировать какую-то моду, классическая динамика поля описывается гармоническим осциллятором на данной частоте. Таким образом, при квантовом описании поля в данной моде состояния поля будут различаться только по числу n фотонов данной моды, а общий вид одномодового состояния будет иметь вид $|\Psi_{one\ mode}\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n |n\rangle$.

А.3 Приближение вращающейся волны

Гамильтониан Джейса - Каммингса (Jaynes-Cummings, JC) имеет вид

$$H_{JC} = H_0 + H_1, \quad H_0 = \hbar\omega a^+ a + \hbar\omega \sigma^+ \sigma, \quad H_1 = g(a^+ + a)(\sigma^+ + \sigma).$$

Целью данного цикла задач является доказательство **справедливости RWA**:

При $g/\hbar\omega \ll 1$ часть взаимодействия H_1 в гамильтониане H_{JC} можно заменить на $H_1^{RWA} = g(a^+ \sigma + a \sigma^+)$, так что для нового гамильтониана

$$H_{JC}^{RWA} = H_0 + H_1^{RWA}$$

решение уравнения Шредингера будет с большой точностью совпадать с решением уравнения Шредингера для гамильтониана H_{JC} .

1. Введем вместо решения $|\Psi(t)\rangle$ уравнения Шредингера для гамильтониана H_{JC} другую волновую функцию

$$|\Psi_{int}(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t} |\Psi(t)\rangle.$$

Доказать, что эта функция является решением уравнения Шредингера для нового гамильтониана

$$H_{int} = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t} H_1 e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}.$$

Этот гамильтониан называется представлением взаимодействия.

2. Доказать, используя определения, соотношения коммутации для бозонов (полевые операторы) и фермионов (атомные операторы), а также атомно-полевые коммутационные соотношения:

$$[a, a^+] = 1, \quad \{\sigma, \sigma^+\} = 1, \quad [a, \sigma] = [a^+, \sigma] = [a, \sigma^+] = [a^+ \sigma^+] = 0.$$

3. Доказать следующую Лемму:

Лемма 1. $[H_0, H_1] = 2g\hbar\omega(a^+ \sigma^+ - a \sigma)$.

(Указание: использовать результат задачи 2.)

4. Определим индукцией по n коммутатор n -ой степени:

$$F_1 = [H_0, H_1], \quad F_n = [H_0, F_{n-1}].$$

Доказать формулу

$$F_n = \sum_{k=0}^n C_n^k H_0^k H_1 H_0^{n-k} (-1)^{n-k}.$$

Указание: базис индукции - определение коммутатора, в шаге использовать соотношение на биномиальные коэффициенты

$$C_n^k = C_{n-1}^k + C_{n-1}^{k-1}.$$

5. Доказать формулу

$$F_n = 2^n g (\hbar\omega)^n (a^+ \sigma^+ + (-1)^n a \sigma).$$

Указание: использовать Лемму 1.

6. Доказать, что коэффициент K_n при t^n в разложении H_{int} по степеням t имеет при $n = 1, 2, \dots$ вид

$$K_n = \frac{i^n}{\hbar^n n!} g \omega^n 2^n (a^+ \sigma^+ + (-1)^n a \sigma),$$

а свободный член равен $g(a^+ \sigma + a \sigma^+)$. Указание: использовать результаты задач 4 и 5.

7. Доказать формулу

$$H_{int} = g(a^+ \sigma + a \sigma^+ + a^+ \sigma^+ e^{2i\omega t} + a \sigma e^{-2i\omega t}).$$

Указание: использовать результат задачи 6.

8. Доказать **справедливость RWA** (см. начало). Указание: использовать результат задачи 7, теорему Лейбница о знакочередующихся рядах и тот факт, что действительная и мнимая части решения уравнения Шредингера являются кусочно-монотонными функциями (функциями, монотонными на любом участке разбиения области определения на конечное число сегментов). Осцилляции мнимых экспонент в формуле из задачи 7 приводят к тому, что поправка к решению уравнения Шредингера при переходе от H_{JC} к H_{JC}^{RWA} становится бесконечно малой при $g/\hbar\omega \rightarrow 0$.

A.4 ЯВНЫЙ ВИД ТЕМНЫХ СОСТОЯНИЙ В МОДЕЛИ ТС

Доказательство Теоремы о структуре темных состояний 2.6.

Докажем сначала пункт 1. Поскольку состояние $|\Psi\rangle = \sum_j \lambda_j |j\rangle$ является темным тогда и только тогда, когда выполнена система уравнений (2.11), принадлежность $|\Psi\rangle \in D_k^n$ эквивалентна выполнению системы S_k^n , состоящей из всех равенств вида

(2.11) для всех j' , таких что $1(j') = k - 1$. Если $k = n$, то $\dim(D_k^n) = 0$ и пункт 1 выполнен; поэтому достаточно рассмотреть случай $k < n$. Тогда различным j' будут соответствовать различные уравнения из S_k^n . Поскольку в системе S_k^n имеется C_n^k неизвестных и C_n^{k-1} уравнений, для доказательства пункта 1 достаточно показать, что все уравнения в S_k^n независимы.

Любая перестановка π из группы S_n естественным образом действует на множестве $B = \{0, 1\}^n$ всех бинарных строк j длины n ; результат такого действия обозначаем через πj . В частности, подстановка $(a, b) \in S_n$ действует как транспозиция двух кубитов с номерами a и b данной строки. Назовем такую транспозицию существенной, если два затрагиваемых в ней кубита имеют разные значения. Тогда существенными будут те и только те транспозиции, которые меняют строку, на которую они действуют.

Лемма 0. Для любой строки $j \in B$ и любого $\pi \in S_n$ строка πj имеет вид $(a_s, b_s)(a_{s-1}, b_{s-1}) \dots (a_1, b_1)j$, где все номера $a_1, a_2, \dots, a_s, b_1, b_2, \dots, b_s$ различны, и s равно удвоенному расстоянию Хамминга между j и πj .

Доказательство. Пусть s минимальное из таких чисел, что для некоторого набора подстановок (a_q, b_q) , $q = 1, 2, \dots, s$ строка πj имеет вид $(a_s, b_s)(a_{s-1}, b_{s-1}) \dots (a_1, b_1)j$. Докажем, что все номера $a_1, a_2, \dots, a_s, b_1, b_2, \dots, b_s$ различны. Действительно, пусть это не так, и какой-то кубит затрагивается дважды. Поскольку всегда $(a, b) = (b, a)$ и подстановки вида (a, b) и (c, d) для различных a, b, c, d коммутируют, мы можем, меняя местами подстановки вида (a_q, b_q) добиться, чтобы рядом оказались две подстановки $(a_q, b_q), (a_{q-1}, b_{q-1})$, такие что $b_{q-1} = a_q$. Так как s минимально, среди номеров кубитов $a_q, b_q, a_{q-1}, b_{q-1}$ ровно 3 различных, можно считать, что номера кубитов a_{q-1}, a_q, b_q различны.

Значения этих кубитов в бинарной строке $j' = (a_{q-2}, b_{q-2})(a_{q-3}, b_{q-3}) \dots (a_1, b_1)j$ обозначим через a, b, c . В силу минимальности s $a \neq b$ и можно считать, что $a = 0, b = 1$. Если $c = 0$, подстановка (a_q, b_q) будет лишней. Если $c = 1$, $(a_q, b_q), (a_{q-1}, b_{q-1})j' = (a_{q-1}, b_{q-1})j'$ и опять нарушено условие минимальности. Таким образом, все кубиты, участвующие в рассматриваемых подстановках, имеют различные номера, и значения их в каждой подстановке также различны. Отсюда вытекает равенство s удвоенному расстоянию Хамминга между j и πj . Лемма 0 доказана.

Определим на множестве B_{k-1}^n естественную метрику, положив расстояние $d(j, j')$ между базисными состояниями $j, j' \in B_{k-1}^n$ равным половине расстояния Хамминга между ними, что, в силу Леммы 0, равно минимальному числу транспозиций (перестановок пары кубитов) в переходе от j к j' .¹

Последовательность состояний j_0, j_1, \dots, j_r , такую что любой переход $j_i \rightarrow j_{i+1}$, $i = 0, 1, \dots, r - 1$ в ней является существенной транспозицией, назовем правильной, если любой кубит затрагивается в ней не более чем однажды.

Зафиксируем произвольно $j_0 \in B_{k-1}^n$.

¹Так определенное расстояние - через число транспозиций, удобнее хамминговского, так как последнее между элементами B_{k-1}^n всегда четно.

Лемма 1. Пусть $j_0, j_1, j_2, \dots, j_r$ - последовательность состояний из B_{k-1}^n . Если для любого $q = 0, 1, \dots, r-1$

$$d(j_q, j_0) = d(j_{q+1}, j_0) - 1, \quad d(j_{q+1}, j_q) = 1, \quad (\text{A.8})$$

то существует правильная последовательность транспозиций вида $j_0 \rightarrow j_1 \rightarrow \dots \rightarrow j_r$, транспозиции в которой определены однозначно и наоборот, если существует такая правильная последовательность транспозиций, то для любого $q = 0, 1, \dots, r-1$ выполнены равенства (A.8).

Индукция по r . Базис очевиден. Шаг. Пусть Лемма 1 верна для $r-1$ и докажем ее для r . Пусть сначала выполнены равенства (A.8). По предположению индукции существует правильная последовательность P транспозиций $j_0 \rightarrow \dots \rightarrow j_{r-1}$, и, в силу $d(j_{q+1}, j_q) = 1$ переход $j_{r-1} \rightarrow j_r$ - тоже есть транспозиция. Эта транспозиция должна менять ноль и единицу, так как в противном случае мы имели бы противоречие с условием $d(j_{r-1}, j_0) = d(j_r, j_0) - 1$. Тогда если правильность нарушается на данном шаге, существует кубит, дважды участвующий в транспозициях из $j_0 \rightarrow \dots \rightarrow j_r$, причем он затрагивается именно на последнем шаге $j_{r-1} \rightarrow j_r$. Но тогда мы могли бы сократить эту последовательность транспозиций, получив противоречие с условием $d(j_q, j_0) = d(j_{q+1}, j_0) - 1$. Действительно, не ограничивая общности, можно предположить, что последовательность транспозиций P перемещает единицы из кубитов с номерами $1, 2, \dots, r-1$ на позиции $r, r+1, \dots, 2r-2$ в произвольном порядке, на которых первоначально стояли нули. Причем последняя транспозиция $j_{r-1} \rightarrow j_r$ перемещает кубит с номером $2r-2$ либо на место $r-1$, либо на место $2r-1$. В первом случае последовательность P можно заменить более короткой, так как в результате ее действия могут фактически перемещаться только $r-2$ кубита. Во втором случае укоротить можно последовательность $j_0 \rightarrow j_1 \rightarrow \dots \rightarrow j_r$, так как в ней фактически только $r-1$ единиц замещаются нулями, а это в силу Леммы 0 означает, что $d(j_{r-1}, j_0) = d(j_r, j_0)$, что противоречит условию.

Пусть теперь последовательность $j_0 \rightarrow \dots \rightarrow j_r$ - правильная последовательность транспозиций, и, по предположению индукции, равенства (A.8) выполнены для всех $q = 0, 1, \dots, r-1$. Второе равенство будет выполнено в силу того, что $j_{r-1} \rightarrow j_r$ - транспозиция. Если нарушено равенство $d(j_{r-1}, j_0) = d(j_r, j_0) - 1$, то переход от j_0 к j_r можно сделать менее чем за r транспозиций и (определенное нами) расстояние между j_0 и j_r меньше r , что противоречит правильности последовательности $j_0 \rightarrow \dots \rightarrow j_r$, так как в ней каждый кубит затрагивается только один раз, и потому расстояние между j_0 и j_r равно r . Лемма 1 доказана.

Определим частичный порядок на B_{k-1}^n , положив $j_1 < j_2$, тогда и только тогда, когда существует правильная последовательность транспозиций вида $j_0 \rightarrow \dots \rightarrow j_1 \rightarrow \dots \rightarrow j_2$. Тогда мы можем расположить все состояния в B_{k-1}^n в узлах графа D , в начальной вершине которого находится j_0 , и для любой вершины j' все вершины j , лежащие выше j' , соединенные с j' ребром, удовлетворяют равенствам $d(j, j_0) = d(j', j_0) + 1$ и получаются из j' ровно одной транспозицией. При этом любой геометрически монотонно возрастающий путь на этом графе будет содержать вершины j в порядке возрастания значения $d(j, j_0)$, согласно определенному порядку $<$. Существование и единственность такого графа D вытекает из Леммы 1. Мы будем последовательно нумеровать ярусы этого графа, начиная с нулевого, на котором расположено j_0 .

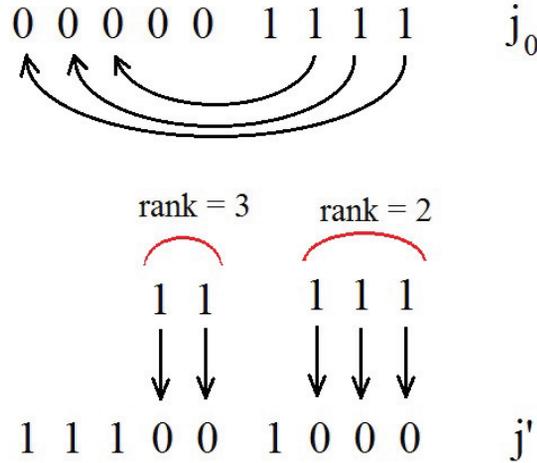


Рис. А.1: j' - родоначальник ранга 3, полученный из j_0 указанными в верхней части рисунка подстановками. Два члена его семьи имеют ранг 3, а три члена - ранг 2: вместо замены нуля единицей в любом кубите q из $rem(j')$ можно в переходе $j_0 \rightarrow \dots \rightarrow j'$ не делать подстановку с кубитом q , получив вместо j' нового родоначальника для члена $[j']$ ранга 2.

Базисные состояния $j' \in B_{k-1}^n$, лежащие в ярусе p , назовем родоначальниками ранга p . Ранг родоначальника равен общему числу номеров кубитов, которые равны единице в j_0 , и нулю - в j' , то есть нашему расстоянию между этими вершинами. Мы будем обозначать множество этих номеров кубитов через $rem(j')$. Рангом состояния $j \in B_k^n$ назовем минимальный ранг родоначальника $j' \in B_{k-1}^n$, семья которого содержит j : $j \in [j']$. Ранг состояния $j \in B_k^n$ обозначается через $r(j)$.

Лемма 2. Пусть родоначальник $j' \in B_{k-1}^n$ имеет ранг p . Тогда ровно p членов его семьи имеют ранг $p - 1$, остальные $n - k + 1 - p$ имеют ранг p .

Доказательство. Заметим сначала, что $0 \leq p \leq \min\{k - 1, n - k + 1\}$. Из определения ранга элементов B_k^n следует, что члены семьи $[j']$, имеющие ранг $p - 1$, есть в точности базисные состояния j , полученные из j' заменой нуля единицей в каком-то кубите из $rem(j')$. Тогда все остальные члены семьи $[j']$ будут иметь ранг p (см. рисунок А.1). Лемма 2 доказана.

Заметим, что, например, при $k = n$ существует единственная семья с родоначальником нулевого ранга, и эта семья состоит ровно из одного члена, у которого все кубиты единичны. Ранг этого члена также будет нулевым.

Определим значения амплитуд λ_j^0 для всех $j \in B_k^n$ в зависимости от ранга j следующим образом. Пусть $p = r(j)$. Положим

$$\lambda_j^0 = (-1)^p \frac{p!}{\prod_{s=0}^p (n - k + 1 - s)}. \tag{A.9}$$

Корректность этого определения следует из Леммы 2, которая обеспечивает отсутствие нулей в знаменателе. Действительно, в силу $p \leq n - k + 1$ единственная

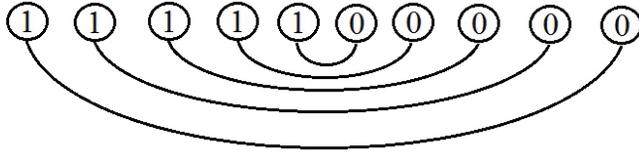


Рис. А.2: Структура синглетного состояния - тензорного произведения синглетов. В него входят все пары кубитов, соединенные любой дугой, так что значения кубитов выбираются либо так, как показано на рисунке, либо противоположным образом. При этом знак пары отрицательный, если 1 предшествует 0 (как указано на рисунке), и положительный в противном случае.

возможность появления таких нулей - значение $s = p = n - k + 1$. Однако число таких состояний $j \in B_k^n$, для которых $p = n - k + 1$, в силу Леммы 2, равно нулю.

Тогда уравнение (2.11) не будет выполняться для $j' = j_0$, так как сумма значений амплитуд для членов семьи нулевого ранга по Лемме 2 составит $(n - k + 1)/(n - k + 1) = 1$. Для членов семьи ненулевого ранга p уравнение (2.11) будет выполнено. Действительно, в силу Леммы 2 в такой семье будет ровно p членов ранга $p - 1$, и ровно $n - k + 1 - p$ ранга p . Подставляя значения амплитуды λ_j^0 из формулы (А.9) для p и $p - 1$, преобразуем уравнение (2.11) в сумму слагаемых вида

$$(-1)^{p-1} \frac{(p-1)!p}{\prod_{s=0}^{p-1} (n-k+1-s)} + (-1)^p \frac{p!(n-k+1-p)}{\prod_{s=0}^p (n-k+1-s)} = 0.$$

Выполнение уравнения (2.11) для любой семьи ненулевого ранга и его нарушение для семьи нулевого ранга при выбранных значениях переменных доказывает, что уравнение (2.11) для $j' = j_0$ не зависит от других уравнений этого вида. В силу произвольности выбора $j_0 \in B_{k-1}^n$ все уравнения системы S_k^n независимы, что и требовалось.

Пункт 1 Теоремы доказан.

Заметим, что из этого пункта следует, что всякое невидимое в RWA приближении состояние является равновесным. Действительно, если состояние темное, то $2k \leq n$, потому что иначе размерность темного подпространства нулевая. С другой стороны, если состояние - прозрачное, то при замене нулей единицами и наоборот оно станет темным, и мы имеем $2k \geq n$, откуда $n = 2k$.

Докажем теперь пункт 2. Любой (n, k) - синглет можно, с точностью до перестановки кубитов, представить в следующем ненормированном виде, где опущены сомножители, имеющие вид $|0\rangle$ (число таких сомножителей равно $n - 2k$):

$$|\mathcal{S}\rangle = |(1 * \dots * \dots * 0 - 0 * \dots * \dots * 1)(*1 \dots * \dots * 0 * - * 0 \dots * \dots * 1*) \dots (* \dots * 10 * \dots * - * \dots * 01 * \dots *)\rangle. \quad (\text{A.10})$$

который схематично изображен на рисунке А.2.

Линейную оболочку множества A обозначаем через $L(A)$, ортогональное дополнение к подпространству L обозначаем через L^\perp , мощность произвольного множества A обозначаем через $|A|$.

Пусть p, q - пара номеров кубитов, $p \neq q$. Рассмотрим двухкубитное пространство $l(p, q)$, порожденное кубитами с номерами p и q , и введем для синглетных и триплетных состояний в этом пространстве следующие обозначения:

$$s_{p,q} = |0\rangle_p |1\rangle_q - |1\rangle_p |0\rangle_q, \quad t_{p,q}^0 = |0\rangle_p |1\rangle_q + |1\rangle_p |0\rangle_q, \quad t_{p,q}^1 = |0\rangle_p |0\rangle_q, \quad t_{p,q}^{-1} = |1\rangle_p |1\rangle_q. \quad (\text{A.11})$$

Первое представляет синглет, три других - триплетные состояния. Эти состояния образуют ортогональный базис в $l(p, q)$.

Рассмотрим произвольное состояние $|\Psi\rangle \in L(B_k^n)$ и пусть $(p, q)|\Psi\rangle$ - обозначает состояние, полученное из $|\Psi\rangle$ перестановкой кубитов p и q . Введем процедуру антисимметризации состояния $|\Psi\rangle$ - равенством

$$An_{p,q}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle - (p, q)|\Psi\rangle.$$

Отметим, что если $|\Psi\rangle$ было темным, то $An_{p,q}|\Psi\rangle$ будет также темным при любых p, q .

Через $r(p, q)$ обозначим множество базисных состояний $|r\rangle$ множества всех атомов, кроме двух: p и q . Обозначим через $L_{p,q}$ подпространство \mathcal{H}_k^n , состоящее из состояний вида $s_{p,q} \otimes |R\rangle$, где $|R\rangle \in L(r(p, q))$. Заметим, что эти пространства в общем случае не являются ортогональными для различных пар p, q .²

Лемма 3.

Для $p \neq q$ $Im(An_{p,q}) = L_{p,q}$, $Ker(An_{p,q}) = L_{p,q}^\perp$ и для $|\Psi\rangle \in L_{p,q}$ имеет место равенство $An_{p,q}|\Psi\rangle = 2|\Psi\rangle$.

Доказательство. По определению, антисимметризация по p, q всегда даст состояние, принадлежащее $L_{p,q}$. Мы имеем: $L_{p,q}^\perp$ состоит из состояний вида

$$t_{p,q}^0 |\psi^0\rangle + t_{p,q}^1 |\psi^1\rangle + t_{p,q}^{-1} |\psi^{-1}\rangle,$$

где $|\psi^s\rangle \in L(r(p, q))$ при $s \in \{0, 1, -1\}$. Применение антисимметризации к таким состояниям дает ноль. Антисимметризация, примененная к состояниям из $L_{p,q}$, даст их удвоение. Если же $|\Phi\rangle \in Ker(An_{p,q})$, то, поскольку, по доказанному, ортогональная компонента состояния зануляется антисимметризацией, а прямая - удваивается, мы имеем $|\Phi\rangle \in L_{p,q}^\perp$. Лемма 3 доказана.

Введем проектор $\mathcal{P}_{p,q}$ на подпространство $L_{p,q}$ естественным образом:

$$\mathcal{P}_{p,q} = \frac{1}{2} \sum_{k \in r(p,q)} |s_{p,q} \otimes k\rangle \langle s_{p,q} \otimes k|. \quad (\text{A.12})$$

Тогда Лемма 3 может быть в эквивалентной форме компактно записана в виде такого Следствия:

²Читателю предлагается доказать, что скалярное произведение двух состояний из $D_{n/2}^n$, являющихся тензорными произведениями синглетов, всегда является ненулевой степенью двойки 2^{-r} .

Следствие: $An_{p,q} = 2\mathcal{P}_{p,q}$.

Состояние $|D\rangle \in D_k^n$, $k > 0$ мы назовем сингулярным, если оно ортогонально всем (n, k) - синглетам. Для доказательства пункта 2 Теоремы достаточно показать, что сингулярное состояние обязано быть нулевым. Для этого нам потребуется ряд дополнительных фактов, касающихся подпространства D_k^n темных состояний.

Лемма 4.

При $k > 0$

$$D_k^n \subset L\left(\bigcup_{p \neq q} L_{p,q}\right).$$

Доказательство.

В данной Лемме необходимо представить любое темное состояние в виде суммы состояний, в каждом из которых некоторый двух-кубитный синглет присутствует как тензорный множитель. Трудность здесь в том, что синглеты не являются ортогональными, и два таких состояния могут быть не полностью различимыми физически. Поэтому нам надо для доказательства данной Леммы более детально рассмотреть траектории отдельных малых порций амплитуды до их полного сокращения при виртуальном испускании фотона.

Действие группы S_n на кубитах в виде их перестановок естественным образом продолжается до операторов на всем пространстве квантовых состояний \mathcal{H} , а именно: на базисных состояниях атомов перестановка $\eta \in S_n$ действует непосредственно на атомную компоненту, оставляя полевую без изменений, а $\eta \sum_{j_p, j} \lambda_{j_p, j} |j_p\rangle |j\rangle = \sum_{j_p, j} \lambda_{j_a, j} |j_a\rangle \eta |j\rangle$.

Теперь мы можем доказать Лемму 4.

Выберем число $k \in \{1, 2, \dots, N-1\}$ и пусть $|D\rangle \in D_k^n$. Рассмотрим подпространство $\tilde{\mathcal{H}}_{k,0}^n$, определенное выше. Состояние $|0\rangle_p |D\rangle \in \tilde{\mathcal{H}}_{k,0}^n$ будет связным относительно гамильтониана $H = H_{TC}^{RWA} - k\hbar\omega I$, так как $D_k^n \subset \mathcal{H}_k^n$, все состояния из B_k^n получаются одно из другого перестановкой атомных кубитов, и эти перестановки коммутируют с H (см. Пример к Предложению выше).

Тогда H совпадает с оператором $a^+\bar{\sigma} + a\bar{\sigma}^+$ на подпространстве $\mathcal{H} = |0\rangle_p \otimes \mathcal{H}_k^n$, то есть темные состояния из D_k^n есть атомные части состояний из ядра H , ограниченного на \mathcal{H} . Поскольку все атомы одинаково взаимодействуют со светом, мы можем считать, что все ненулевые элементы H одинаковы, а изменив масштаб времени - что они равны единице.

Применим Теорему о квантовании амплитуды (см. Главу 3, 3.6) к гамильтониану H и начальному состоянию $|\Psi\rangle = |0\rangle_p |D\rangle \in Ker(\bar{\sigma})|_{\mathcal{H}}$. Для произвольного $\varepsilon > 0$ мы получим приближение состояния $cH|\Psi\rangle$ с точностью порядка ε с помощью θ -сдвига для того квантования θ размера ε порядка ε^2 , существование которого утверждается в Теореме о квантовании амплитуды. Мы имеем: $cH|\Psi\rangle = 0$. Далее в переходе $|0\rangle_p |j\rangle \rightarrow |1\rangle_p |i\rangle$ мы опускаем фотонную часть.

Следствие из Теоремы о квантовании амплитуды означает, что мы можем разложить амплитуды $\lambda_j = \langle j|\Psi\rangle$ исходного состояния в сумму слагаемых $\pm(i)\epsilon$ так, что каждому вхождению такого слагаемого в разложение амплитуды любого базисного состояния $|j\rangle$ в состояние $|\Psi\rangle$ будет соответствовать ровно одно слагаемое вида $\pm(i)\epsilon$ в разложении амплитуды некоторого базисного состояния $|i\rangle$ в результирующее состояние $|\theta\Psi\rangle$, это соответствие будет взаимно однозначным, причем переход вида $|j\rangle \rightarrow |i\rangle$ будет испусканием фотона, то есть атомная часть состояния $|i\rangle$ будет получаться из атомной части $|j\rangle$ заменой одной единицы нулем.

Объединим некоторые вхождения ϵ в амплитуды разложения результирующего состояния во взаимно сокращающиеся пары: $\pm(i)\epsilon$, соответствующие одному базисному состоянию. Тогда соответствующие слагаемые исходного состояния будут представлять собой синглеты, так как пара исходных базисных состояний $|j\rangle$ принадлежит одной семье, в силу свойства \mathbf{Q} квантования амплитуд они различны, и их амплитуды противоположны. Поскольку разница между $|\theta\Psi\rangle$ и $cH|\Psi\rangle = 0$ (c , конечно, зависит от ϵ) стремится к нулю при $\epsilon \rightarrow 0$ в силу (3.14), доля сокращающихся квантов может быть сделана сколь угодно близкой к единице при уменьшении ϵ .

Сумма таких пар состояний будет принадлежать множеству вида $L_{p,q}$, так как такое сокращение означает наличие одного синглета в разложении базисных состояний. Поскольку базисных состояний - фиксированное число, устремляя $\epsilon \rightarrow 0$, мы получим последовательность линейных комбинаций состояний из $L_{p,q}$, сходящуюся к некоторой такой комбинации, которая и будет искомым представлением $|D\rangle$. Лемма 4 доказана.

Пусть $|D_0\rangle$ - сингулярное состояние. В силу Леммы 4 имеем

$$|D_0\rangle = \sum_{p \neq q} s_{p,q} \otimes |D_{p,q}\rangle, \quad (\text{A.13})$$

где $|D_{p,q}\rangle$ - состояния, содержащие $n - 2$ кубита.

Каждое слагаемое этой суммы принадлежит подпространству $L_{p,q}$. При этом трудность в том, что мы не можем утверждать, что $|D_{p,q}\rangle$ - темные состояния, то есть испускание фотона атомами в любом из этих состояний может компенсироваться испусканием фотона атомом, состояние которого принадлежит иному $|D_{p',q'}\rangle$, где $p' \neq p$ или $q' \neq q$.

Мы преодолеем эту трудность с помощью операции антисимметризации. Положим $|D'_{p,q}\rangle = An_{p,q}|D_0\rangle$. Тогда $|D'_{p,q}\rangle$ при любых $p \neq q$ будет сингулярным, так как темнота и ортогональность синглетам сохраняется при перестановке атомов и вычитании.

Покажем, что среди всевозможных состояний $|D'_{p,q}\rangle$ есть ненулевое. Действительно, пусть все такие состояния - нулевые. Тогда, в силу Леммы 3, для любой пары $p \neq q$ $|D_0\rangle \in L_{p,q}^\perp$, и, следовательно, состояние $|D_0\rangle$ принадлежит ортогональному дополнению линейной оболочки всех $L_{p,q}$. Но в этом случае оно нулевое, так как само принадлежит этой линейной оболочке в силу (A.13).

Итак, среди $|D'_{p,q}\rangle$ есть ненулевое; пусть оно соответствует паре $p = 1, q = 2$: $|D'_{1,2}\rangle$. Это состояние - сингулярное, и оно принадлежит $L_{1,2}$, то есть имеет вид $s_{1,2} \otimes |D_1\rangle$.

Тогда $|D_1\rangle$ - тоже сингулярное состояние от $n - 2$ кубитов. Действительно, $|D_1\rangle$ - темное, так как получено отщеплением одного синглета $s_{1,2}$ от темного состояния. Если бы оно не было сингулярным, то оно имело бы ненулевую проекцию на линейную оболочку $(n - 2, k)$ синглетов, полученных при удалении первых двух кубитов из основного пространства. Но тогда умножение его на один синглет - $|D'_{1,2}\rangle$ тоже имело бы ненулевую проекцию уже на линейную оболочку (n, k) синглетов, что противоречит сингулярности $|D'_{1,2}\rangle$.

Итак, $|D_1\rangle$ - сингулярное состояние из $n - 2$ кубитов.

К нему мы применим те же рассуждения, что и к $|D_0\rangle$, получая сингулярное $|D_2\rangle$ от $n - 4$ кубитов, и т.д. В конце концов, мы получим сингулярный синглет D_k или сингулярное произведение основных состояний атомов, что противоречит определению сингулярности. Теорема доказана.

Заметим, что если в приближении RWA состояние является темным, но не невидимым, то $n/2 > k$ и в каждой компоненте его синглетного разложения есть нулевые тензорные сомножители вида $|0\rangle_q$. Для невидимого состояния таких нулевых компонент нет, то есть присутствуют только синглеты.

Итак, мы видим, что темные состояния в точной модели Тависа-Каммингса совпадают с невидимыми состояниями для этой модели в RWA приближении. Действительно, последние, как следует из теоремы, будут линейными комбинациями тензорных произведений ЭПР синглетов $|01\rangle - |10\rangle$, а каждый такой синглет сам по себе будет темным в точной модели Тависа-Каммингса. Этим объясняется преимущество термина "темные состояния": он охватывает не только не испускающие свет, но также и не поглощающие света.

Алгебраическое определение темного состояния для двух-уровневых атомов выглядит так: $J_{\pm}|\Psi\rangle = 0$, где J_{\pm} - повышающий и понижающий оператор. В работе [24] доказано, что это эквивалентно выполнению равенства $U^{\otimes n}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle$ для любого оператора $U \in SU(2)$ (такие состояния $|\Psi\rangle$ в той работе названы синглетными). Применяя нашу Теорему, мы получим, что стационарные точки группы $U^{\otimes n}$, $U \in SU(2)$ являются в точности линейными комбинациями тензорных произведений ЭПР - синглетов, что означает эквивалентность определения темноты в работе [24] и нашего определения темноты для точного решения.

В работе [24] также дана похожая алгебраическая характеристика темных состояний d - уровневых атомов при $d > 2$; явное описание таких состояний представляет интересную задачу.

А.5 Энтропия

Энтропия - понятие из термодинамики, означающее меру хаоса в каком-либо статистическом распределении вероятностей $\bar{p} = (p_1, p_2, \dots, p_N)$. Одновременно, если применить это понятие к информационному каналу, оно будет характеризовать его пропускную способность. Если Алиса посылает Бобу информацию в виде строки независимых битов, число этих битов, переданных в единицу времени, и будет пропускной способностью канала.

Пусть Алиса посылает классические символы $1, 2, \dots, N$, причем делает это для каждого символа с вероятностями p_1, p_2, \dots, p_N соответственно, посылая какой-либо символ в каждый малый интервал времени dt . Сколько битов в секунду она может передать Бобу? Если бы у нее был всего один символ 1, какую информацию она могла бы передать, посылая только лишь один этот символ? Эта информация только одна: момент времени, когда она его посылает, больше ничего она Бобу передать одним символом не сможет. Поскольку вероятность посылки 1 равна p_1 , время появления этого символа в канале пропорционально $1/p_1$, а так как число битов числа пропорционально его логарифму, мы получаем, что с помощью символа 1 Алиса может передать число битов, пропорциональное $-\log(p_1)$, умноженному на p_1 , потому что этот символ вообще может появиться с вероятностью p_1 , и только если он появится, вступает в силу момент времени.

Поскольку все биты независимы, мы получаем выражение для классической энтропии Шеннона

$$S(\bar{p}) = - \sum_{i=1}^N p_i \log(p_i). \quad (\text{A.14})$$

Квантовый аналог - энтропия фон Неймана от матрицы плотности ρ , определяется как $N(\rho) = -\text{tr}(\rho \log(\rho))$, где логарифм матрицы определяется через степенной ряд. Она совпадает с энтропией Шеннона для диагональной формы матрицы ρ . $N(\text{tr}_1(\rho_{\text{comp}}))$ служит мерой запутанности состояния ρ_{comp} композитной системы, если след берется по одной из компонент (неважно какой, результат будет одним). Связь энтропии фон Неймана с пропускной способностью немного более сложна, чем в классическом случае, так как в канал могут поступать не только чистые, но и смешанные состояния; в общем случае пропускная способность квантового канала определяется границей Холево (см. [58]).

А.6 Конструктивный математический анализ

Мы видели конфликт математического анализа и квантовой теории, конфликт, осложняющий ее применение к сложным системам. У этой проблемы есть корректное математическое решение. Это решение открыл Андрей Марков - младший в 70-х годах прошлого века: конструктивный математический анализ (см. [59]). Он основан на понятии конструктивного действительного числа.

Конструктивное действительное число - это такое действительное число x , что существует алгоритм, выдающий одно за другим рациональные приближения x , сходящиеся к самому x . Вычисление по этому алгоритму просто выдает последовательность $r_1, r_2, \dots, r_n, \dots \rightarrow x$ ($n \rightarrow \infty$), где r_i - рациональные числа, то есть они кодируются в виде пар натуральных чисел, в виде пар бинарных строк.

Возникает естественный вопрос. Заданы два конструктивных числа x и y , заданы в виде своих алгоритмов приближений: A_x и A_y , потому что иначе их задать нельзя, только в виде алгоритмов. Спрашивается, можно ли определить алгоритмически, равны эти числа или нет? Читателю предлагается подумать над этим вопросом.

Указание. Если бы существовал алгоритм, который по паре алгоритмов A_x, A_y ,

определял, равны ли числа x и y , то существовал бы алгоритм, который по паре A, x - алгоритм A и входное слово x определял бы, закончит алгоритм A работу над словом x , или нет. А этого сделать нельзя: задача применимости алгоритма к слову алгоритмически неразрешима.

Итак, ответ отрицательный: равенство конструктивных действительных чисел алгоритмически неразрешимо.

Это соответствует физике. Мы можем знать константы: постоянную Планка, скорость света, заряд электрона и т.п. только с некоторой точностью. Их точных значений никто не знает. Теория дает лишь метод нахождения приближенных значений этих констант. Расчет величины магнитного момента электрона, произведенный методом фейнмановских диаграмм³ дает очень хорошее, до семи знаков после запятой, но все же приближенное значение!

Конструктивных чисел - счетное множество, тогда как всех чисел - континуум. Значит, подавляющее большинство чисел - не конструктивны. Читателю предлагается привести пример хоть одного неконструктивного числа. *Все числа, которые хоть как-то используются в физике - конструктивны.*

Что такое конструктивная вещественная функция f конструктивной вещественной переменной? Это алгоритм A^f , который по входу - приближению r_n^x аргумента x , выдает приближение r_n^y значения функции $y = f(x)$. Требуется, чтобы если $r_n^x \rightarrow x$ ($n \rightarrow \infty$), то $r_n^y \rightarrow y$ ($n \rightarrow \infty$).

Задача. Будет ли функция Хэвисайда

$$\mathcal{X}(x) = \begin{cases} 0 & \text{если } x \leq 0, \\ 1 & \text{если } x > 0 \end{cases} \quad (\text{A.15})$$

конструктивной?

Указание. Ответ: нет. Применить уже упоминавшуюся неразрешимость проблемы применимости алгоритма к паре "алгоритм, слово".

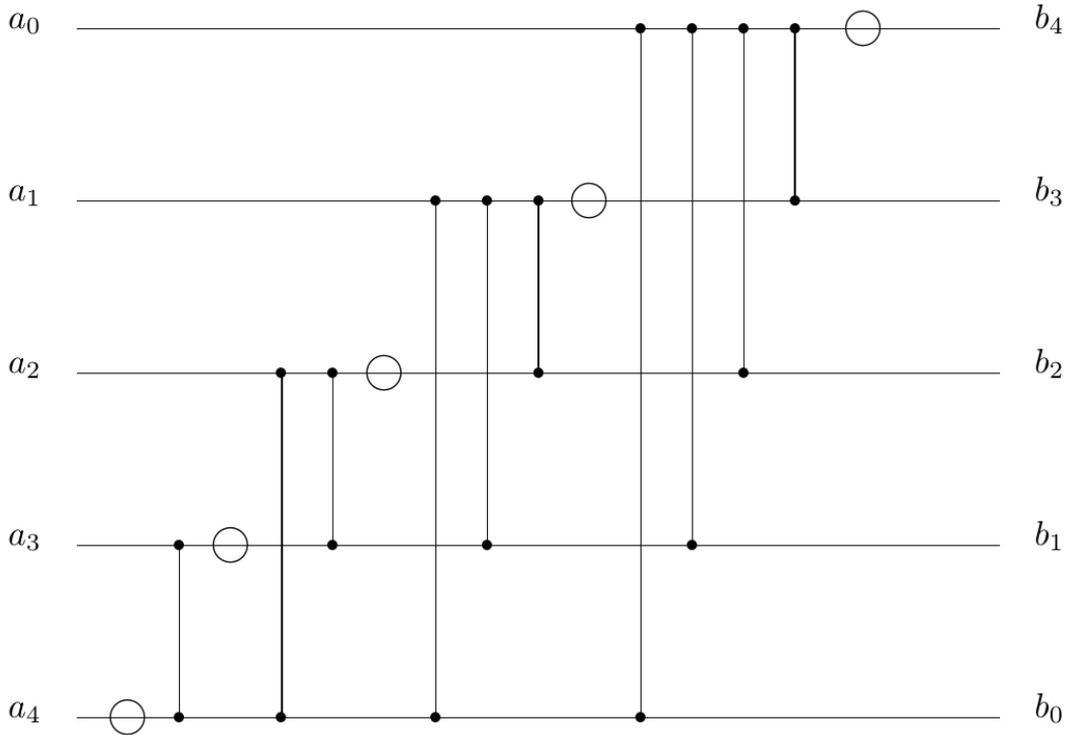
Справедливо и более сильное утверждение - Теорема Маркова - Цейтина ([59], [60]):

Любая конструктивная вещественная функция непрерывна.

Эта теорема говорит о том, что любая дискретизация реального процесса должна допускать сглаживание. Фактически, это именно то, что в частном случае доказали Боголюбов с Парасюком - корректность перенормировок квантовой электродинамики. Для моделирования на квантовом компьютере возможность такого сглаживания - четкий ориентир, которому надо следовать.

³Это концептуально то же, что и фейнмановские интегралы по траекториям, просто роль траектории играет диаграмма процесса, например, как фотон взаимодействует с атомом водорода; см. [2].

Рис. А.3: Реализация QFT^{-1} в виде массива квантовых гейтов.



А.7 Реализация квантового преобразования Фурье на квантовом компьютере

Договоримся представлять целое число вида $a = a_0 + a_0 2 + \dots + a_{l-1} 2^{l-1}$ базисным состоянием $|a_0 a_1 \dots a_{l-1}\rangle$ и располагать все a_j сверху вниз. Такое же соглашение примем и для выхода, только бинарные знаки b_j числа $b = b_0 + b_0 2 + \dots + b_{l-1} 2^{l-1}$ будем писать в обратном порядке - снизу вверх.

Окружности здесь обозначают преобразование W^1 , двухкубитовые операции имеют вид:

$$U_{k,j} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\pi/2^{k-j}} \end{pmatrix}, \quad k > j. \quad (\text{A.16})$$

Чтобы убедиться в этом, мы рассмотрим амплитуду перехода от базисного состояния a к базисному состоянию b . Это понятие законно, так называется соответствующий элемент матрицы рассматриваемого оператора. Здесь нам придется набраться терпения - подсчет идейно простой, но требует некоторого занудства. Сначала заметим, что модули всех таких амплитуд одинаковы и, так же как в обратном преобразовании Фурье, равны $1/2^{l/2}$, так что следить надо только за фазовым сдвигом, т.е. за аргументом ϕ комплексной амплитуды $e^{i\phi}$. Мы будем учитывать этот набег фазы, суммируя вклады от преобразований Уолша с вкладами от двухкубитных фазовых сдвигов. Введем для упрощения счета такое сокращенное обозначение: $b'_j = b_{l-1-j}$, $j = 0, 1, \dots, l-1$ - это понадобится для того, чтобы в нужный момент учесть обратный порядок расположения бинарных разрядов в a и b . Представим себе,

как меняются состояния при продвижении слева направо по проводам нашей схемы. Собственно переход от a к b происходит только при совершении операции Адамара, двухкубитные операции диагональны и базисные состояния не меняют, добавляя только слагаемые к фазе. Вклад от операции Адамара будет таким: $\pi a_j b'_j$. Это число не равно нулю только если оба j -х разряда наших входных и выходных чисел равны 1, что в точности соответствует определению преобразования Адамара. Вклад от двухкубитовой операции при $j < k$ будет $\pi a_j b'_k / 2^{k-j}$, потому что состояние a меняется на b только при прохождении устройства Адамара, а как видно из рисунка 6, такая двухкубитовая операция совершается в момент, когда j -й кубит еще в состоянии a_j , а k -й - уже в состоянии b'_k . Суммируя все эти слагаемые фазового сдвига, и учитывая, что целое кратное π можно вообще в расчет не принимать, получаем вот что:

$$\begin{aligned}
 & \pi \sum_{l>k>j \geq 0} \frac{a_j b'_k}{2^{k-j}} + \pi \sum_{l>j \geq 0} a_j b'_j = \\
 & 2\pi \sum_{l>j+k \geq 0} \frac{a_j b_k 2^{j+k}}{2^l} = \\
 & 2\pi \sum_{l>j, k \geq 0} \frac{a_j b_k 2^{j+k}}{2^l} = \\
 & \frac{2\pi}{2^l} \sum_{l>j \geq 0} a_j 2^j \sum_{l>k \geq 0} b_k 2^k = \frac{2\pi}{2^l}.
 \end{aligned} \tag{A.17}$$

Это как раз то, что требуется в определении обратного преобразования Фурье. Если нам понадобится совершить прямое преобразование, достаточно обратить порядок функциональных элементов в рассматриваемой схеме и поставить знак минус перед фазовым сдвигом в определении двухкубитных операций.

А теперь посмотрим на то, что мы только что совершили. Построенная нами схема, реализующая преобразование Фурье, содержит порядка l^2 функциональных элементов. Заметим, что если мы не будем гнаться за точностью этого преобразования, то можно будет отбросить все двухкубитные операции, в которых участвуют слишком далекие друг от друга кубиты. Действительно, знаменатель в $\pi/2^{k-j}$ для них делает всю дробь пренебрежимо малой, экспонента будет почти единицей, т.е. такие преобразования почти единичны и их можно отбросить. Схема тогда значительно упростится - ее размер вообще будет линейным - порядка $C l$, где константа C будет, конечно, зависеть от выбранной нами точности.

Литература

- [1] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Механика. — 5-е изд., стереотип. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2012. — 224 с. — 500 экз. — ISBN 978-5-9221-0819-5.
- [2] R.Feynman, QED: The strange theory of light and matter, Princeton University Press, 1985.
- [3] R.Feynman, D.Hibbs, Quantum mechanics and path integrals, 1984, Р.Фейнман, Д.Хиббс, Квантовая механика в интегралах по траекториям, Москва, Наука, Физ.-мат. лит.
- [4] Ю. И. Богданова, Д. В. Фастовецас, Б. И. Бантыш, А. Ю. Чернявский, И. А. Семенихин, Н. А. Богданова, К. Г. Катамадзе, Ю. А. Кузнецов, А. А. Кокин, В. Ф. Лукичев, Методы анализа качества элементной базы квантовых информационных технологий, Квантовая электроника, 2018, том 48, N 11, страницы 1016–1022.
- [5] Shor P. Algorithms for Quantum Computation: Discrete Logarithms and Factoring // Foundations of Computer Science, 1994 Proceedings., 35th Annual Symposium on — IEEE, 1994. — P. 124–134. — ISBN 0-8186-6580-7 — doi:10.1109/SFCS.1994.365700
- [6] P.Benioff, Quantum Mechanical Models of Turing Machines That Dissipate No Energy Phys. Rev. Lett., Vol. 48, 1982, pp. 1581–1585.
- [7] Richard P. Feynman, Simulating Physics with Computers, International Journal of Theoretical Physics, Vol 21, Nos. 6/7, 1982, pp. 467-488.
- [8] A. Barenco, C. H. Bennett, R. Cleve, D. P. DiVincenzo, N. Margolus, P. Shor, T. Sleator, J. Smolin, H. Weinfurter, Elementary gates for quantum computation Phys.Rev. A52 (1995) 3457.
- [9] А. Китаев, А. Шень, М. Вялый, Классические и квантовые вычисления, 1999. 192 с. ISBN 5-900916-35-9.
- [10] L. Fedichkin, M. Yanchenko, K. A. Valiev, Novel coherent quantum bit using spatial quantization levels in semiconductor quantum dot, Quantum Computers and Computing 1, 58 (2000).
- [11] L.Grover, A fast quantum mechanical algorithm for database search, Proceedings, 28th Annual ACM Symposium on the Theory of Computing (STOC), May 1996, pages 212-219. Proceedings, Melville, NY, 2006, vol. 810, electronic version: xxx.lanl.gov, quant-ph/0610052.

- [12] Y.Ozhigov, Lower bounds of a quantum search for an extreme point, Proc.Roy.Soc.Lond. A455 (1999) 2165-2172.
- [13] C.H. Bennett, E. Bernstein, G. Brassard and U.V. Vazirani, "Strengths and weaknesses of quantum computing" SIAM J. on Computing, Vol. 26, No. 5, pp. 1510–1523, 1997.
- [14] C. Zalka: Grover's quantum searching algorithm is optimal. Phys. Rev. A 60 (1999) 2746–2751.
- [15] Ozhigov Y.I. Quantum computers speed up classical with probability zero, Chaos, Solitons and Fractals, 1999, 10, 1147-1163.
- [16] C.Zalka, Simulating quantum systems on a quantum computer, Proceedings of The Royal Society A 454(1969):313-322, January 1998.
- [17] S.Wiesner, Simulations of Many-Body Quantum Systems by a Quantum Computer, arXiv:quant-ph/9603028.
- [18] P.W.Shor, Scheme for reducing decoherence in quantum computer memory, Phys. Rev. A 52, R2493(R), 1995.
- [19] H. Breuer and F. Petruccione, The Theory of Open Quantum Systems, Oxford (2002).
- [20] A. V. Kulagin, V. Y. Ladunov, Y. I. Ozhigov, N. A. Skovoroda, and N. B. Victorova "Homogeneous atomic ensembles and single-mode field: review of simulation results Proc. SPIE 11022, International Conference on Micro- and Nano-Electronics 2018, 110222C (15 March 2019); <https://doi.org/10.1117/12.2521763>.
- [21] R. Dicke, Phys. Rev. . 93, 99 (1954).
- [22] E.T. Jaynes, F.W. Cummings, Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser, Proc. IEEE 51 (1): 89–109, (1963). doi:10.1109/PROC.1963.1664
- [23] Michael Thomas Tavis, A Study of an N Molecule Quantized-Radiation-Field Hamiltonian, Dissertation, <https://arxiv.org/abs/1206.0078>.
- [24] P. Kok, K. Nemoto, and W. J. Munro, Properties of multi-partite dark states, e-print 2002 <http://lanl.arxiv.org/abs/quant-ph/0201138>.
- [25] Knill, E., Laflamme, R., Milburn, G. J. (2001). "A scheme for efficient quantum computation with linear optics". Nature. Nature Publishing Group. 409 (6816): 46–52
- [26] Gottesman, D., Chuang, I. L. (1999-11-25). "Demonstrating the viability of universal quantum computation using teleportation and single-qubit operations". Nature. 402 (6760): 390–393
- [27] Bennett, Charles H.; Brassard, Gilles; Crépeau, Claude; Jozsa, Richard; Peres, Asher; Wootters, William K. (1993-03-29). "Teleporting an unknown quantum state via dual classical and Einstein-Podolsky-Rosen channels". Physical Review Letters. 70 (13): 1895–1899.

- [28] Popescu, S., Knill-Laflamme-Milburn Quantum Computation with Bosonic Atoms, PRL 99, 130503 (2007).
- [29] G. Rempe, H. Walther, and N. Klein. Observation of quantum collapse and revival in a one-atom maser, Phys. Rev. Lett., 1987, Vol. 58, no. 4, p. 353.
- [30] C. Monroe, D. M. Meekhof, B. E. King, W. M. Itano, and D. J. Wineland, Demonstration of a Fundamental Quantum Logic Gate, Phys. Rev. Lett. 75, 4714 (1995).
- [31] Azuma H., Quantum computation with the Jaynes-Cummings model, Prog. Theor. Phys. 126, 369-385 (2011).
- [32] V. Ladunov, Y. Ozhigov, N. Skovoroda , Computer simulation of quantum effects in Tavis-Cummings model and its applications, SPIE Proceedings, vol. 10224, International Conference on Micro- and Nano-Electronics 2016; 102242X (2017) <https://doi.org/10.1117/12.2267190>
- [33] Plenio, M., et al., "Dephasing assisted transport: Quantum networks and biomolecules New J. Phys. 10, 113019 (2008).
- [34] Fenna, R. E.; Matthews, B. W. (1975). "Chlorophyll arrangement in a bacteriochlorophyll protein from Chlorobium limicola". Nature 258 (5536): 573–7. Bibcode:1975Natur.258..573F. doi:10.1038/258573a0
- [35] Y.Ozhigov, Dark states of atomic ensembles: properties and preparation, Proc. SPIE 10224, International Conference on Micro- and Nano-Electronics 2016, 102242Y (December 30, 2016); doi:10.1117/12.2264516.
- [36] A.V.Tsukanov, Optomechanical systems and quantum computing, Russian Microelectronics, September 2011, 40:333.
- [37] Бор Н., Дискуссии с Эйнштейном о проблемах теории познания в атомной физике // Атомная физика и человеческое познание — М.: ИЛ, 1961. — стр. 60.
- [38] Гейзенберг В. Физика и философия. Часть и целое. — М.: Наука, 1989. — 400 с. — ISBN 5-02-012452-9.
- [39] V.M.Akulin, Dynamics of Complex Quantum Systems, Theoretical and Mathematical Physics, Springer, 2006.
- [40] D. Bohm, "A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of "Hidden Variables" I". Physical Review. 1952, 85: 166–179.
- [41] A.Khrennikov, Vaxjo Interpretation of Wave Function: 2012, Reconsideration of Foundations-6, AIP, 1508, 244-252 (2012), DOI: 10.1063/1.4773136.
- [42] Aspect, Alain; Dalibard, Jean; Roger, Gérard (December 1982). "Experimental Test of Bell's Inequalities Using Time-Varying Analyzers". Physical Review Letters. 49 (25): 1804–1807.
- [43] Jian-Wei Pan; D. Bouwmeester; M. Daniell; H. Weinfurter; A. Zeilinger (2000). "Experimental test of quantum nonlocality in three-photon GHZ entanglement". Nature. 403 (6769): 515–519.

- [44] J. Bell, "On the Einstein Podolsky Rosen Paradox"; *Physics*, (1964), 1 (3): 195–200.
- [45] J. Bell, "On the problem of hidden variables in quantum mechanics"; *Reevue of Modern Physics*, (1966), 38, N3, стр. 447-452.
- [46] Aspect, Alain; Dalibard, Jean; Roger, Gérard, (1982), Experimental Test of Bell's Inequalities Using Time-Varying Analyzers. *Physical Review Letters*. 49 (25): 1804–1807. Bibcode:1982PhRvL..49.1804A. doi:10.1103/PhysRevLett.49.1804.
- [47] Daniel M. Greenberger, Michael A. Horne, Anton Zeilinger, Going Beyond Bell's Theorem, in: 'Bell's Theorem, Quantum Theory, and Conceptions of the Universe', M. Kafatos (Ed.), Kluwer, Dordrecht, 69-72 (1989).
- [48] AIP Conference Proceedings, vol. 962, Quantum Theory: Reconsideration of foundations -4, ed. Guillaume Adenier, Andrei Yu. Khrennikov, Pekka Lahti, Vladimir I. Man'ko and Theo M. Nieuwenhuizen, (2007), ISBN: 978-0-7354-0479-3.
- [49] F.Ablayev, C.Moore, C.Pollett, Quantum and Stochastic Branching Programs of Bounded Width, International Colloquium on Automata, Languages, and Programming , ICALP 2002: Automata, Languages and Programming pp 343-354.
- [50] Dovesi, R., Civalleri, B., Roetti, C., Saunders, V. R. and Orlando, R. (2005) Ab Initio Quantum Simulation in Solid State Chemistry, in *Reviews in Computational Chemistry*, Volume 21 (eds K. B. Lipkowitz, R. Larter and T. R. Cundari), John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ, USA. doi: 10.1002/0471720895.ch1
- [51] Y.I.Ozhigov, Distributed synthesis of chains with one-way biphotonic control, *Quantum Information and Computation*, vol. 18, 7-8, pp. 0592-0598.
- [52] Н. Н. Боголюбов, О. С. Парасюк (1955). «К теории умножения причинных сингулярных функций». *ДАН СССР* 100: 25.
- [53] S. Hameroff; R. Penrose, "Consciousness in the universe: A review of the 'Orch OR' theory". *Physics of Life Reviews*, 2014, 11 (1): 51–53.
- [54] Ф.Маттук, Фейнмановские диаграммы в проблеме многих тел, М., Мир, 1974.
- [55] V. P. Maslov, "Rotation of a Neutron in the Coat of Helium-5 as a Classical Particle for a Relatively Large Value of the Hidden Parameter t_{meas} ", *Math. Notes*, 103:1 (2018), 67–74.
- [56] В.В.Воеводин, Вл.В.Воеводин, Параллельные вычисления, БХВ-Петербург, 2002. — 608 с. ISBN 5-94157-160-7.
- [57] Limits to Parallel Computation: P-Completeness Theory, R. Greenlaw, H. J. Hoover, W. L. Ruzzo, Oxford University Press, 1995, pp. 336.
- [58] А.С.Холево, Некоторые оценки для количества информации, передаваемого квантовым каналом связи, *Пробл. передачи информ.*, 1973, том 9, выпуск 3, страницы 3–11.
- [59] А.А.Марков младший, О непрерывности конструктивных функций, *Успехи мат. наук*, 1954, 9, N 3 (61), стр. 226-229.

- [60] G.S.Tseitin, Algorithmic operators in the constructive metric spaces, Doklady Akademii Nauk USSR (rus), 1959, 128, N 1, pp.49-52.

Научное издание

ОЖИГОВ Юрий Игоревич
КВАНТОВЫЙ КОМПЬЮТЕР

Moscow State University of Lomonosov,
Institute of Physics and technology RAS,
e-mail: ozhigov@cs.msu.su

Издательство «МАКС Пресс»
Главный редактор: *Е.М. Бугачева*
Обложка: *А.В. Кононова*

Напечатано с готового оригинал-макета

Подписано в печать 26.04.2020 г.
Формат 60x90 1/8. Усл.печ.л. 21,5.
Тираж 500 (1-12) экз. Заказ 080.

Издательство ООО «МАКС Пресс»
Лицензия ИД N 00510 от 01.12.99 г.
119992, ГСП-2, Москва, Ленинские горы, МГУ имени М.В. Ломоносова,
2-й учебный корпус, 527 к.
Тел. 8(495)939-3890/93. Тел./Факс 8(495)939-3891.

Отпечатано в полном соответствии с качеством
предоставленных материалов в ООО «Фотоэксперт»
115201, г. Москва, ул. Котляковская, д.3, стр. 13



Юрий Игоревич Ожигов,
доктор физико-математических наук,
профессор Московского Государственного
Университета им. М.В.Ломоносова,
преподает на факультете Вычислительной
математики и кибернетики.

Недавний колоссальный успех в разработке квантовых компьютеров породил новую волну интереса к фундаментальному анализу их функционирования.

Большинство книг по квантовым вычислениям относится к одному из двух классов:

- а) чисто математическое представление (в основном линейная алгебра в сложном гильбертовом пространстве);
- б) чисто фундаментальные дискуссии.

Книга профессора Ю.И. Ожигова – это удачное сочетание обоих подходов. Помимо подробного изложения основ теоретических квантовых вычислений и квантовой теории в целом, книга содержит изложение основных фундаментальных проблем, связанных с квантовыми вычислениями. Эти проблемы очень сложны, и было бы наивно надеяться на их полное разрешение даже в такой хорошей книге. Однако обсуждение этих проблем, особенно в связи с жестким математическим формализмом, представлено на действительно высоком фундаментальном уровне. Книга может служить как глубоким введением в квантовые вычисления, так и стимулом для дальнейших исследований в области квантовой теории, ее основ и приложений даже за пределами физики, особенно в биологии.

*Андрей Хренников,
профессор университета Линнея, Векшьё, Швеция,
Директор Международного центра
математического моделирования в физике
и когнитивных науках*



ISBN 978-5-317-06403-7



9 785317 064037